

**Titre:** Développement de méthodes d'ordre élevé pour les écoulements non-newtoniens : application aux écoulements autour d'une sphère  
Title:

**Auteur:** Carole-Anne Daunais  
Author:

**Date:** 2022

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Daunais, C.-A. (2022). Développement de méthodes d'ordre élevé pour les écoulements non-newtoniens : application aux écoulements autour d'une sphère [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.  
Citation: <https://publications.polymtl.ca/10722/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/10722/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de recherche:** Bruno Blais  
Advisors:

**Programme:** Génie chimique  
Program:

**POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

**Développement de méthodes d'ordre élevé pour les écoulements  
non-newtoniens : application aux écoulements autour d'une sphère**

**CAROLE-ANNE DAUNAIS**

Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

Génie chimique

Novembre 2022

**POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Développement de méthodes d'ordre élevé pour les écoulements  
non-newtoniens : application aux écoulements autour d'une sphère**

présenté par **Carole-Anne DAUNAIS**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

**Nick VIRGILIO**, président

**Bruno BLAIS**, membre et directeur de recherche

**Jean-Yves TRÉPANIÉ**, membre

## REMERCIEMENTS

J'aimerais adresser mes plus francs remerciements à mon directeur de maîtrise Prof. Bruno Blais pour son soutien académique sans relâche, son enthousiasme face au projet et aux avancements, et pour avoir été pour moi un mentor. On me dit souvent que j'ai de la chance d'avoir un directeur absolument passionné, d'une expertise exceptionnelle et qui a à cœur la réussite de ses étudiant.e.s. Ça a été une fierté de compter parmi ses étudiant.e.s et de mener à terme un aussi beau projet sous sa tutelle. Merci Bruno.

Je souhaite aussi remercier tous.les celles et ceux que j'ai côtoyé.e.s dans mon laboratoire de recherche : Abbas, Amishga, Audrey, Clara, Cristina, Émile, Ghazaleh, Hélène, Jacopo, Jeanne, Laura, Lucka, Marion, Olivier, Paul, Saad, Shahab, Tiffany, Toni, Valérie et Victor. Entamer une maîtrise recherche en pleine pandémie mondiale, c'était un peu un coup de dés, et ça n'a pas été facile à tous les jours, mais iels ont fait toute la différence. Les journées passées au bureau ont embelli mon passage aux cycles supérieurs, j'ai pu y développer des amitiés qui m'ont assurément procuré un sentiment d'appartenance au groupe. J'en ressors absolument grandie et c'est en partie grâce à elles et eux.

J'ajoute un remerciement particulier à mon collègue Lucka, qui a grandement contribué à l'accomplissement de ce projet dans plusieurs de ses phases. J'aimerais rendre hommage aux nombreuses heures qu'il a passées à réfléchir à mon projet, durant lesquelles il était soucieux de sa réussite. Je l'ai apprécié à tous les jours.

Un peu à la blague, j'aimerais remercier Bastien pour l'aide qu'il m'a offerte, sans le savoir, à la rédaction de ce mémoire. Je me suis (très) souvent référé au sien, ça m'a pas mal aidée.

J'aimerais formellement remercier le Conseil de recherches en sciences et en génie du Canada ainsi que le Fonds de recherche du Québec - Natures et Technologies pour les bourses au 2e cycle offertes, qui m'ont permis d'entreprendre mes études. Je remercie également les contributeurs(trices) à `deal.II` pour leur soutien volontaire, ainsi qu'Alliance de recherche numérique du Canada et Calcul Québec pour les ressources numériques utilisées dans le cadre de ce projet.

Enfin, j'aimerais remercier Antoine pour son support inconditionnel. Merci Antoine d'avoir toujours cru en moi.

## RÉSUMÉ

Les liquides non-newtoniens, particulièrement les rhéofluidifiants, abondent dans l'industrie chimique. Ils sont caractérisés par une variation de leur viscosité en fonction du taux de cisaillement. Pour les rhéofluidifiants, plus le taux de cisaillement est élevé, plus la viscosité diminue localement. Ce projet vise à intégrer cette particularité à *Lethe*, un logiciel de mécanique des fluides libre d'accès en développement actif à Polytechnique Montréal. Le logiciel exploite la méthode des éléments finis pour résoudre une formulation dite «faible» des équations de Navier-Stokes incompressibles. Le projet consiste à redéfinir la formulation faible de l'équation de quantité de mouvement de Navier-Stokes incompressible en considérant la viscosité variable en fonction du taux de cisaillement. Pour modéliser la viscosité en fonction du taux de cisaillement, les modèles rhéologiques de la loi de puissance et de Carreau sont utilisés.

Le nouveau solveur est développé et implémenté dans le logiciel. La vérification du code est faite avec la méthode de solutions manufacturées (MMS); l'ordre de convergence de l'erreur n'est pas affecté par la modification de la formulation faible.

L'article publié porte sur les écoulements rhéofluidifiants autour d'une sphère avec l'emploi des modèles de loi de puissance et de Carreau, où on s'intéresse particulièrement aux effets rhéofluidifiants sur la force de traînée. La plage de Reynolds couverte est  $Re \in [0.1, 100]$ , avec  $n \in [0.3, 1.0]$  et, pour les fluides de Carreau, la plage de temps de relaxation adimensionnel est  $\Lambda \in [0.1, 100]$ . Les coefficients de traînée pour les simulations avec le modèle de loi de puissance sont comparés à des résultats de la littérature : on constate une adéquation avec ceux-ci. Une corrélation pour les coefficients de traînée est proposée pour les fluides de loi de puissance, avec un coefficient de détermination  $R^2 = 0.998$ . Les coefficients de traînée en fonction de  $Re$  et de  $n$  sont donnés pour l'ensemble des  $\Lambda$  étudiés. Comme les courbes de coefficient de traînée des fluides de Carreau ne sont pas comprises entre celles du fluide newtonien et celles d'un fluide de loi de puissance, à  $n$  égaux, il a semblé impossible pour les auteur.e.s d'élaborer une corrélation qui ait un sens physique pour le coefficient de traînée pour les fluides de Carreau. Les résultats de Carreau en régime de Stokes sont comparés à des résultats empiriques de la littérature, ce qui constitue un cas de validation de la méthode.

Des profils de viscosités sont montrés à  $Re = \{0.1, 100\}$  avec  $n = \{0.3, 0.9\}$  pour la loi de puissance, et ils sont comparés à des profils de viscosité pour des fluides de Carreau à  $\Lambda = 4$ , pour les mêmes  $Re$  et  $n$ . On constate que pour les simulations avec le modèle de loi de puissance, l'étendue de viscosité est largement supérieure que pour les simulations avec le

modèle de Carreau. En effet, le modèle de loi de puissance est mal posé pour des schémas d'écoulement où on retrouve des zones à faible taux de cisaillement. Ceci explique d'ailleurs les difficultés rencontrées par le solveur linéaire pour converger à de faibles  $n$ .

Ce travail permet une meilleure compréhension des effets rhéofluidifiants sur la force de traînée subie par une particule sphérique. Cette étape s'inscrit dans une démarche plus large qui vise à mieux comprendre les comportements de suspensions de particules dans les fluides non-newtoniens. Ce projet a mené à l'élaboration d'un outil robuste de simulation des écoulements non-newtoniens, qui pourra être utilisé à de multiples autres applications.

## ABSTRACT

Non-Newtonian fluids are abundant in the chemical processing industry, especially shear thinning fluids, that encounter a reduction in viscosity when shear stress is applied. This research project aims to incorporate this particularity of non-Newtonian fluids to Lethe, an open-source finite-element fluid dynamics software developed at Polytechnique Montréal. The software solves the incompressible Navier-Stokes equations in the weak form. The idea behind this project is to redefine the weak form of the momentum Navier-Stokes equation to encounter for the non-Newtonian effects. The power-law model and the Carreau model are used to model the viscosity as a function of shear rate.

This new solver is developed and implemented in Lethe. We verify the implementation using the Method of Manufactured Solutions (MMS) and demonstrate that the implementation preserves the order of accuracy of the finite element scheme.

The model is used to simulate shear thinning flow past a sphere, using both the power-law model and the Carreau model, where we investigate the impact of shear thinning behaviours on the drag force. The simulations cover  $Re \in [0.1, 100]$  and  $n \in [0.1, 1.0]$ , and the Carreau modeled simulations cover dimensionless relaxation times  $\Lambda \in [0.1, 100]$ . Drag coefficients using the power-law model are compared to results in the literature. The drag coefficients from the literature fall on the proposed correlation. We provide a correlation for the drag coefficient calculated using the power-law model. The resulting coefficient of determination is  $R^2 = 0.998$ . Drag coefficients for Carreau modeled simulations are also given. Since the drag coefficient is not bound by the Newtonian predictions and the power-law model predictions, the authors concluded it was not possible to have a correlation for Carreau simulations that had physical meaning.

Viscosity profiles are shown for  $Re = \{0.1, 100\}$  with  $n = \{0.3, 0.9\}$  for the power-law model. Carreau modeled viscosity profiles are shown for the same  $Re$  and  $n$  range at  $\Lambda = 4$ . We notice that the viscosity spectrum is much larger for power-law simulations than for Carreau simulations. The power-law model is ill-posed for regions of no to low shear rates, and this leads in excessively high viscosity far from the sphere. This partially explains the difficulties encountered with the linear solver for low values of  $n$ .

This work provides a better understanding of the shear thinning effects on the drag force of a single sphere. This step leads toward a better understanding of particle suspensions in shear thinning fluids, namely in fluidized beds. This work also provides a robust framework to simulate non-Newtonian flow for many other flow schemes, to study their behaviour.

## TABLE DES MATIÈRES

|  |     |
|--|-----|
| REMERCIEMENTS . . . . .  | iii |
| RÉSUMÉ . . . . .   | iv  |
| ABSTRACT . . . . .   | vi  |
| TABLE DES MATIÈRES . . . . .   | vii |
| LISTE DES TABLEAUX . . . . .   | x   |
| LISTE DES FIGURES . . . . .  | xi  |
| LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS . . . . .                             | xiv |
| LISTE DES ANNEXES . . . . .  | xv  |
| CHAPITRE 1 INTRODUCTION  | 1   |
| CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE  | 4   |
| 2.1 Mécanique des milieux continus . . . . .                           | 4   |
| 2.1.1 Contraintes . . . . .  | 4   |
| 2.2 Mécanique des fluides . . . . .                                    | 7   |
| 2.2.1 Équations de Navier-Stokes . . . . .                             | 7   |
| 2.2.2 Écoulements non-newtoniens . . . . .                             | 8   |
| 2.3 Écoulement autour d'une sphère . . . . .                           | 11  |
| 2.3.1 Quelques notions d'hydrodynamisme . . . . .                      | 12  |
| 2.3.2 Cas particulier : écoulement autour d'une sphère . . . . .       | 15  |
| 2.3.3 Effets non-newtoniens . . . . .                                  | 16  |
| 2.4 Modélisation numérique . . . . .                                   | 18  |
| 2.4.1 Méthode des éléments finis (FEM) . . . . .                       | 19  |
| CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION                                | 26  |
| 3.1 Objectifs du mémoire et organisation . . . . .                     | 26  |
| 3.2 Lethe . . . . .  | 27  |
| 3.2.1 Méthode de conditions immergées <i>sharp-interface</i> . . . . . | 29  |



|            |   |    |
|------------|---|----|
| CHAPITRE 4 | ARTICLE 1 : AN EXTENSIVE STUDY OF SHEAR THINNING FLOW AROUND A SPHERICAL PARTICLE FOR POWER-LAW AND CARREAU FLUIDS.           | 31 |
| 4.1        | Abstract . . . . .  | 31 |
| 4.2        | Introduction . . . . .  | 32 |
| 4.3        | Governing equations and numerical implementation . . . . .  | 35 |
| 4.3.1      | Shear thinning flow . . . . .   | 35 |
| 4.3.2      | Finite element formulation . . . . .  | 37 |
| 4.3.3      | Drag force . . . . .  | 39 |
| 4.4        | Verification of the model using the Method of Manufactured Solutions . . . . .  | 39 |
| 4.5        | Non-Newtonian flow past a spherical particle : Results . . . . .  | 41 |
| 4.5.1      | Methodology . . . . .   | 41 |
| 4.5.2      | Results and discussion . . . . .  | 47 |
| 4.6        | Conclusion . . . . .  | 59 |
| 4.7        | Acknowledgements . . . . .  | 61 |
| CHAPITRE 5 | DÉVELOPPEMENT DE MÉTHODES D'ORDRE ÉLEVÉ POUR DES ÉCOULEMENTS NON-NEWTONIENS : APPLICATION AUX ÉCOULEMENTS AUTOUR D'UNE SPHÈRE | 62 |
| 5.1        | Formulation faible . . . . .  | 62 |
| 5.2        | Solveur Grad-Div non stabilisé . . . . .  | 64 |
| 5.3        | Vérification de code . . . . .  | 64 |
| 5.3.1      | Modèle de Carreau . . . . .   | 64 |
| 5.3.2      | Modèle de loi de puissance . . . . .  | 66 |
| 5.4        | Quelques exemples de profils de viscosité . . . . .   | 68 |
| 5.5        | Retour sur la plage de $n$ traitée dans l'article 1 . . . . .   | 71 |
| 5.6        | Retour sur les méthodes d'ordre élevé . . . . .   | 72 |
| CHAPITRE 6 | DISCUSSION GÉNÉRALE   | 75 |
| CHAPITRE 7 | CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS   | 78 |
| 7.1        | Synthèse des travaux . . . . .  | 78 |
| 7.2        | Limitations de la solution proposée . . . . .   | 79 |
| 7.3        | Travaux futurs . . . . .  | 79 |
| 7.4        | Mot de la fin . . . . .   | 80 |
| RÉFÉRENCES | . . . . .   | 81 |

ANNEXES . . . . . 87

## LISTE DES TABLEAUX

|             |   |    |
|-------------|---|----|
| Tableau 2.1 | Quelques exemples de modèles pour le coefficient de traînée en fonction de $Re$ pour un écoulement newtonien autour d'une particule sphérique lisse. . . . .                      | 17 |
| Table 4.1   | Values for correlation equation (4.25). . . . .   | 53 |
| Table 4.2   | Dimensionless maximal shear rate on the surface of the sphere for $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model. . . . .                      | 53 |
| Table 4.3   | Dimensionless upstream-downstream pressure difference on the surface of the sphere for $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model. . . . . | 54 |
| Table 4.4   | Comparison of the dimensionless wake length ( $L/D$ ) between present work values and values from the literature [1,2] for power-law fluids. . . . .                              | 54 |
| Tableau 5.1 | $\eta_{\max}/\eta_{\min}$ pour les fluides de la loi de puissance et de Carreau . . . . .   | 71 |

## LISTE DES FIGURES

|             |   |    |
|-------------|---|----|
| Figure 1.1  | Illustration de la disposition des molécules d'un fluide soumis à une contrainte de cisaillement pour des écoulements rhéofluidifiants et rhéoépaississants. . . . .  | 2  |
| Figure 2.1  | Schéma du tenseur des contraintes totales au point $P$ . . . . .  | 5  |
| Figure 2.2  | Profil de la contrainte en un point en fonction du taux de cisaillement   | 9  |
| Figure 2.3  | Profil empirique de la viscosité en fonction du taux de cisaillement . .  | 10 |
| Figure 2.4  | Viscosité en fonction du taux de cisaillement par le modèle de la loi de puissance . . . . .  | 11 |
| Figure 2.5  | Écoulement de Poiseuille . . . . .  | 12 |
| Figure 2.6  | Viscosité en fonction du taux de cisaillement par le modèle de Carreau  | 13 |
| Figure 2.7  | Profil du coefficient de traînée $C_D$ pour une sphère lisse en fonction du nombre de Reynolds . . . . .  | 16 |
| Figure 2.8  | Exemples d'éléments en 2-dimensions et en 3-dimensions . . . . .  | 20 |
| Figure 2.9  | Polynômes d'interpolation linéaire et quadratique pour un élément en 2-dimensions . . . . .   | 22 |
| Figure 2.10 | Localisation des points de quadrature de Gauss pour un élément en 2-dimensions quadrilatère . . . . .   | 24 |
| Figure 3.1  | Représentation de la frontière du solide $\Gamma_s$ immergée dans le domaine du fluide $\Omega$ . . . . .   | 30 |
| Figure 4.1  | Viscosity regions for shear thinning flows, in log-log scale, with two Newtonian plateaus (1 & 4), a transition (3) to the descending section (2) (adapted from [3]). . . . .   | 36 |
| Figure 4.2  | Evolution of the $\mathcal{L}^2$ norm of the error on the velocity profile of a Carreau fluid for different scheme orders when operating a global mesh refinement. The order of convergence is consistent with the order of the underlying FEM interpolation. . . . . | 41 |
| Figure 4.3  | Geometry of the calculation domain and position of the particle for all simulations, with $D$ the diameter of the spherical particle. The dimension $H$ will be determined in section 4.5.1. . . . .  | 42 |
| Figure 4.4  | Evolution of the drag coefficient $C_D$ as $H/D$ is increased at $\text{Re} = 0.1$ for Newtonian flow, considering $C_{D,H/D=75} = 244.7$ . With an error of less than 1%, the $H/D$ ratio of 60 is chosen. . . . .   | 44 |

|             |  |    |
|-------------|--|----|
| Figure 4.5  | Evolution of the drag coefficient ( $C_D$ ) as the cells near the particle are refined, for different $n$ values for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$ , using the power-law model. The chosen mesh size ( $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ ) is in grey. . . . .  | 45 |
| Figure 4.6  | Examples of $xy$ -plane mesh slices used for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$ , with $H/D = 60$ around the spherical particle (in turquoise). . . . .   | 46 |
| Figure 4.7  | Evolution of the drag coefficient ( $C_D$ ) for $n = \{0.5, 0.7, 0.9\}$ for a series of minimal shear rate ( $\dot{\gamma}_{\min}$ ) values used for power-law simulations, at $\text{Re} = 0.1$ . A $\dot{\gamma}_{\min} < 10^{-4}$ is ideal for $\text{Re} = 0.1$ , for all $n$ . . . . .  | 47 |
| Figure 4.8  | Comparison between drag coefficient models given in the literature and our results for $\text{Re} \in [0.1, 100]$ at $n = 1$ (the ideal ratio is $C_D/C_{D,\text{Lethe}} = 1$ , in black) [1, 4–8]. The chosen model is Clift et al.’s, in yellow. The abrupt slope change in the yellow curve at $\text{Re} \approx 23$ is due to the shift in the formulation at $\text{Re} = 20$ (see equation (4.23)). . . . . | 49 |
| Figure 4.9  | Simulation drag coefficient ratios ( $C_D/C_{D,0}$ ), with $C_{D,0}$ defined in (4.23), for $\text{Re}$ from 0.1 to 100 for all simulated $n$ values using the power-law model. The subtle slope change at $\text{Re} \approx 23$ is due to the formulation change in (4.23). . . . .  | 50 |
| Figure 4.10 | Calculated drag coefficients for power-law fluids from the Lethe simulations and the suggested correlation compared to results from Tripathi et al. [9], Dhole et al. [1] and Song et al. [2, 10]. Newtonian results ( $n = 1$ in (a)) are also compared to Johnson & Patel’s [11]. . . . .  | 51 |
| Figure 4.11 | $xy$ -plane velocity profiles with streamlines (in white) around the spherical particle (in turquoise) for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model. . . . .   | 52 |
| Figure 4.12 | Evolution of the ratio between the pressure drag ( $C_{D,p}$ ) and the friction drag ( $C_{D,f}$ ) for $n = \{1, 0.9, 0.7, 0.5\}$ when increasing the Reynolds number using the power-law model. . . . .   | 55 |
| Figure 4.13 | Simulation drag coefficient ratios ( $C_D/C_{D,0}$ ), with $C_{D,0}$ defined in (4.23) for $\text{Re}$ from 0.1 to 100 comparing Newtonian flow, power-law modeled flow and all Carreau modeled simulations for (a) $n = 0.9$ , (b) $n = 0.7$ , (c) $n = 0.5$ and (d) $n = 0.3$ . . . . .  | 56 |
| Figure 4.14 | $xy$ -plane velocity profile with streamlines (in white) around spherical particle (in turquoise) for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = 0.3$ using the Carreau model with $\Lambda = \{0.4, 4\}$ . . . . .  | 58 |

|             |   |    |
|-------------|---|----|
| Figure 4.15 | Drag coefficient correction factors ( $X$ in $C_D = \frac{24}{\text{Re}}X$ ) at $\text{Re} = 0.1$ simulated in Lethe using the Carreau model as a function of the dimensionless relaxation time $\Lambda$ , compared to experimental data provided by Chhabra & Uhlherr [12] in the creeping flow regime. . . . . | 60 |
| Figure 5.1  | Profil de l'amplitude de la vitesse et de la viscosité avec le modèle de Carreau. . . . .   | 65 |
| Figure 5.2  | Évolution de la norme $\mathcal{L}^2$ de l'erreur avec le modèle de Carreau . . .   | 66 |
| Figure 5.3  | Profil de l'amplitude de la vitesse et de la viscosité avec le modèle de loi de puissance. . . . .  | 67 |
| Figure 5.4  | Évolution de la norme $\mathcal{L}^2$ de l'erreur avec le modèle de loi de puissance  | 68 |
| Figure 5.5  | Profil de viscosité pour le modèle de loi de puissance. . . . .   | 69 |
| Figure 5.6  | Profil de viscosité pour le modèle de Carreau. . . . .  | 70 |
| Figure 5.7  | Évolution de l'erreur relative sur le $C_D$ en fonction du nombre de DOF pour des éléments Q1Q1 et Q2Q1 . . . . .   | 73 |
| Figure 5.8  | Durée du calcul en fonction de l'erreur relative sur le $C_D$ pour des éléments Q1Q1 et Q2Q1 . . . . .  | 74 |
| Figure A.1  | Évolution de la norme $\mathcal{L}^2$ de l'erreur avec le modèle de Carreau en employant le solveur GD . . . . .  | 87 |
| Figure A.2  | Évolution de la norme $\mathcal{L}^2$ de l'erreur avec le modèle de loi de puissance en employant le solveur GD . . . . .   | 88 |

**LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS**

|         |   |
|---------|---|
| FEM     | Finite Element Method (Méthode des éléments finis)  |
| CFD     | Computational Fluid Dynamics (Mécanique des fluides numériques)   |
| CFD-DEM | Computational Fluid Dynamics - Discrete Element Method (Mécanique des fluides numérique couplée à une/des méthode(s) d'éléments discrets) |
| NSI     | Équations de Navier-Stokes incompressibles  |
| MMS     | Method of Manufactured Solutions (Méthode des Solutions Manufacturées)  |
| DOF     | Degré de liberté  |
| GLS     | Galerkin-Least-Square   |
| GD      | Grad-Div  |
| GMRES   | Generalized Minimal Residual  |
| URPEI   | Unité de recherche en procédés d'écoulement industriels   |

**LISTE DES ANNEXES**

|          |   |    |
|----------|---|----|
| Annexe A | Vérification de code : solveur Grad-Div . . . . . | 87 |
|----------|---|----|



## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Les écoulements non-newtoniens constituent une branche de la rhéologie, qui est l'étude de la déformation et de l'écoulement de la matière sous l'effet d'une force ; cette matière ne respecte pas la loi d'élasticité de Hooke (caractère solide) ni la loi de viscosité de Newton (caractère fluide) [13,14]. Concrètement, la rhéologie s'intéresse à la matière dont l'élongation n'est pas proportionnelle à la force subie, et/ou dont le taux de cisaillement, ou taux de déformation, n'est pas non plus proportionnel à la force. Les écoulements non-newtoniens sont précisément les fluides ne collant pas à la loi de viscosité de Newton.

En fait, les solides et les fluides sont-ils intrinsèquement distincts ? Y a-t-il une distance interatomique seuil qui permette de dire s'il s'agit d'un solide ou d'un liquide ? De la pâte à pain, c'est solide, ou plutôt fluide ? La réponse n'est pas évidente. Les fervants de mécanique du solide diront qu'il s'agit d'un solide, évidemment ! En mécanique des fluides, on dira plutôt que tout est fluide à raison d'une échelle temporelle. Le nombre de Deborah définit le niveau de fluidité d'un matériau (1.1).

$$\text{De} = \frac{\lambda}{t_r} \quad (1.1)$$

$\lambda$  représente le temps de relaxation intrinsèque du matériau, et  $t_r$  est le temps de résidence, ou durée de l'expérience [3]. Si on dépose la pâte à pain sur un treilli, elle sera solide les quelques secondes suivantes, mais après quelques heures, la pâte aura partiellement coulé entre les lattes. Tout est fluide, à une échelle temporelle donnée. L'eau par exemple, à température pièce, est instantanément fluide : elle a pour temps de relaxation  $\lambda = 0$ . On dit que c'est un liquide newtonien.

Outre la pâte à pain, il existe plusieurs exemples de la vie de tous les jours de fluides non-newtoniens. On distingue les écoulements non-newtoniens généralisés en deux grandes catégories : les rhéofluidifiants et les rhéoépaississants. Les rhéofluidifiants sont les fluides pour lesquels la viscosité diminue lorsque le taux de cisaillement augmente. La peinture qu'on applique sur les murs est un exemple de liquide rhéofluidifiant. Lorsqu'on applique la peinture sur le mur, on applique une force sur la peinture avec le pinceau, elle se liquéfie et s'étend bien. Quand on retire le pinceau du mur, la peinture ne coule pas le long du mur comme le ferait l'eau, par exemple. Sans sécher, elle épaisse ; sa viscosité augmente. Au repos, la peinture est beaucoup plus épaisse que sous une force appliquée.

À l'inverse, les liquides rhéoépaississants sont caractérisés par une augmentation de la visco-

sité lorsque le taux de cisaillement augmente. Une pâte formée de fécule de maïs et d'eau en est un bon exemple : la pâte est solide lorsqu'on la manipule, mais elle se liquéfie et glisse entre les doigts lorsqu'on la relâche.

Essentiellement, le comportement non-newtonien des fluides se manifeste à l'échelle microscopique. Pour les liquides rhéofluidifiants, lorsqu'une force de cisaillement est appliquée, les molécules composant le liquide «s'alignent» parallèlement au cisaillement, ce qui facilite le mouvement associé à la force appliquée [15]. C'est plutôt l'inverse pour les fluides rhéoépaississants : soumis à un contrainte de cisaillement, les molécules se cramponnent formant des agrégats, et ça limite le mouvement de la force, d'où l'épaississement (voir figure 1.1).

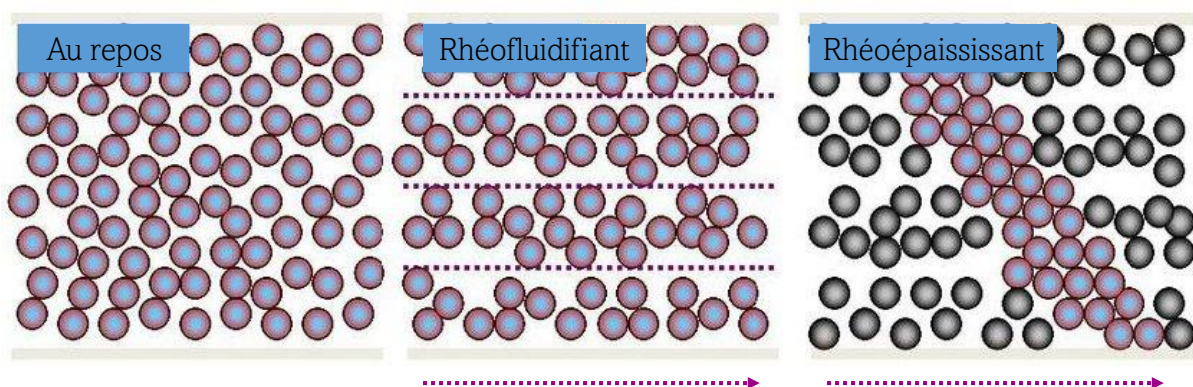


FIGURE 1.1 Illustration de la disposition des molécules d'un fluide soumis à une contrainte de cisaillement dans la direction de la flèche pointillée violet pour des écoulements rhéofluidifiants et rhéoépaississant (adaptée de [16]).

Le caractère rhéofluidifiant des plastiques fondus leur confère une propriété nécessaire à la fabrication de contenants, et autres objets plastiques qui requièrent un moulage. Par exemple, les bouteilles d'eau en polyéthylène sont formées par extrusion-gonflage, où le plastique est fondu et gonflé en film, puis refroidi dans un moule. Plus faible est la viscosité du plastique fondu, plus mince sera le film de polymère formé [17]. Et plus mince est le film, plus flexible sera le contenant, et moins de plastique sera nécessaire pour la fabrication d'une seule bouteille.

Les liquides rhéoépaississants ont gagné en intérêt dans les dernières années dans le domaine des matériaux et textiles de protection, par exemple pour les vestes de protection contre les projectiles. L'épaississement d'un liquide à l'endroit touché sur la veste permet de freiner la trajectoire du projectile [15].

Ces fluides non-newtoniens abondent dans l'industrie chimique, que ce soit en pharmaceutique, en cosmétique, en agroalimentaire ou en polymères. L'étude de leur comportement

passé inévitablement par des modèles rhéologiques de prédiction de leur viscosité en fonction du taux de cisaillement. Dans un contexte industriel 4.0, on cherche à prévoir le comportement des fluides non-newtoniens à l'aide de logiciels de simulation d'écoulement. L'objectif de ce projet de maîtrise est de développer des méthodes d'ordre élevé pour les écoulements non-newtoniens, et d'intégrer ces méthodes dans le logiciel de mécanique des fluides libre d'accès Lethé. On verra dans la revue de littérature les concepts clés au projet ainsi que l'état de l'art sur les fluides non-newtoniens pour un schéma typique d'écoulement autour d'une sphère. La méthodologie au projet sera présentée. L'article scientifique, intitulé «An Extensive Study of Shear Thinning Flow Around a Spherical Particle for Power-Law and Carreau Fluids» soumis au *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* est incorporé au document, en plus du contenu complémentaire nécessaire au projet de recherche qui n'est pas présenté dans l'article. La conclusion au document portera sur la synthèse des travaux de recherche, sur les limitations de la solution proposée, et sur les travaux futurs.

## CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

L'objectif principal de ce projet est le développement de méthodes numériques traitant des écoulements non-newtoniens. Les équations régissant la physique des écoulements seront donc abordées, avec une attention particulière apportée aux écoulements non-newtoniens. Pour introduire les modèles rhéologiques utilisés, un survol sur la mécanique des milieux continus est de mise.

L'étude traitera aussi d'écoulements non-newtoniens autour d'une sphère, aspect qui constitue le cœur de la contribution scientifique de ce mémoire. Des notions d'hydrodynamisme autour d'une particule sphérique seront abordées.

Pour éviter de répéter certains aspects de la revue de littérature qui seront discutés dans l'article I du Chapitre 4, des références y seront faites dans ce présent chapitre.

### 2.1 Mécanique des milieux continus

La mécanique des milieux continus s'intéresse au mouvement et à la déformation des solides et des fluides [18]. On y étudie donc le comportement de la matière en phase quelconque (gaz, liquide ou solide). Les atomes et molécules de la matière sont plus ou moins distants, dépendamment de leur niveau d'excitation, ce qui implique que les propriétés du milieu varient drastiquement à l'échelle microscopique [19]. On appelle *milieu continu* un matériau en phase quelconque pour lequel il est assumé que ses quantités intrinsèques (viscosité, masse volumique, etc.) et extrinsèques (vitesse, pression, température, etc.) évoluent dans l'espace de manière continue de sorte que les dérivées spatiales de chacune de ces quantités existent en tout point [14]. Cette hypothèse permet d'analyser la matière à une échelle mésoscopique en considérant un volume fini  $\Delta V$  autour d'un point d'intérêt  $P$  au sein du milieu.

#### 2.1.1 Contraintes

Les contraintes subies par la matière constituent un élément clé à la mécanique des milieux continus. Ce concept sera rappelé à plusieurs reprises de la revue de littérature.

La contrainte ( $\sigma = \sigma(\underline{x})$ ) en un point est définie comme étant la force  $F$  subie divisée par une surface  $A$  (2.1). Concrètement, cette quantité intensive représente la force en un point

du milieu continu subie par son voisinage [20].

$$\sigma = \frac{F}{A} \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \text{Pa} \quad (2.1)$$

La contrainte est une quantité tridimensionnelle représentée sous forme d'un tenseur de second ordre qu'on appelle tenseur des contraintes (noté  $\underline{\sigma}$ ). À la figure 2.1, la contrainte au point  $P$  est séparée par surface. Les surfaces ont pour vecteurs normaux orthogonaux  $\hat{e}_1$ ,  $\hat{e}_2$  et  $\hat{e}_3$  en adéquation avec le système d'axes  $(x_1, x_2, x_3)$ . Ainsi,  $\underline{a}$  est la contrainte au point  $P$  sur la surface  $\hat{e}_1$ ,  $\underline{b}$  est la contrainte au point  $P$  sur la surface  $\hat{e}_2$ , puis  $\underline{c}$  est la contrainte au point  $P$  sur la surface  $\hat{e}_3$ . La composante  $\underline{a}$  s'écrit comme suit :

$$\underline{a} = \sigma_{11}\hat{e}_1 + \sigma_{12}\hat{e}_2 + \sigma_{13}\hat{e}_3 \quad (2.2)$$

où  $\sigma_{11}$  est la grandeur de la contrainte sur la surface  $\hat{e}_1$  dans la direction 1,  $\sigma_{12}$  est la grandeur de la contrainte sur la surface  $\hat{e}_1$  dans la direction 2 et  $\sigma_{13}$  est la grandeur de la contrainte sur la surface  $\hat{e}_1$  dans la direction 3.

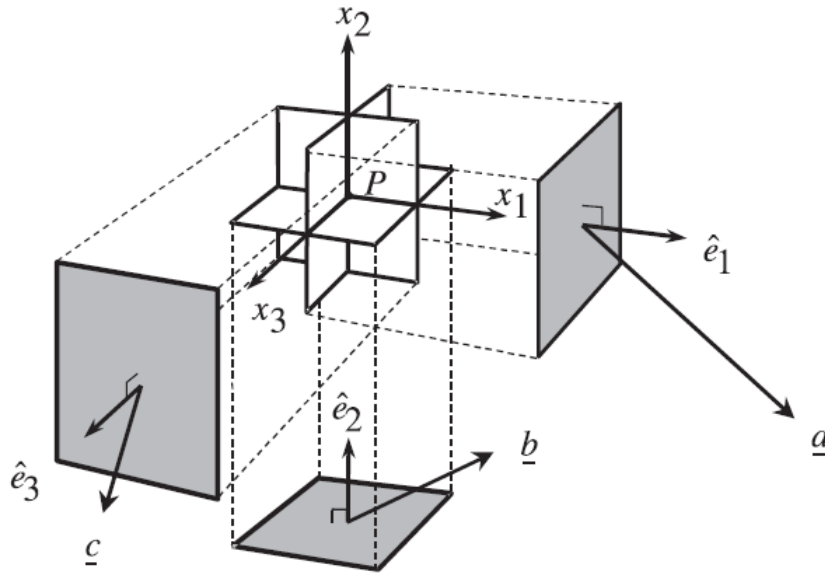


FIGURE 2.1 Schéma des composantes du tenseur des contraintes totales au point  $P$  dans un fluide en écoulement (tirée de [13]).

Le tenseur des contraintes totales, au point  $P$ , est

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\Pi}} &= \begin{bmatrix} \underline{a}^T \\ \underline{b}^T \\ \underline{c}^T \end{bmatrix}_{123} \\
&= \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}_{123}
\end{aligned} \tag{2.3}$$

On note deux contributions aux contraintes. La première dérive de l'effet de la pression sur le fluide. La pression est une quantité isotrope qui s'exerce en direction perpendiculaire aux surfaces. Ainsi, la contribution de la pression aux contraintes s'écrit :

$$\begin{bmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{bmatrix}_{123} = p\underline{\underline{I}}$$

où  $p$  est la pression relative au point  $P$ , et  $\underline{\underline{I}}$  est le tenseur identité [13]. La seconde contribution au bilan des contraintes, notée  $\underline{\underline{\tau}}$ , découle de la déformation interne du fluide. On appelle ce terme le tenseur des contraintes de cisaillement, ou tenseur des contraintes visqueuses en mécanique des fluides. Le tenseur des contraintes totales devient donc :

$$\underline{\underline{\sigma}} = p\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}} \tag{2.4}$$

L'équation constitutive la plus générale pour le tenseur des contraintes visqueuses est donnée en (2.5) où  $\eta$  est la viscosité dynamique de cisaillement,  $\kappa$  la viscosité dynamique dilatatoire associée au comportement compressible du fluide,  $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}$  le tenseur du taux de cisaillement au point  $P$  et  $\underline{u}$  la vitesse au point  $P$  [13].

$$\underline{\underline{\tau}} = -\eta\underline{\underline{\dot{\gamma}}} + \left( \frac{2}{3}\eta - \kappa \right) (\nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{I}} \tag{2.5}$$

Le taux de cisaillement correspond au taux de déformation du fluide en un point (2.6), avec  $\nabla \underline{u}$  le gradient de vitesse au point  $P$ .

$$\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T \tag{2.6}$$

## 2.2 Mécanique des fluides

La mécanique des fluides est l'étude de la dynamique des liquides et des gaz des points de vue mathématique et expérimental. Cette branche de la mécanique des milieux continus s'intéresse au mouvement du fluide en fonction de la géométrie de l'écoulement, des propriétés intrinsèques du fluide et des forces et contraintes subies par celui-ci.

### 2.2.1 Équations de Navier-Stokes

Les équations régissant la dynamique des fluides sont les équations de Navier-Stokes. L'équation de continuité et l'équation du mouvement de Navier-Stokes sont données en (2.7) et (2.8), respectivement, avec  $\rho = \rho(\underline{x}, t)$  la masse volumique du fluide,  $\underline{u} = \underline{u}(\underline{x}, t)$  la vitesse du fluide et  $\underline{f}$  un terme source.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \underline{u}) = 0 \quad (2.7)$$

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho \underline{u})}{\partial t}}_{\text{Transitoire}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \underline{u} \otimes \underline{u})}_{\text{Advection}} = \underbrace{-\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}}_{\text{Contraintes}} + \underbrace{\underline{f}}_{\text{Source}} \quad (2.8)$$

La divergence du tenseur des contraintes totales (voir (2.4)) est associative en ses deux termes, et s'écrit :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (2.9)$$

Il existe une troisième équation de Navier-Stokes, celle du bilan énergétique. Elle ne sera pas discutée dans ce mémoire.

Dès maintenant, supposons qu'on étudie un écoulement incompressible, ce qui simplifiera les équations précédemment discutées. Notons que cette hypothèse ne peut être faite que lorsque le nombre de Mach est petit, tel que la vitesse d'écoulement du fluide est petite par rapport à la vitesse à laquelle voyage le son dans ce fluide [21].

Si la masse volumique du fluide ne varie ni en temps, ni en espace, l'équation de continuité (2.7) devient :

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (2.10)$$

puis l'équation du bilan de quantité de mouvement (2.8) devient :

$$\rho \left( \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right) = -\nabla p - \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} + \underline{f} \quad (2.11)$$

Considérant un fluide incompressible, en intégrant l'équation (2.10) dans (2.5), l'équation

constitutive du tenseur des contraintes visqueuses se simplifie également :

$$\underline{\underline{\tau}} = -\eta \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (2.12)$$

Cette équation définissant le tenseur des contraintes visqueuses est l'équation constitutive newtonienne incompressible, c'est-à-dire qu'elle a trait au comportement newtonien des écoulements stipulant que la contrainte visqueuse est proportionnelle au taux de cisaillement, avec la viscosité comme constante de proportionnalité [22].

### 2.2.2 Écoulements non-newtoniens

Un écoulement est non-newtonien lorsque la viscosité du fluide varie en fonction du taux de cisaillement local [23]. Ainsi, pour un écoulement considéré incompressible, l'équation constitutive du tenseur des contraintes de cisaillement est la suivante :

$$\underline{\underline{\tau}} = -\eta(\dot{\gamma}) \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (2.13)$$

où  $\eta$ , la viscosité dynamique du fluide, varie donc d'un endroit à l'autre au sein de l'écoulement, puisque  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}(x)$ . Les plastiques fondus constituent un exemple de matériau fluide pour lequel la viscosité diminue en le mélangeant vigoureusement. Autrement dit, plus la vitesse de mélange du plastique fondu est élevée, plus le plastique se fluidifie. Les plastiques fondus sont rhéofluidifiants. Tel que montré à la figure 2.2b, pour les fluides rhéofluidifiants, la viscosité effective du fluide, qui est la pente instantanée de la courbe, diminue lorsque la norme du tenseur de taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  augmente. En effet, plus le taux de cisaillement est élevé, plus la viscosité du fluide diminue. À l'inverse, certains fluides se solidifient en augmentant leur vitesse de déformation. On qualifie ces écoulements de rhéoépaississants (voir figure 2.2c).

La relation liant la viscosité au taux de cisaillement est une propriété intrinsèque du fluide qui peut être observée expérimentalement, notamment en employant un rhéomètre et des schémas d'écoulement simples, comme un écoulement de Couette, pour exprimer la viscosité apparente en subissant une contrainte de cisaillement imposée [13]. Il n'existe pas d'expression exacte pour  $\eta(\dot{\gamma})$ , les données expérimentales peuvent donc être utilisées pour ajuster des modèles rhéologiques prédéfinis, en opérant un lissage de courbe, tel qu'illustré à la figure 2.3.



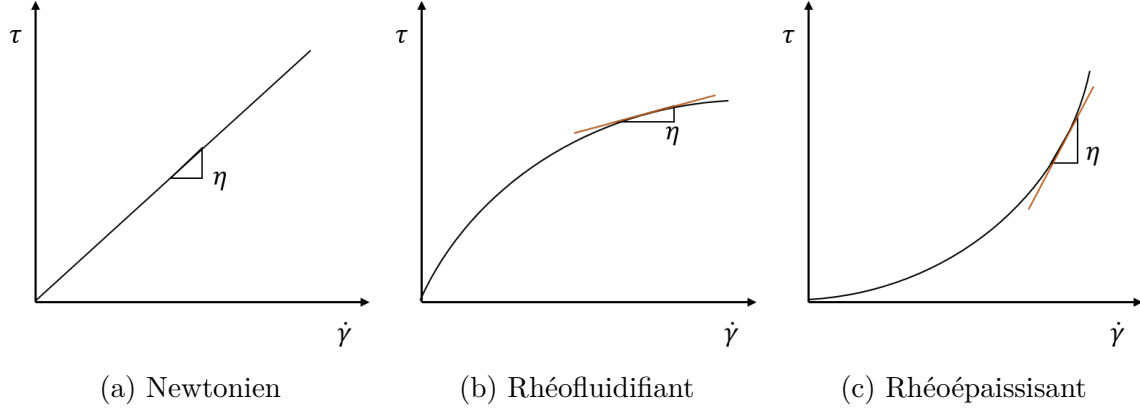


FIGURE 2.2 Profil qualitatif de la contrainte de cisaillement en un point en fonction du taux de cisaillement pour un écoulement (a) newtonien, (b) rhéofluidifiant et (c) rhéoépaississant.

## Modèles rhéologiques

Les modèles rhéologiques visent à représenter le plus fidèlement possible l'impact du cisaillement sur les paramètres de viscosité et d'élasticité d'un matériau. Comme le caractère élastique n'est pas discuté dans ce mémoire, seuls des modèles rhéologiques généralisés aux écoulements non-newtoniens purement visqueux seront abordés. Les deux modèles utilisés dans ce travail sont les modèles de la loi de puissance et de Carreau.

### Modèle de la loi de puissance (*Power-law*)

La loi de puissance est de loin le modèle le plus largement documenté et employé en rhéologie, du fait qu'il n'a que deux paramètres, ce qui en fait un modèle facilement ajustable expérimentalement. La viscosité en fonction du taux de cisaillement s'écrit comme suit :

$$\eta = K\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.14)$$

où le paramètre  $K$  représente la viscosité lorsque le taux de cisaillement local est de 1, et  $n$  caractérise la pente avec  $n - 1$  la pente de  $\log(\eta) = f(\log(\dot{\gamma}))$  [13]. Le modèle est flexible et permet de représenter à la fois les écoulements rhéoépaississants et rhéofluidifiants, en passant par les écoulements newtoniens en posant  $n - 1 = 0$  et  $K = \eta$ .

Tel qu'illustré à la figure 2.4, ce modèle capture bien la région 2 de la figure 2.3, mais omet les régions newtoniennes. Pour certains schémas d'écoulements simples, il y a des régions où le taux de cisaillement est faible et même nul. C'est le cas pour un écoulement de Poiseuille, où par construction, le taux de cisaillement est nul au centre du cylindre (voir figure 2.5).

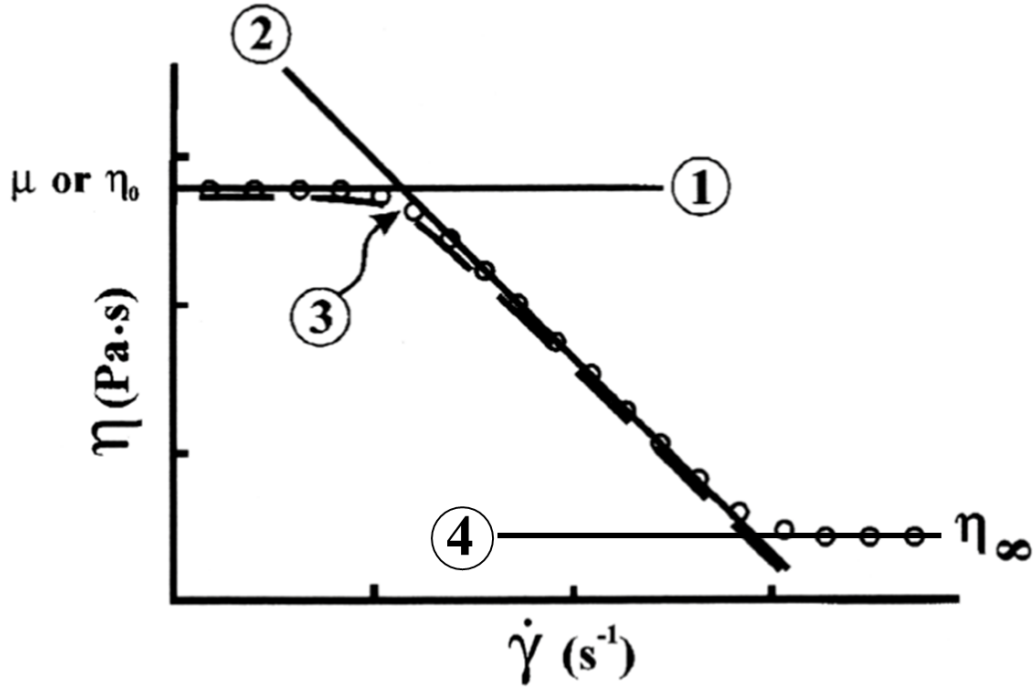


FIGURE 2.3 Exemple de profil empirique de la viscosité pour un écoulement rhéofluidifiant obtenues par un rhéomètre, en échelle log-log, avec les régions newtoniennes (1 et 4), la région descendante (2) et la région de transition (3) (adaptée de [3]).

Ainsi, on se retrouve dans la région 1 de viscosité (voir figure 2.3). Le modèle est donc mal adapté pour des géométries couramment utilisées. Le modèle de Carreau permet de pallier ce problème.

#### Modèle de Carreau

Le modèle de Carreau à quatre paramètres permet de bien capturer les régions newtoniennes et la transition de viscosité. La viscosité en fonction du taux de cisaillement est représentée comme suit :

$$\eta = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty})[1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}} \quad (2.15)$$

avec  $\eta_0$  la viscosité du fluide au repos,  $\eta_{\infty}$  la viscosité du fluide à haut taux de cisaillement,  $\lambda$  le temps de relaxation intrinsèque du fluide (voir (1.1)) et  $n$  le paramètre qui caractérise la pente comme pour le modèle de la loi de puissance (voir figure 2.6) [13]. Il est à noter que ce modèle ne permet de représenter que les écoulements newtoniens et rhéofluidifiants, pour lesquels  $n \leq 1$  et  $\eta_{\infty} \leq \eta_0$ . Le modèle de Carreau capte bien les plateaux newtoniens montrés

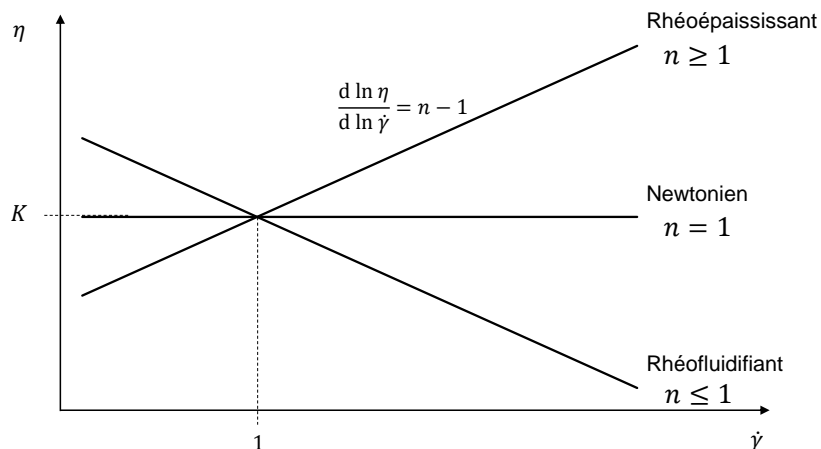


FIGURE 2.4 Prédiction de la viscosité en fonction du taux de cisaillement par le modèle de la loi de puissance, en échelle log-log.

à la figure 2.3.

Il existe d'autres modèles pour les écoulements non-newtoniens purement visqueux, comme le modèle d'Ellis et le modèle de Cross-Williamson [3].

Cette section clôt le cadre théorique autour de la mécanique des écoulements non-newtoniens. La prochaine section traitera de l'hydrodynamisme autour d'une sphère, qui constitue le cœur de la contribution scientifique de ce projet de recherche.

### 2.3 Écoulement autour d'une sphère

L'écoulement de fluide autour d'objets solides est couramment rencontré dans plusieurs applications de l'industrie chimique, notamment dans certains procédés de séparation et dans les lits de particules [24]. L'écoulement newtonien autour d'une sphère est largement documenté dans la littérature, alors qu'on en sait peu sur l'hydrodynamique autour d'une sphère lorsque le fluide est non-newtonien. Cette section peindra le portrait sur les bases de l'hydrodynamisme autour d'objets de formes quelconques et traitera plus particulièrement de l'écoulement autour d'une sphère. L'état de l'art actuel pour les écoulements non-newtoniens autour d'une sphère est plus largement discuté dans l'article 1 du Chapitre 4.

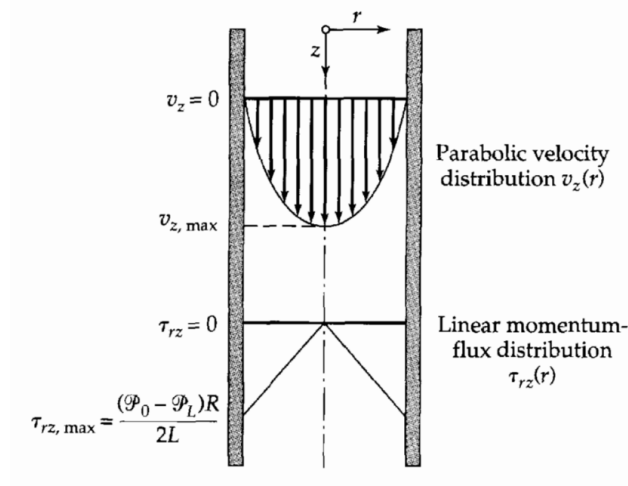


FIGURE 2.5 Écoulement de Poiseuille : Profils de vitesse ( $v_z$ ) et du tenseur des contraintes visqueuse ( $\tau_{rz}$ ) dans une conduite circulaire (tirée de [22]).

### 2.3.1 Quelques notions d'hydrodynamisme

Le concept d'hydrodynamisme traité ici englobe ce qui a trait à l'écoulement de fluide autour d'objets solides (ou le déplacement d'objets solides dans un fluide, dans le référentiel du fluide). Supposons l'écoulement libre autour d'un objet de forme quelconque. On néglige les effets de gravité et de toute autre force externe (ex. d'un champ électromagnétique) dans le bilan de force s'exerçant sur l'objet. La force totale subie par l'objet est donc :

$$\mathbf{F} = - \int_A \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} dA \quad (2.16)$$

où  $A$  est la surface de l'objet en contact avec le fluide et  $\underline{\underline{n}}$  est un vecteur unitaire normal à la surface de l'objet en un point  $P \in A$ . Le tenseur des contraintes totales est tel que présenté en 2.1.1. La force hydrodynamique se découple en deux composantes, la force de traînée et la force de portance [25]. Dans ce travail, on s'intéresse particulièrement à la force de traînée subie par un objet.

#### Force de traînée

Par définition, la force de traînée est la force parallèle à l'écoulement relatif [26]. Dans le référentiel de l'objet solide, c'est la force qui s'oppose au mouvement de l'objet, de sorte à freiner son mouvement. Ainsi, la grandeur de la force de traînée s'écrit comme :

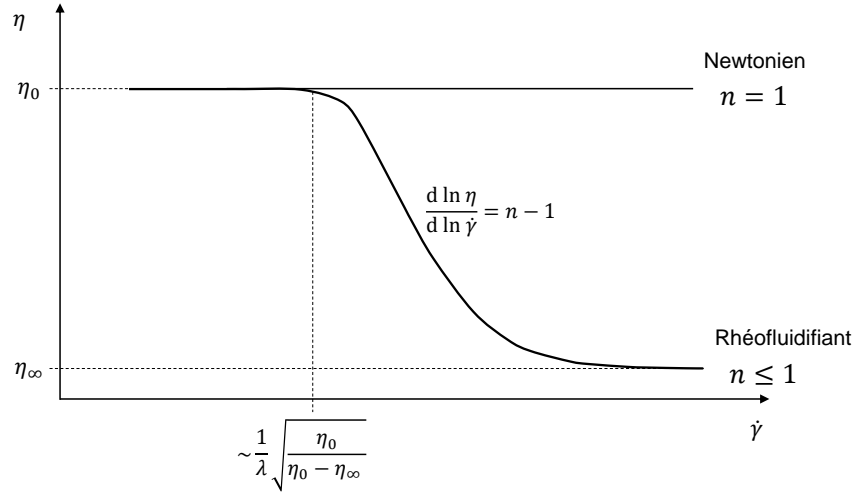


FIGURE 2.6 Prédiction de la viscosité en fonction du taux de cisaillement par le modèle de Carreau, en échelle log-log.

$$F_D = \mathbf{F} \cdot \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \quad (2.17)$$

avec  $\mathbf{F}$  défini en (2.16) et  $\mathbf{u}$  la vitesse du fluide en direction de l'objet. Ainsi, pour évaluer la force de traînée, on doit connaître  $\mathbf{F}$ , et donc connaître le profil du tenseur des contraintes  $\underline{\underline{\sigma}}$  sur la surface de l'objet. Or, l'équation (2.16) n'est pas très utile pour prédire la force de traînée sur un objet. Pour pallier ce problème, il existe des coefficients de corrélation entre la force de traînée et le régime d'écoulement, notés  $C_D$ , qu'on appelle coefficients de traînée. La force de traînée s'écrit comme suit :

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D A_{\text{eff}} \rho \|\mathbf{u}\|^2 \left( \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \right) \quad (2.18)$$

où  $C_D$  est un nombre adimensionnel et  $A_{\text{eff}}$  est l'aire de l'objet vue d'une particule du fluide en direction de l'objet. Le  $C_D$  est obtenu en opérant une analyse dimensionnelle du problème (Théorème II-Buckingham [27]). Tel que mentionné plus haut, la force de traînée sur l'objet est fonction de la forme ainsi que du régime d'écoulement tel que :

$$F_D = f(u, l, \rho, \eta) \quad (2.19)$$

avec  $l$  la longueur caractéristique de l'objet. On néglige ainsi la gravité et les effets de tensions de surface. Pour chacune de ces variables, les unités du système international et les grandeurs fondamentales du problème (L pour les unités de longueurs, T pour les unités temporelles et M pour les unités de masse) sont données dans le tableau suivant :

| Variable | Unités SI           | Grandeurs fondamentales |
|----------|---------------------|-------------------------|
| $u$      | m/s                 | $LT^{-1}$               |
| $l$      | m                   | L                       |
| $\rho$   | kg/m <sup>3</sup>   | $ML^{-3}$               |
| $\eta$   | kg/m/s              | $ML^{-1}T^{-1}$         |
| $F_D$    | kg.m/s <sup>2</sup> | $MLT^{-2}$              |

Avec cinq variables du problème et trois grandeurs fondamentales, on obtient deux nombres adimensionnels  $\Pi_1$  et  $\Pi_2$ . Prenons  $u$ ,  $l$  et  $\rho$  comme variables répétées et  $\eta$  et  $F_D$  les variables non-répétées. Le premier nombre adimensionnel  $\Pi_1$  est donc :

$$\Pi_1 = \eta u^{a_1} l^{b_1} \rho^{c_1} \quad (2.20)$$

où, pour assurer l'adimensionnalité de  $\Pi_1$ , les conditions du système matriciel (2.21) doivent être respectées.

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -3 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Ainsi,  $(a_1, b_1, c_1) = (-1, -1, -1)$ . On obtient donc que :

$$\begin{aligned} \Pi_1 &= \frac{\eta}{\rho u l} \\ &= \frac{1}{\text{Re}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Sans grande surprise, le nombre de Reynolds émerge de cette analyse dimensionnelle, ce qui confirme que la force de traînée est fonction du régime d'écoulement autour de l'objet. Le second nombre adimensionnel  $\Pi_2$  s'écrit comme suit :

$$\Pi_2 = F_D u^{a_2} l^{b_2} \rho^{c_2} \quad (2.23)$$

avec, comme système matriciel à respecter pour l'adimensionnalisation de  $\Pi_2$  :

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -3 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

On obtient  $(a_2, b_2, c_2) = (-2, -2, -1)$ . En considérant l'aire effective  $A_{\text{eff}}$  comme étant une fonction de  $l$  telle que  $A_{\text{eff}} = \lambda l^2$ , avec  $\lambda$  une constante, alors  $\Pi_2$ , défini en (2.25), est équivalent à une constante près à  $C_D$ .

$$\begin{aligned} \Pi_2 &= \frac{F_D}{\rho l^2 u^2} \\ &= \frac{1}{2\lambda} C_D \end{aligned} \quad (2.25)$$

On a donc les deux nombres adimensionnels qui définissent la force de traînée subie par un objet. Le Théorème  $\Pi$ -Buckingham stipule que  $\Pi_2 = \phi(\Pi_1)$ , et  $\phi$  est déterminé expérimentalement. Si on réarrange les termes, on a que  $C_D = \psi(\text{Re})$ , et  $\psi$  est largement étudié et documenté pour des géométries simples, comme des cylindres, de fines plaques et disques placés parallèlement et perpendiculairement à l'écoulement, des ailes d'avion de type NACA, et bien sûr, des sphères.

### 2.3.2 Cas particulier : écoulement autour d'une sphère

L'écoulement autour d'une sphère lisse est un schéma classique en mécanique des fluides. Il existe des dizaines de modèles mathématiques quantifiant la force de traînée autour d'une sphère en fonction du régime d'écoulement. Le nombre de Reynolds définissant le régime d'écoulement prend la forme suivante :

$$\text{Re} = \frac{\rho u D}{\eta} \quad (2.26)$$

avec  $D$  le diamètre de la sphère. La figure 2.7 montre la relation entre le coefficient de traînée autour d'une sphère lisse et le nombre de Reynolds, pour une large gamme de  $\text{Re}$ . À partir de données expérimentales, plusieurs chercheurs se sont penchés sur la problématique pour développer des modèles permettant de prédire, en fonction de  $\text{Re}$ , le coefficient de traînée. Au tableau 2.1 sont présentés quelques modèles qui couvrent la plage de Reynolds traitée dans l'article 1 (Chapitre 4), soit  $\text{Re} \in [0.1, 100]$ .

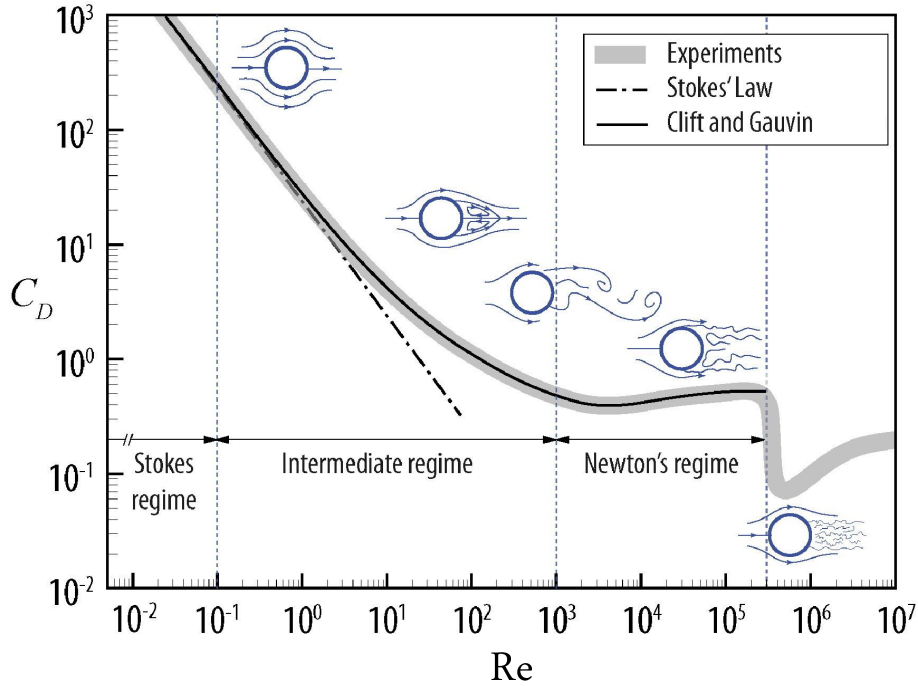


FIGURE 2.7 Profil du coefficient de traînée  $C_D$  pour une sphère lisse en fonction du nombre de Reynolds (trait gris plein), avec la corrélation de Stokes (trait noir pointillé) et une des nombreuses corrélations pour un large domaine de  $Re$  (trait noir plein) (adaptée de [28]).

Les modèles présentés au tableau 2.1 ne représentent qu'une fraction des dizaines de modèles couvrant la plage de Reynolds d'intérêt. Ces modèles sont développés pour des  $Re$  tels que défini en (2.26), pour une viscosité dynamique  $\eta$  constante autour de la sphère. Or, ces modèles ne sont pas adaptés aux écoulements non-newtoniens, pour lesquels la viscosité varie autour de la sphère. Il y a donc un besoin évident de redéfinir le nombre de Reynolds pour  $\eta = \eta(\underline{x})$  et de comprendre ce que cela implique sur le bilan des forces sur une particule sphérique en mouvement dans un fluide non-newtonien.

### 2.3.3 Effets non-newtoniens

Les effets rhéofluidifiants et rhéoépaississants sur l'hydrodynamique autour d'une sphère sont étudiés depuis plusieurs décennies, principalement pour des écoulements rampants ( $Re \ll 1$ ). C'est d'ailleurs l'une des limites actuelles sur l'étude des écoulements non-newtoniens autour de sphères ; il existe peu de modèles valides pour une plage de  $Re$  étendue. J'en discute plus largement dans l'article 1 du Chapitre 4.

La redéfinition du nombre de Reynolds pour les écoulements non-newtoniens est nécessaire



TABLEAU 2.1 Quelques exemples de modèles pour le coefficient de traînée en fonction de  $Re$  pour un écoulement newtonien autour d'une particule sphérique lisse.

| Auteur(e)s                  | Modèle pour $C_D$   | Plage de validité de $Re$ | Ref. |
|-----------------------------|---|---------------------------|------|
| Stokes (1851)               | $\frac{24}{Re}$   | $Re \ll 1$                | [26] |
| Schiller et Naumann (1935)  | $\frac{24}{Re} \left(1 + 0.15Re^{0.687}\right)$   | $Re < 800$                | [7]  |
| Abraham (1970)              | $0.2924 \left(1 + \frac{9.06}{Re^{0.5}}\right)^2$   | $Re < 5000$               | [29] |
| Clift et Gauvin (1971)      | $\frac{24}{Re} \left(1 + 0.15Re^{0.687}\right) + \frac{0.42}{1+4.25 \times 10^4 Re^{-1.16}}$  | $Re < 3 \times 10^5$      | [6]  |
| Brauer et Mewes (1972)      | $\frac{24}{Re} + \frac{5.48}{Re^{0.573}} + 0.36$  | $Re < \times 10^4$        | [30] |
| Flemmer et Banks (1986)     | avec $E = \left(0.261Re^{0.369} - 0.105Re^{0.431} - \frac{0.124}{1+(\log_{10} Re)^2}\right)$  | $Re < 3 \times 10^5$      | [8]  |
| Brown et Lawler (2003)      | $\frac{24}{Re} \left(1 + 0.15Re^{0.681}\right) + \frac{0.407}{1+8.71Re^{-1}}$   | $Re < 2 \times 10^5$      | [31] |
| Clift <i>et al.</i> (2005)  | $\frac{24}{Re} \left(1 + 0.1315Re^{0.82-0.05 \log_{10} Re}\right)$  | $0.01 < Re < 20$          | [4]  |
|                             | $\frac{24}{Re} \left(1 + 0.1935Re^{0.6305}\right)$  | $20 < Re < 260$           |      |
| Barati <i>et al.</i> (2014) | $5.4856 \times 10^9 \tanh\left(\frac{4.3774 \times 10^{-9}}{Re}\right) + 0.0709 \tanh\left(\frac{700.6574}{Re}\right) + 0.3894 \tanh\left(\frac{74.1539}{Re}\right) - 0.1198 \tanh\left(\frac{7429.0843}{Re}\right) - 1.7174 \tanh\left(\frac{9.9851}{Re+2.3384}\right) + 0.4744$ | $Re < 2 \times 10^5$      | [5]  |

à l'étude de la force de traînée en fonction du régime d'écoulement. Dans un contexte numérique, on peut se servir des modèles rhéologiques pour redéfinir le nombre de Reynolds.

Prenons la loi de puissance en exemple (2.14), où la viscosité est donnée en fonction de  $K$ , de  $n$  et du taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ .  $K$  et  $n$  sont constantes et fonction de la nature du fluide, et peuvent être déterminées empiriquement, alors que  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}(\underline{x})$  varie autour de la sphère, d'où la variabilité de la viscosité dynamique. Une stratégie largement employée dans la littérature est d'estimer un taux de cisaillement apparent ressenti par la sphère en mouvement, et d'intégrer ce taux de cisaillement apparent dans l'équation (2.14) [3]. En étudiant les dimensions des variables à disposition, le taux de cisaillement ressenti est estimé avec :

$$\dot{\gamma}_{\text{app}} = \frac{u}{D} [=] \text{ s}^{-1} \quad (2.27)$$

Pour les fluides de loi de puissance, en intégrant 2.27 dans 2.14, le nombre de Reynolds *a priori* estimé est :

$$\text{Re} = \frac{\rho u^{2-n} D^n}{K} \quad (2.28)$$

Cette technique du Re *a priori* est libéralement utilisée dans la littérature.

L'état de l'art sur des écoulements rhéofluidifiants autour d'une seule sphère est présenté dans l'introduction de l'article 1 du Chapitre 4.

Cette section clôt la discussion sur les écoulements rhéofluidifiants autour d'une sphère. Maintenant qu'on a introduit la mécanique des fluides et les équations qui la régissent, les écoulements non-newtoniens et le schéma classique d'écoulement autour d'une sphère, il reste à voir certaines notions visant à l'implémentation numérique du modèle de mécanique des fluides.

## 2.4 Modélisation numérique

Les modèles numériques sont essentiellement des outils créés pour exécuter des calculs qui sont laborieux, et parfois impossibles à faire manuellement. Ils constituent une traduction numérique des modèles mathématiques qui existent déjà [32]. Dans un contexte de mécanique des fluides numérique, il s'agit de résoudre numériquement les équations de Navier-Stokes incompressibles, ainsi que d'intégrer d'autres modèles spécifiques aux problématiques à résoudre. Les équations de Navier-Stokes en newtonien seront considérées.

En notation d'Einstein, les équations (2.10) et (2.11) peuvent s'écrire comme suit :

$$\partial_l u_l = 0 \quad (2.29a)$$

$$\underbrace{\rho \partial_t u_k}_{\text{Transitoire}} + \underbrace{\rho u_l \partial_l u_k}_{\text{Advection}} = \underbrace{-\partial_k p - \partial_l \tau_{lk}}_{\text{Contraintes}} + \underbrace{f_k}_{\text{Source}} \quad (2.29b)$$

Elles constituent quatre équations distinctes pour lesquelles les inconnues sont  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$  et  $p$ . On a donc quatre équations différentielles et quatre inconnues. En considérant des conditions limites (et initiales, pour les problèmes transitoires), on obtient un système matriciel en tout point du domaine fluide, puis on peut résoudre le profil de vitesse et de pression. C'est simple, non ? Eh bien, pas tout à fait.

En raison de la non-linéarité des équations (terme d'advection de l'équation 2.29b), la résolution de ce système matriciel est complexe et requiert un solveur non-linéaire itératif. En effet, il est impossible d'isoler  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$  et  $p$  des équations pour en avoir une solution analytique (la mécanique des fluides numérique serait bien trop simple!). On doit donc poser une solution en tout point du domaine fluide, initialement fautive mais idéalement assez près de la solution du système, et résoudre avec un solveur non-linéaire itératif jusqu'à ce que la solution converge. La méthode de Newton-Raphson est celle employée dans le solveur non-linéaire itératif utilisé.

Pour résoudre le problème numériquement, il s'impose de discrétiser le domaine de calcul de façon judicieuse pour obtenir une approximation du profil de vitesse et de pression qui dépeint le plus fidèlement la réalité, en ne calculant que des valeurs ponctuelles pour ces quantités physiques.

La résolution du profil d'écoulement à l'intérieur du domaine peut se faire à l'aide de plusieurs méthodes numériques, dont les méthodes plus classiques en mécanique des fluides numérique (méthode de différence finie (FDM), méthodes des éléments finis (FEM), méthode des volumes finis (FVM)) et les méthodes plus modernes comme la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM). Il existe d'autres méthodes numériques appliquées aux écoulements particuliers qui ne seront pas abordées pour ce projet.

La méthode de discrétisation employée dans ce projet est la méthode des éléments finis.

### 2.4.1 Méthode des éléments finis (FEM)

La méthode des éléments finis est employée pour la résolution de systèmes d'équations différentielles partielles, ici (2.29a) et (2.29b). En mécanique des fluides numérique, le domaine de calcul peut être représenté en 2-dimensions ainsi qu'en 3-dimensions. À noter que pour les écoulements tridimensionnels (turbulents, ou présentant des structures tridimensionnelles), une représentation tridimensionnelle du domaine est de mise. Pour l'écoulement autour d'une sphère étudié dans ce rapport, un maillage tridimensionnel sera généré.

La première étape menant à l'utilisation de la FEM est de discrétiser le domaine de calcul en plusieurs éléments, qu'on appelle aussi des cellules qui forment un maillage. Ces cellules sont de forme triangulaire ou quadrilatère pour les domaines en 2-dimensions, ou des tétraèdres, des hexaèdres, des pyramides à base carrée ou des prismes à base triangulaire (essentiellement, des solides formés de triangles et de quadrilatères) en 3-dimensions. Sont montrés à la figure 2.8 des exemples d'éléments où les points représentent des nœuds. Ces nœuds sont les coordonnées où les quantités  $\underline{u}$  et  $p$  sont calculées. La figure 2.8 introduit également le

concept d'ordre des éléments : seuls les points noirs sont considérés pour des éléments de premier ordre, alors que pour les éléments d'ordre 2, tous les points sont considérés. On y reviendra plus loin dans la présente section.

Le domaine de calcul est constitué d'un nombre fini d'éléments ainsi que d'un nombre fini de nœuds de calcul.

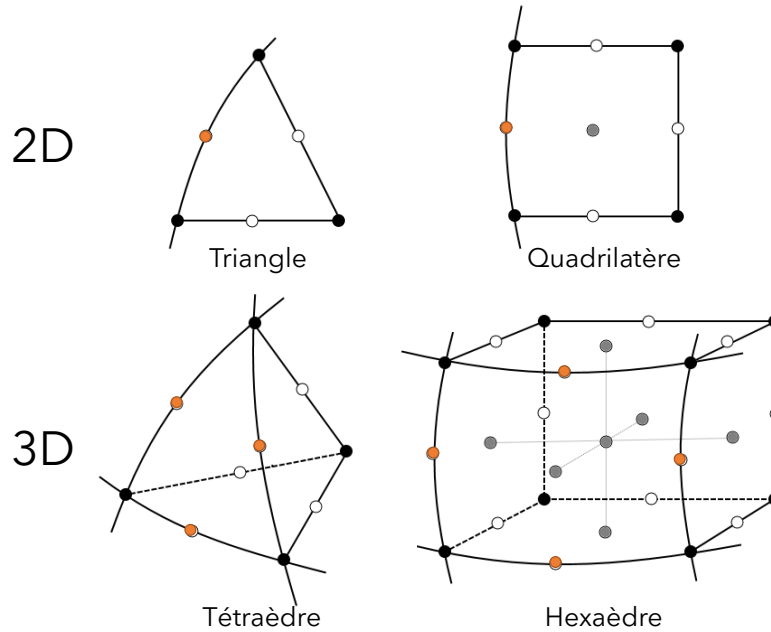


FIGURE 2.8 Exemples d'éléments en 2-dimensions et en 3-dimensions, avec les nœuds pour des polynômes quadratiques (et pour les polynômes linéaires en noir seulement) (adaptée de [33]).

### Formulation en éléments finis

Appelons le domaine de calcul  $\Omega$  délimité par sa frontière  $\Gamma$ . On cherche à résoudre (2.29a) et (2.29b) sur les nœuds de calcul dans  $\Omega$  de sorte que la solution soit la plus représentative de la réalité. Pour minimiser l'erreur de la solution, on veut trouver une solution pour  $u_k$  et  $p$  où  $u_k \in L^2$  et  $p \in L^2$  tel que :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|u_{k,h} - u_k\|_{L^2(\Omega)}^2 &\rightarrow \min \\ \frac{1}{2} \|p_h - p\|_{L^2(\Omega)}^2 &\rightarrow \min \end{aligned} \tag{2.30}$$

avec  $u_{k,h} \in V_h \subset L^2$  et  $p_h \in V_h \subset L^2$  les approximations de  $u_k$  et  $p$  [34]. On cherche un minimum à ces fonctions tel que :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [(u_{k,h} - u_k) \cdot v_k] d\Omega &= 0 \\ \int_{\Omega} [(p_h - p) \cdot q] d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

$\forall v_k, q \in V_h$ . Il s'agit du principe d'orthogonalité de Galerkin, introduit à la méthode d'optimisation des moindres carrés [34, 35]. En appliquant ce principe aux équations (2.29a) et (2.29b), on obtient :

$$\int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega = 0 \quad (2.32a)$$

$$\int_{\Omega} v_k (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k + \partial_k p - \eta \partial_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega = 0 \quad (2.32b)$$

Il est à noter qu'en sortant  $\eta$  du terme  $\partial_l \tau_{lk}$ , on a :

$$\begin{aligned} \partial_l \tau_{lk} &= \eta \partial_l (\partial_l u_k + \partial_k u_l) \\ &= \eta (\partial_l \partial_l u_k + \partial_l \partial_k u_l) \\ &= \eta (\partial_l \partial_l u_k + \partial_k \partial_l u_l) \\ &= \eta (\partial_l \partial_l u_k) \end{aligned} \quad (2.33)$$

puisque  $\partial_l u_l = 0$  (hypothèse d'incompressibilité) [13]. On verra que cette réduction ne peut être faite pour les écoulements non-newtoniens à la section 5.1.

Pour s'assurer que  $u_k$  soit élément de  $H^1$  et  $p$  soit élément de  $L^2$ , les termes de pression et de contraintes visqueuses sont intégrés par parties. En assumant  $\int_{\Gamma} (\sigma) d\Gamma = 0$  sur  $\Gamma$ , la formulation faible est :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega &= 0 \\ \int_{\Omega} v_k (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega & \\ - \int_{\Omega} (\partial_k v_k) p d\Omega + \eta \int_{\Omega} (\partial_l u_k) (\partial_l v_k) d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

Tel que mentionné plus haut, ce système d'équations est résolu en utilisant la méthode de Newton-Raphson, tel que :

$$\mathcal{J} \delta \mathbf{x} = -\mathcal{R} \quad (2.35)$$

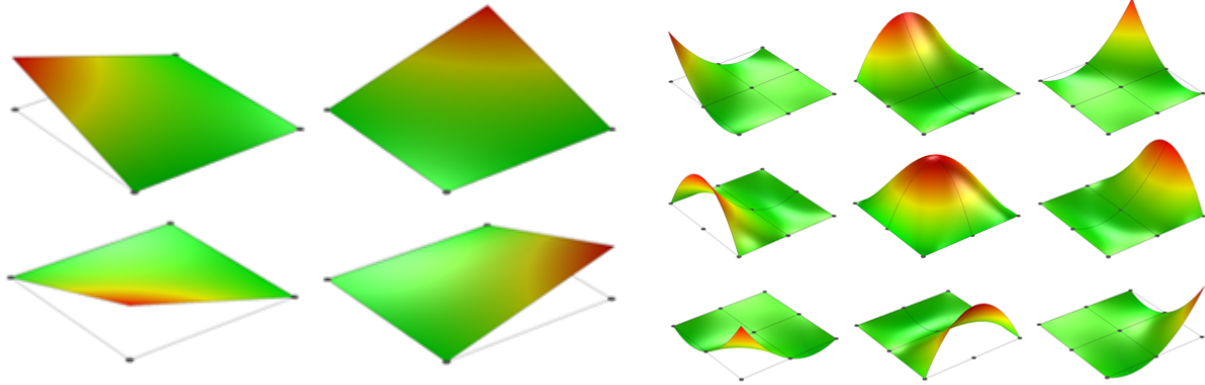
avec  $\delta \mathbf{x}$  l'incrément sur la vitesse et la pression pour chacun des nœuds. Le résidu est :

$$\begin{aligned} \mathcal{R} = & \int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega + \int_{\Omega} v_k (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} p (\partial_k v_k) d\Omega + \eta \int_{\Omega} (\partial_l u_k) (\partial_l v_k) d\Omega \end{aligned} \quad (2.36)$$

et le jacobien est :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} = & \int_{\Omega} q \partial_l \phi_{l,j} d\Omega + \int_{\Omega} v_k (\partial_t \phi_{k,j} + \phi_{l,j} \partial_l u_k + u_l \partial_l \phi_{k,j}) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \psi_j (\partial_k v_k) d\Omega + \eta \int_{\Omega} (\partial_l \phi_{k,j}) (\partial_l v_k) d\Omega \end{aligned} \quad (2.37)$$

avec  $\phi_k$  et  $\psi$  les interpolants unitaires pour  $u_k$  et  $p$ , respectivement, et l'indice  $j$  fait référence au nœud. En considérant un maillage 2-dimensions formé de quadrilatères, si on utilise 4 nœuds par élément (voir les points noirs seulement à la figure 2.8), alors les interpolants sont linéaires (voir la figure 2.9a). Si on utilise 9 nœuds par éléments (ici, tous les nœuds du quadrilatère de la figure 2.8), alors les polynômes d'interpolation sont quadratiques (voir la figure 2.9b). On les appelle aussi des polynômes de Lagrange.



(a) Polynômes d'interpolation linéaire.

(b) Polynômes d'interpolation quadratique.

FIGURE 2.9 Polynômes d'interpolation (a) linéaire et (b) quadratique pour un élément en 2-dimensions (tirées de [36]).

Les polynômes sont formés de sorte que :

$$\phi_j(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad i, j = 0, 1, \dots, M \quad (2.38)$$

avec  $M$  le nombre de nœuds de la cellule et  $\mathbf{x}_i$  leurs coordonnées. Les valeurs interpolées de vitesse et de pression à tout endroit de la cellule sont donc :

$$\begin{aligned} u_k &= \sum_i^M u_{k,i} \phi_{k,i} \\ p &= \sum_i^M p_i \psi_i \end{aligned} \quad (2.39)$$

Des exemples de polynômes d'ordre 1 et d'ordre 2 sont montrés, mais l'ordre théorique des polynômes de Lagrange n'est pas borné.

La méthode de Galerkin suggère d'utiliser  $q = \psi$  et  $v_k = \phi_k$  [35]. Ainsi, les équations (2.36) et (2.37) deviennent :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_i &= \int_{\Omega} \psi_i \partial_l u_l d\Omega + \int_{\Omega} \phi_{k,i} (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega} p (\partial_k \phi_{k,i}) d\Omega + \int_{\Omega} \eta (\partial_l u_k) (\partial_l \phi_{k,i}) d\Omega \end{aligned} \quad (2.40)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{i,j} &= \int_{\Omega} \psi_i \partial_l \phi_{l,j} d\Omega + \int_{\Omega} \phi_{k,i} (\partial_t \phi_{k,j} + \phi_{l,j} \partial_l u_k + u_l \partial_l \phi_{k,j}) d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega} \psi_j (\partial_k \phi_{k,i}) d\Omega + \eta \int_{\Omega} (\partial_l \phi_{k,j}) (\partial_l \phi_{k,i}) d\Omega \end{aligned} \quad (2.41)$$

avec  $i$  une ligne de la jacobienne qui représente un degré de liberté. Oui, ça fait beaucoup d'indices ! Pour un degré de liberté de vitesse,  $\psi_i = 0$ , et pour un degré de liberté de pression,  $\phi_{k,i} = 0$ . Ainsi, le  $i$ -ème terme du résidu est :

$$\mathcal{R}_i = \begin{cases} \int_{\Omega} \phi_{k,i} (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega - \int_{\Omega} p (\partial_k \phi_{k,i}) d\Omega \\ \quad + \int_{\Omega} \eta (\partial_l u_k) (\partial_l \phi_{k,i}) d\Omega & \text{si } i \in \Theta_{\text{vitesse}} \\ \int_{\Omega} \psi_i \partial_l u_l d\Omega & \text{si } i \in \Theta_{\text{pression}} \end{cases} \quad (2.42)$$

et le terme  $(i, j)$  du jacobien est :

$$\mathcal{J}_{i,j} = \begin{cases} \int_{\Omega} \phi_{k,i} (\partial_t \phi_{k,j} + \phi_{l,j} \partial_l u_k + u_l \partial_l \phi_{k,j}) d\Omega & \text{si } i \in \Theta_{\text{vitesse}} \\ - \int_{\Omega} \psi_j (\partial_k \phi_{k,i}) d\Omega + \eta \int_{\Omega} (\partial_l \phi_{k,j}) (\partial_l \phi_{k,i}) d\Omega & \\ \int_{\Omega} \psi_i \partial_l \phi_{l,j} d\Omega & \text{si } i \in \Theta_{\text{pression}} \end{cases} \quad (2.43)$$

où  $\Theta_{\text{vitesse}}$  est l'ensemble des degrés de liberté de vitesse, et  $\Theta_{\text{pression}}$  est l'ensemble des degrés de liberté en pression.

Il va de soi que plus le nombre d'éléments est élevé, plus la solution sur  $\underline{u}$  et  $p$  est précise et fidèle à la réalité. Cependant, en augmentant le nombre d'éléments, les calculs numériques sont plus coûteux. L'emploi d'éléments d'ordre élevé augmente aussi le temps de calcul, comme on augmente le nombre de degrés de liberté. Toutefois, pour des géométries où on rencontre des formes curvilinéaires, les éléments d'ordre élevé sont généralement mieux adaptés pour bien épouser les formes. On reviendra sur ce point à la section 5.6.

Maintenant, comment intègre-t-on numériquement sur les cellules qui forment  $\Omega$ ? On peut intégrer avec exactitude en utilisant une quadrature de Gauss-Legendre :

$$\int_{\Omega} f d\Omega = \sum_q w_q f(\underline{x}_q) \quad (2.44)$$

où  $q \in \Omega$  sont des points d'interpolation (*Integration points* de la figure 2.10, pour un maillage formé de quadrilatères en 2-dimensions) [37, 38].

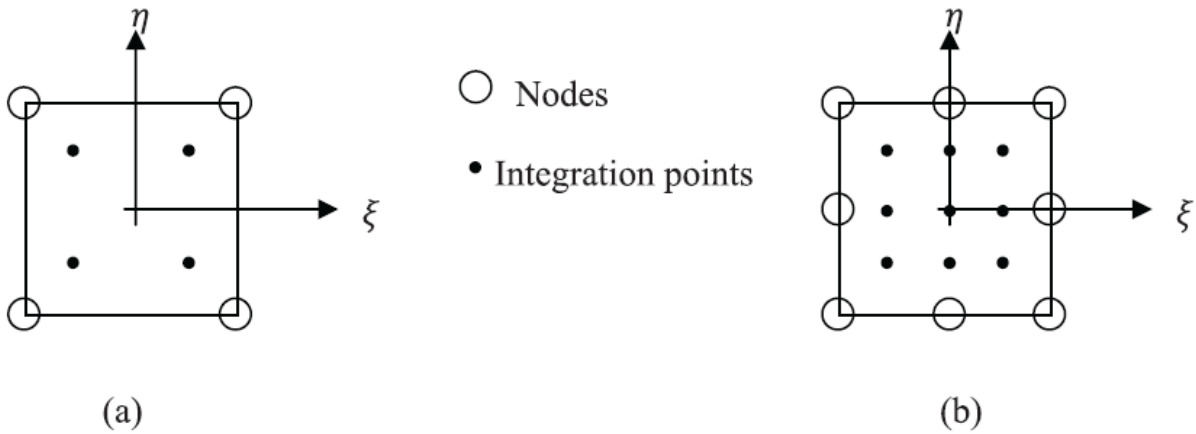


FIGURE 2.10 Localisation des points de quadrature de Gauss pour un élément en 2-dimensions quadrilatère (a) d'ordre 1 et (b) d'ordre 2 (tirée de [38]).



Ainsi, les équations (2.40) et (2.41) sont assemblées de la façon suivante :

$$\mathcal{R}_i = \sum_q \left( \left[ \psi_i \partial_l u_l + \phi_{k,i} (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) - p (\partial_k \phi_{k,i}) + \eta (\partial_l u_k) (\partial_l \phi_{k,i}) \right]_q \cdot w_q \right) \quad (2.45)$$

$$\mathcal{J}_{i,j} = \sum_q \left( \left[ \psi_i \partial_l \phi_{l,j} + \phi_{k,i} (\partial_t \phi_{k,j} + \phi_{l,j} \partial_l u_k + u_l \partial_l \phi_{k,j}) - \psi_j (\partial_k \phi_{k,i}) + \eta (\partial_l \phi_{k,j}) (\partial_l \phi_{k,i}) \right]_q \cdot w_q \right) \quad (2.46)$$

avec les termes  $\psi_i$ ,  $\partial_l \phi_{l,j}$ ,  $\phi_{k,i}$ , etc. interpolés aux points de quadrature  $q$  avec les interpolants présentés à la figure 2.9, et  $w_q$  les poids de quadratures. À chaque itération du solveur itératif de Newton-Raphson, ces quantités sont assemblées à tous les points de Gauss de toutes les cellules du domaine  $\Omega$ .

La partie la plus théorique de ce mémoire est enfin terminée, ça y est ! Maintenant, rentrons dans le vif du sujet, soit ce qui a été accompli lors du projet de recherche. La prochaine section traitera de la méthodologie et de l'organisation du projet.

## CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION

Seront discutés dans cette section les objectifs du mémoire, la mise en œuvre et l'organisation de ces objectifs et les outils employés.

### 3.1 Objectifs du mémoire et organisation

L'objectif principal de ce projet est le développement et l'implémentation de méthodes stabilisées d'ordre élevé pour les écoulements non-newtoniens. L'écoulement de fluide rhéofluidifiant autour d'une sphère seule est l'une des applications à ce projet, sur laquelle l'article du prochain chapitre se concentre, qui mènera à une meilleure compréhension des écoulements rhéofluidifiants dans des lits de particules ou des milieux poreux. Évidemment, tout n'est pas montré dans l'article : le Chapitre 5 agit à titre de support au contenu du mémoire. Les objectifs découplés du projet sont les suivants :

**Objectif principal** Développer et implémenter des méthodes d'ordre élevé pour les écoulements non-newtoniens, et appliquer le modèle à un schéma classique.

**S.O.1** Développer des méthodes d'ordre élevé pour les fluides non-newtoniens généralisés avec les modèles de la loi de puissance (power-law) et Carreau.

1. Développer un solveur matriciel pour les écoulements dont le gradient de viscosité est non-nul.
2. Implémenter un réseau polymorphique de modèles rhéologiques à employer par le solveur.

**S.O.2** Vérifier l'implémentation des méthodes pour des éléments d'interpolation d'ordres quelconques.

**S.O.3** Appliquer le modèle à des écoulements rhéofluidifiants autour d'une sphère.

1. Opérer une analyse de convergence en maillage et une analyse de taille du domaine de calcul.
2. Simuler l'écoulement autour d'une sphère pour une plage de  $Re \in [0.1, 100]$  et  $n \in [0.1, 1.0]$  avec les modèles de Carreau et de la loi de puissance.
3. Quantifier l'effet des écoulements rhéofluidifiants sur la force de traînée sur une sphère seule.
4. Comparer les coefficients de traînée calculés avec les résultats de la littérature.

Le **S.O.1** sera brièvement abordé dans la section 4.3.2 de l'article pour ce qui est de la forme faible stabilisée et de la forme forte du jacobien ; j'élaborerai davantage sur le solveur dans la section 5.1. Le **S.O.1.1.** se découple en deux composantes : un solveur stabilisé GLS est implémenté, ainsi qu'un solveur Grad-Div non stabilisé. Plus de détails sur ce second solveur seront donnés dans la section 5.2. Toutes les implémentations sont faites au sein du logiciel Lethe, qui sera brièvement présenté à la section 3.2.

Un résumé du **S.O.2** est présenté à la section 4.4 de l'article 1, la vérification de code sera explicitée à la section 5.3.

Le **S.O.3** constitue le cœur du contenu de l'article. Le **S.O.3.1.** est complètement montré à la section 4.5.1. L'exécution des **S.O.3.2.** et **S.O.3.3.** sera développée à la section 4.5.2. Le **S.O.3.4.** est discuté dans l'article. Les sections 5.4, 5.5 et 5.6 viennent appuyer le sous-objectif **S.O.3.2.**

Introduisons d'abord les outils numériques utilisés.

### 3.2 Lethe

Lethe est un logiciel libre d'accès de mécanique des fluides numérique (CFD) multiphysique, c'est-à-dire qu'il peut résoudre simultanément plusieurs physiques, telles que l'écoulement fluide, le transfert thermique ainsi que les interactions avec des particules solides (CFD-DEM) [39]. Le logiciel permet de résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles (NSI) par l'emploi d'un solveur itératif de Newton-Raphson. Le jacobien du système d'équations linéarisées a la forme suivante :

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

En effet, tel que montré à l'équation (2.41), il n'y a pas de terme en  $\psi_j \psi_i$ . Pour pallier le problème des 0 sur la diagonale, deux stratégies peuvent être utilisées dans Lethe : la première étant une stabilisation *Galerkin-Least-Squares* (GLS) introduite dans la revue de littérature et développée dans la section 5.1 ; la seconde étant l'emploi d'un préconditionneur de type complément de Schur (solveur GD) [40]. Cette deuxième stratégie sera présentée dans la section 5.2. La forme stabilisée du jacobien est :

$$\mathcal{J}_{\text{GLS}} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\text{GLS}} & \mathbf{B}_{\text{GLS}}^T \\ \mathbf{B}_{\text{GLS}} & \mathbf{S}_{\text{GLS}} \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

La structure du logiciel repose sur celle de la librairie libre d'accès `deal.II` qui supporte une architecture en éléments finis programmée en `C++` [41]. La librairie `deal.II` est dotée d'outils de génération de maillages ainsi que d'outils de parallélisation via les méthodes de communication MPI [42]. Ce sont d'ailleurs les maillages de `deal.II` qui seront utilisés pour les simulations de l'article 1 [43]. `deal.II` comprend également des outils de raffinement de maillage, soit uniforme (toutes les cellules du maillage sont raffinées) et adaptative (seules les cellules où l'erreur sur la solution est estimée être la plus grande sont raffinées). L'estimation de l'erreur est faite grâce à un estimateur de Kelly, basé soit sur le gradient de vitesse ou le gradient de pression (peut être appliqué au gradient de température pour les problèmes présentant une composante thermique) [44]. Il est à noter que l'outil de raffinement de maillage permet aussi le déraffinement de cellules où l'erreur est faible.

`deal.II` utilise `Trilinos`, une collection libre d'accès de packages permettant la résolution de systèmes matriciels [45]. Le système  $\mathcal{J}_{\text{GLS}}\delta\mathbf{x} = -\mathcal{R}_{\text{GLS}}$  pourrait théoriquement être résolu par décomposition LU de Cholesky pour les systèmes asymétriques, mais on se retrouverait avec beaucoup plus de termes non-nuls que dans  $\mathcal{J}_{\text{GLS}}$ , et puisque  $\mathcal{J}_{\text{GLS}}$  est relativement grosse, on rencontrerait des problèmes de stockage de nombres en double précision [46]. Pour pallier ce problème, on opte pour l'emploi d'un préconditionneur. Pour les simulations en régime stationnaire présentant moins d'un million de cellules, la méthode implémentée dans `Lethe` à préconiser est la généralisation de la minimisation du résidu, ou GMRES. Essentiellement, on cherche un préconditionneur LU incomplet (ILU)  $\mathcal{M}$  de sorte que  $\mathcal{M}^{-1}$  soit la meilleure approximation de  $\mathcal{J}_{\text{GLS}}^{-1}$  (et donc que  $\mathcal{J}_{\text{GLS}}\mathcal{M}^{-1}$  soit aussi près que possible de  $I$ ) [46]. La méthode GMRES permet de résoudre le système matriciel au coût de devoir générer un préconditionneur, qui requiert un second niveau itératif. Autrement dit, pour chaque itération de Newton-Raphson, on doit résoudre le solveur linéaire itérativement jusqu'à l'obtention d'un préconditionneur  $\mathcal{M}$  qui respecte un critère de convergence donné, d'où les deux niveaux itératifs. Ce paragraphe est nécessaire à la discussion de la section 5.5.

Sont également implémentées dans `Lethe` des méthodes de conditions immergées (IBM). Ces méthodes servent à intégrer des conditions frontières de solides immergés dans le domaine fluide  $\Omega$  sans devoir extraire du maillage l'espace occupé par le solide [47]. Les méthodes IBM supportent les maillages Cartésiens structurés, ce qui simplifie le processus de maillage puisque  $\Omega$  n'est pas dépendant de la forme du solide. Il n'est pas non plus nécessaire de

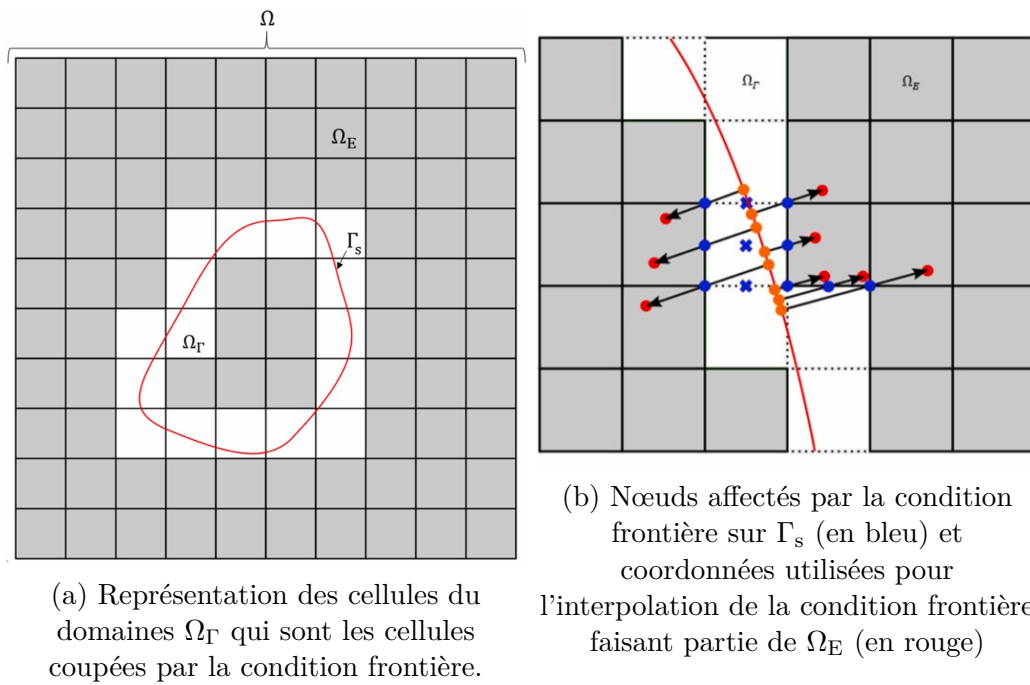
reconstruire un maillage d'une itération temporelle à l'autre, pour une simulation transitoire. L'une des méthodes de conditions immergées de Lethe est la méthode *sharp-interface*, qui sera utilisée pour les simulations d'écoulement rhéofluidifiant autour d'une sphère.

### 3.2.1 Méthode de conditions immergées *sharp-interface*

La méthode de conditions immergées *sharp-interface* vise à représenter les conditions de Dirichlet aux frontières  $\Gamma_s$  du solide immergé dans le fluide défini par le domaine fluide  $\Omega$  avec  $\Gamma_s \in \Omega$ . Ainsi, la frontière du solide  $\Gamma_s$  entrecoupe les cellules de  $\Omega$ . Les cellules entrecoupées forment un ensemble  $\Omega_\Gamma$  tel que  $\Gamma_s \in \Omega_\Gamma \subset \Omega$  (voir figure 3.1a). La condition à considérer sur la frontière du solide est :

$$\underline{u} = \underline{u}_\Gamma(\underline{x}, t) \quad \text{sur } \Gamma_s \quad (3.3)$$

Cette condition doit venir perturber le profil de vitesse et de pression autour de  $\Gamma_s$ . La formulation faible en éléments finis est donc altérée pour les nœuds (ou degrés de libertés (DOF)) de  $\Omega_\Gamma$  qui touchent le domaine  $\Omega_E$  (les points bleus de la figure 3.1b, en supposant des éléments d'ordre 2). Pour chacun des points bleus (DOF de vitesse à la frontière entre  $\Omega_\Gamma$  et  $\Omega_E$ ), une droite normale à  $\Gamma_s$  est tracée, passant pas le point bleu et par  $\Gamma_s$ . La vitesse interpolée au point rouge situé à  $(1+\epsilon)(\underline{x}_d - \underline{x}_\gamma)$  sera utilisée pour imposer la vitesse au DOF, avec  $\epsilon > 0$  un paramètre choisi. Les lignes du système matriciel vis-à-vis les inconnues  $\delta u_{d,i}$  (avec  $i$  l'indice de la composante de la vitesse) sont complètement éliminées. On les remplace par une interpolation de la vitesse en employant les points orange et rouge de la figure 3.1b. On opère une interpolation linéaire lorsque les éléments de vitesse sont d'ordre 1 ; pour l'exemple de la figure 3.1b où les éléments sont de second ordre, un point d'interpolation supplémentaire entre le point bleu et le point rouge est utilisé pour interpoler la vitesse effective au DOF. Cette méthode complexe vient avec son lot d'exceptions et de particularités, mais l'essentiel tient dans cette section.



- $\mathbf{n}$  : Vector normal to the boundary passing through the DOFs
- $\Gamma$  : Immersed boundary
- $d$  : DOFs with boundary condition
- $\Omega_E$  : Cells part of the effective domain
- $\Omega_\Gamma$  : Cells intersected by  $\Gamma$
- ✕ Dummy DOFs
- $\mathbf{x}_\gamma$  : The intersection point of  $\mathbf{n}$  and  $\Gamma$  where  $u_\gamma$  is evaluated
- $\mathbf{x}_n$  : The point used to define  $\Omega_n$

FIGURE 3.1 Représentation de la frontière du solide  $\Gamma_s$  immergée dans le domaine du fluide  $\Omega$  (tirées de [48]).

**CHAPITRE 4    ARTICLE 1 : AN EXTENSIVE STUDY OF SHEAR  
THINNING FLOW AROUND A SPHERICAL PARTICLE FOR  
POWER-LAW AND CARREAU FLUIDS.**

Cette section contient le manuscrit final de l'article publié dans le *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. L'article présente un état de l'art abrégé sur l'analyse de la force de traînée sur une particule sphérique seule pour les fluides de la loi de puissance (*power-law*) et des fluides de Carreau. Le contexte théorique est présenté, incluant la formulation stabilisée en éléments finis, les équations des deux modèles rhéologiques utilisés et la force de traînée. La formulation complète en éléments finis pour les écoulements non-newtoniens est fournie au chapitre suivant. Une analyse de convergence en maillage sur le profil de vitesse pour le modèle de Carreau est montrée. Plus de détails sur la vérification de code seront donnés à la section suivante. Les modèles de coefficients de traînée pour les écoulements newtoniens présentés dans l'article sont donnés au tableau 2.1 de la section 2.3.2 de la revue de littérature. L'article ne présente pas d'exemples de profils de viscosité autour de la sphère : ce sera abordé au chapitre suivant. La bibliographie de l'article est regroupée avec celle du mémoire, présentée à la fin du document.

La stabilisation à la formulation faible présentée à la section 4.3.2 et la corrélation du coefficient de traînée pour les fluides de loi de puissance présentée à la section 4.5.2 sont les aspects novateurs de la contribution scientifique. En effet, la modification des termes de stabilisation ajoutés à la formulation faible (équation (4.10)) est ce qui permet essentiellement la robustesse du solveur non-linéaire. De plus, la corrélation suggérée (équation (4.24)) se trouve parmi les plus précises de la littérature, pour une aussi grande plage de  $Re$ .

Auteur.e.s : Carole-Anne Daunais, Lucka Barbeau et Bruno Blais.

Soumission: Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics le 15 septembre 2022

Mots-clés : *Computational Fluid Dynamics, Power-Law, Carreau, Shear Thinning Flow, High-Order Methods, Drag Force on Sphere*

#### **4.1 Abstract**

We develop and implement a high-order finite element formulation to solve incompressible shear thinning flows using power-law and Carreau rheology models. We verify the implementation using the Method of Manufactured Solutions (MMS) and demonstrate that the implementation preserves the order of accuracy of the FEM scheme. We run high-order flow-past-a-sphere simulations for  $Re \in [0.1, 100]$  for Newtonian and shear thinning flows.

Power-law simulations cover  $n \in [0.3, 0.9]$ , Carreau simulations cover the same range of  $n$  and dimensionless relaxation times  $\Lambda \in [0.1, 100]$ . We use 3D Cartesian grids, adopting a high-order sharp-interface immersed boundary method (IBM) to impose the no-slip boundary condition on the surface of the sphere. We use dynamic mesh adaptation with a Kelly error estimator to adaptively refine the grid. Newtonian drag coefficients are compared to Clift et al.'s model. Using the power-law model for shear thinning flow, results show that when decreasing  $n$ : the drag coefficient increases for  $\text{Re} \lesssim 5$ , it decreases for  $\text{Re} \gtrsim 5$ , and that for higher Reynolds the wake region is longer and the separation point is moved upstream. These drag coefficient results are in adequation with previously established simulation results. We provide a new drag coefficient correlation for power-law fluids that is valid for a wide range of  $n$  and for  $\text{Re} \in [0.1, 100]$ , with  $R^2 = 0.998$ . The power-law model is singular in the zero-shear limit, and this limit is bound to occur in a flow-past-a-sphere geometry. For that matter, the Carreau model is well-posed. As the Carreau-modeled results show, the drag force on the sphere is considerably affected by the initial Newtonian plateau of the fluid. Drag coefficient results in the creeping flow regime are compared to experimental results, allowing validation of the numerical model. This work provides a better understanding of shear thinning flow past a sphere, for which the relationship between drag and flow regimes are highly nonlinear.

## 4.2 Introduction

Understanding the behavior of diluted particle suspensions in shear thinning flows is fundamental to the chemical processing industry. While water is a Newtonian fluid, many water-based cosmetic, pharmaceutical, and agrifood products will experience shear thinning behaviors, meaning that their viscosity will decrease when shear is applied [23]. Molten plastics also play a massive part in the shear thinning fluid industry. Various unit operations treat shear thinning fluids using spherical particles such as packed and fluidized beds, or mechanical/chemical separation [24].

An effective way to understand the behavior of shear thinning flow through particle suspensions is to develop models that predict the flow pattern around the particles, and the forces that the fluid applies on them. To do so, it is appropriate first to study shear thinning flow past a single sphere.

The drag force on a single sphere in non-Newtonian fluids has been studied for over half a century. This section draws a brief overview of this study. On power-law modeled flow past a sphere [13], Adachi et al. (1973) studied the impact for  $n \in [0.8, 1.0]$  at  $\text{Re} = 60$  as well as for creeping flow using a statistical method (method of moments) [49]. They concluded that the drag force increases when decreasing  $n$  notwithstanding the flow regime. They also



determined that the wake region is longer for shear thinning flows. Acharya et al. (1976) are seemingly the first to experimentally study the case of a falling sphere in inelastic and elastic shear thinning fluids for  $Re \in [0.001, 1000]$  with  $n \in [0.45, 1.0]$  [50]. They developed an expression for the drag coefficient as a function of  $n$  and  $Re$ . With a finite difference scheme, Lockyer et al. (1980) extended the  $n$  range to  $[0.4, 1.0]$ , without specifying the Reynolds number range [51]. To our best knowledge, they were the first to capture that the drag force on spheres in shear thinning flow increases for what they define as low Reynolds numbers and decreases for what they define as high Reynolds numbers when compared to Newtonian flow, which does not necessarily contradict the previous authors. They proposed an expression for the drag coefficient as a function of  $n$  for creeping flow. The article, however, omits to report a grid convergence analysis and a domain size analysis. Dahzi & Tanner (1985) introduced a finite element solver for power-law Stokes flow with  $n \in [0.1, 1.0]$ , and they also proposed an expression for the drag coefficient as a function of  $n$  [52]. Grid convergence results were not reported, but we assume the authors performed their simulations with due diligence. Still considering a creeping flow regime, Kawase & Moo-Young (1986) employed a perturbation approximation using an expression for the stream function to quantify the drag force for  $n \in [0.6, 1.1]$ , also concluding that the drag force increases as  $n$  decreases [53]. Tripathi et al. (1994) enlarged their flow regime range to  $Re \in [0.01, 100]$  with  $n \in [0.4, 1.0]$  around spheroids, numerically solving using a finite element method [9]. They performed a domain size convergence analysis in conjunction with a mesh size analysis (using cylindrical coordinates in 2D). However, the analyses results are not portrayed in the article, and the  $Re$  and  $n$  values used for these analyses are not specified. Tripathi et al. again observed that, as  $n$  decreases, the drag force is higher for low  $Re$  and lower for high  $Re$ , and they additionally found that this switch in the shear thinning effect happens between  $Re = 2$  and  $Re = 5$ . They established that the wake length decreases for high Reynolds as  $n$  decreases, which thus contradicts Adachi et al. Renaud et al. (2004) gathered experimental drag coefficients from other authors for  $Re \in [0.1, 1000]$  and developed a correlation for  $C_D$  a function of  $Re$  and  $n$  for  $n \in [0.2, 1.0]$ . Their correlation for  $C_D$  has an average error of 21% for  $Re \leq 1$  and 16% for  $Re \geq 1$ . This error is mainly attributable to viscoelastic and wall effects. They also acknowledge the switch in drag at  $Re = 5$  [54]. Dhole et al. (2006) adopted a finite volume method approach to simulate power-law modeled flow for  $Re \in [5, 500]$  and  $n \in [0.5, 2.0]$  [1]. They performed a domain size analysis along with a grid size analysis. They observed that the drag force decreases in shear thinning fluids, which meets with Tripathi et al.'s conclusions. Like Adachi et al. predicted, they noticed that the wake is larger as  $n$  decreases. Song et al. (2009, 2011) simulated a falling sphere in power-law fluids for  $Re \in [1, 100]$  and  $n \in [0.2, 1.0]$  using a FEM commercial software while comparing with experimental data [2, 10]. They

performed a thorough study on the impact of the domain size, characterized by the ratio of the diameter of the sphere to the diameter of the cylindrical domain, on the simulation results. They must have carried out a mesh independence analysis but it is not shown in their work. They study the impact of  $n$  and of the domain size on the drag coefficient, the recirculation (wake) length and the separation angle. They provide an expression for  $C_D$  for a sphere inside a cylinder of diameter ratio of over 0.21, that is out of scope of this present study. They also concluded that the wake region is longer as  $n$  decreases.

Regarding Carreau model studies, Chhabra & Uhlherr (1980) were seemingly the first to analytically derive an expression for the drag force considering a Carreau-modeled fluid for  $n \in [0.2, 1.0]$  and dimensionless relaxation times  $\Lambda \in [0.1, 1000]$  for creeping flow, that they experimentally validated [12]. They extended this study to intermediate flow regime (1980) for  $n \in [0.52, 1.0]$ ,  $\text{Re} \in [0.032, 394]$  and dimensionless relaxation times  $\Lambda \in [0.032, 630]$  [55]. They developed an expression of  $C_D$  with a maximal deviation of 14% when compared to experimental data they gathered. They concluded that the variation in the drag force is a function of  $n$  and  $\Lambda$ , but is independent of  $\text{Re}$ . Bush & Phan-Thien (1984) took Chhabra & Uhlherr's work and extended their research to  $n \in [0.1, 1.0]$  using a boundary element method [56]. They concluded that the drag force increases in shear thinning creeping flow up until  $n = 0.3$  and started to decrease after that. Bush & Phan-Thien conducted a grid convergence analysis only considering Newtonian creeping flow. Hsu et al. (2008) numerically studied the drag on a sphere in a particle suspension in Carreau fluids for  $n \in [0.3, 1.0]$ , for  $\text{Re} \in [0.1, 100]$  with  $\Lambda \in [0, 10]$  [57]. They simulated the flow around a single sphere for an artificial void fraction  $\epsilon \in [0.27, 0.999]$ . They perform a domain size analysis, while the choice of mesh (FEM) is not discussed. They developed an expression for  $C_D$  for  $\epsilon < 0.7$ , which is highly appropriate for the study of particle suspensions but slightly out of scope for this paper since we are interested in the flow around a single sphere. They concluded that the drag decreases when increasing  $\Lambda$ ; this agrees with the observations of Chhabra & Uhlherr in the creeping flow regime.

What emerges from this overview is that most of the studies center on creeping flow around the sphere, and the numerical analyses often lack in depicting a thorough investigation of the grid refinement convergence as well as a domain size independence with regards to the calculated drag force. Most articles do not detail the procedure they underwent to obtain an expression for the drag coefficient using numerical and experimental data. Additionally, there were few Carreau fluid studies in the past due to the complexity of the model, although shear thinning fluids will inevitably experience a Newtonian plateau ( $\eta_0$ ) in the limit of zero shear rate where the power law model is ill-posed.

This work centers on describing the effect of inelastic shear thinning behaviors on the drag force of a single spherical particle in non-restricted motion. We propose a new stabilized high-order finite element formulation for shear thinning flow, we perform a code verification of the formulation, we present a domain size analysis on the limit cases for the flow-past-a-sphere simulation ranges and a thorough grid convergence analysis, we illustrate the drag coefficients and present a new correlation for the drag coefficient as a function of  $n$  and  $Re$  for power-law modeled simulations, and we finally discuss Carreau simulation results. Power-law results are compared to numerical results in the literature, and Carreau results are compared to experimental measurements in the creeping flow regime.

The developed framework for shear thinning flows can eventually be extended to more complex geometries, namely for shear thinning flow through packed beds, or for dynamic mixers that treat shear thinning flow.

### 4.3 Governing equations and numerical implementation

We consider an incompressible 3D flow inside a domain  $\Omega$ . In Einstein's notation, the incompressible Navier-Stokes equations are:

$$\partial_l u_l = 0 \tag{4.1}$$

and

$$\partial_l u_k + u_l \partial_l u_k = -\frac{1}{\rho} (\partial_k p + \partial_l \tau_{lk}) + f_k \tag{4.2}$$

where the viscous stress term  $\tau_{lk}$  is defined by

$$\tau_{lk} = -\eta (\partial_l u_k + \partial_k u_l) \tag{4.3}$$

with  $u_k$  the  $k$  velocity component,  $\rho$  the fluid's constant density,  $p$  the fluid's pressure,  $\eta$  the fluid's dynamic viscosity and  $f_k$  a source term.

For non-Newtonian fluids,  $\eta$  is a function of the shear rate magnitude that needs to be characterized.

#### 4.3.1 Shear thinning flow

A shear thinning flow is a flow for which the viscosity locally decreases when high shear stresses are applied [13]. At low shear rates, the fluid's viscosity will be constant at  $\eta_0$  (see region 1 in Fig. 4.1). This is the initial Newtonian plateau. For very high shear rates, the

viscosity of some fluids will reach a second Newtonian plateau at  $\eta_\infty \ll \eta_0$  (region 4). A viscosity drop occurs after a critical shear rate (region 3) intrinsic to the fluid. The slope in region 2 characterizes the level of this shear thinning behavior.

The two models used in this work are the power-law model and the four-parameter Carreau model.

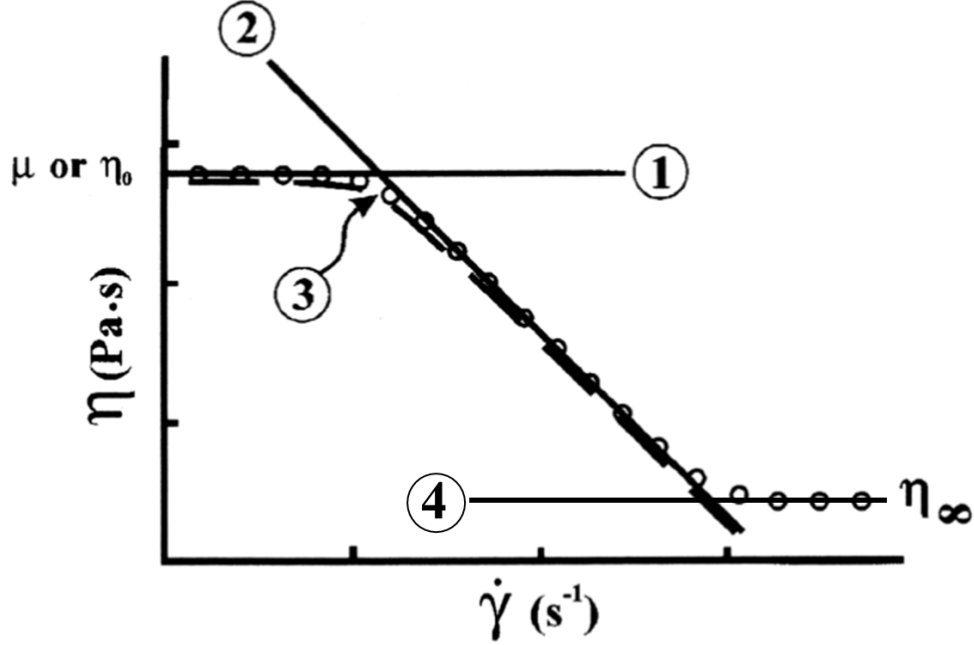


Figure 4.1 Viscosity regions for shear thinning flows, in log-log scale, with two Newtonian plateaus (1 & 4), a transition (3) to the descending section (2) (adapted from [3]).

### Power-law model

This model only requires two parameters and its parameters may easily be found from rheological measurements by linear regression [13]. The viscosity is given by:

$$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1} \quad (4.4)$$

where  $K$  is the viscosity for a shear rate magnitude of  $1.0 \text{ s}^{-1}$ ,  $n - 1$  is the slope of  $\log(\eta) = f(\log(\dot{\gamma}))$  and  $\dot{\gamma}$  is the shear rate magnitude. It adequately captures region 2 (Fig. 4.1) but fails to represent the  $\eta_0$  and  $\eta_\infty$  plateaus. It is ill-posed in regions of low to no shear, as the viscosity reaches infinity. This is highly problematic from a computational fluid dynamics (CFD) perspective, since regions of no shear are bound to happen at a point during the solution process.

Since the viscosity is no longer constant, there is an obvious need to redefine the Reynolds number that takes the shear thinning effect around the sphere into account. As demonstrated in [3], an *a priori* Reynolds number for power-law flow past a sphere is given by:

$$\text{Re} = \frac{\rho|\mathbf{u}|^{2-n}D^n}{K} \quad (4.5)$$

for which a presumptive apparent shear rate magnitude around the sphere is:

$$\dot{\gamma}_{\text{app}} = \frac{|\mathbf{u}|}{D} [=] \text{ s}^{-1} \quad (4.6)$$

with  $\mathbf{u} = u_k$ .

We note that the given Re in equation (4.5) represents an *a priori* estimate of the effective Reynolds number. In reality, the shear rate and the viscosity vary abruptly in space. The *a priori* Re is widely used in the literature and helps to compare results.

### Carreau model

The four-parameter Carreau model is a generalization of the power-law model that enables to capture both Newtonian regions and the smooth transitions between them and the power-law modeled section. Viscosity as a function of the shear rate is given by:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty})[1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}} \quad (4.7)$$

where  $\eta_0$  and  $\eta_{\infty}$  are respectively the viscosity at rest and the viscosity at high shear rates,  $\lambda$  is the relaxation time, and  $n$  is the slope parameter, comparable to that of the power-law model. For the sake of reducing the number of parameters to investigate, and since we know that the shear rates inside  $\Omega$  will stay in regions 1 and 2 (see Fig. 4.1), we set  $\eta_{\infty} = 0$ . Introducing (4.6) and (4.7) into the Reynolds number equation, we get:

$$\text{Re} = \frac{\rho|\mathbf{u}|D}{\eta_0 \left(1 + \left(\lambda\frac{|\mathbf{u}|}{D}\right)^2\right)^{\frac{n-1}{2}}} \quad (4.8)$$

#### 4.3.2 Finite element formulation

The non-Newtonian solver is implemented in the open-source CFD software Lethe, based on the `deal.II` framework [41], that uses a Galerkin SUPG/PSPG stabilized finite element formulation approach (see [39] for further details). In this case, the viscosity will vary inside

$\Omega$  and can no longer be considered a constant. Hence, the finite element weak formulation for steady-state flow becomes:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega + \sum_k \int_{\Omega_k} \mathcal{J}_s \cdot (\tau_{\text{PSPG}} \partial_l q) d\Omega_k &= 0 \\ \int_{\Omega} v_k (u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega - \int_{\Omega} \partial_k v_k (p) d\Omega + \int_{\Omega} \eta (\partial_l v_k) (\partial_l u_k) d\Omega & \\ + \sum_k \int_{\Omega_k} \mathcal{J}_s \cdot (\tau_{\text{SUPG}} u_k \partial_l v_k) d\Omega_k &= 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

with  $(v_k, q) \in H_0^1$  the test functions for velocity in the  $k$  direction and for pressure, respectively, and  $\mathcal{J}_s$  the strong form of the residual for the momentum equation being:

$$\mathcal{J}_s = u_l \partial_l u_k + \partial_k p - \eta \partial_l \partial_l u_k - \underbrace{\partial_l \eta (\partial_k u_l + \partial_l u_k)}_{\text{Added term}} - f_k \quad (4.10)$$

for non-Newtonian flow, and

$$\tau_{\text{PSPG}} = \tau_{\text{SUPG}} = \left[ \left( \frac{2|\mathbf{u}|}{h_{\text{conv}}} \right)^2 + 9 \left( \frac{4\nu}{h_{\text{diff}}^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (4.11)$$

with  $h_{\text{conv}} = h_{\text{diff}} = h$  the characteristic size of the cell [58]. The viscosity gradient  $\partial_l \eta$  is evaluated using the chain derivative rule:

$$\partial_l \eta = \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \partial_l \dot{\gamma} \quad (4.12)$$

where  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  is model-dependent, and

$$\partial_l \dot{\gamma} = 2 \cdot \frac{1}{\dot{\gamma}} \cdot \partial_m u_k (\partial_l \partial_m u_k + \partial_l \partial_k u_m) \quad (4.13)$$

## Implementation challenges

Upon initiation of solving the nonlinear system, the velocity solution vector is often unknown and may be constant (e.g. zero). Thus, the shear throughout the domain is initially zero. Since (4.13) is undefined for  $\dot{\gamma} = 0$ , a minimal shear rate magnitude is forced to  $10^{-12}$ , which is small enough to not alter the solution.

A similar problem is encountered when calculating  $\eta$  using equation (4.4) and when calculating  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  for power-law fluids. Indeed, neither  $\eta$  nor  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  are defined for  $\dot{\gamma} = 0$  for the power-law

model (unlike the Carreau model). Additionally, for low shear rates, since the viscosity is not capped, it can reach excessively high values that are not physical, and that greatly affects the stability of the solver. When using the power-law model, a minimal shear rate  $\dot{\gamma}_{\min}$  is required. This technique is recurrent in commercial CFD software, namely in *Ansys Fluent* [59]. The equivalent maximal viscosity will depend on the chosen  $K$  and  $n$  parameters (see (4.4)).

### 4.3.3 Drag force

The total drag force felt on a arbitrary object is:

$$F_D = - \left( \int_A (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}}) dA \right) \cdot \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \quad (4.14)$$

with  $A$  the total surface of the object in contact with the fluid,  $\underline{\underline{\sigma}}$  the total stress tensor on the surface,  $\underline{\underline{n}}$  a unit vector normal to the surface of the object, and  $\mathbf{u}$  the velocity of the fluid far from the object [19]. The negative sign indicates that we are considering the force of the fluid applied on the particle, in the opposite direction of  $\underline{\underline{n}}$ , and the  $\frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}$  term allows to only consider the drag component to be in the same direction as  $\mathbf{u}$ . The total stress tensor has a viscous stress component and a pressure component (4.15) [13]. The  $\underline{\underline{\tau}}$  is significantly affected by the shear thinning behavior on the surface of the object and this changes the resulting viscous drag force (or friction drag force).

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\tau}} + p\underline{\underline{I}} \quad (4.15)$$

For flow past a spherical object, the drag force is:

$$\mathbf{F}_D = \left( \frac{1}{2} A_{\text{eff}} \rho |\mathbf{u}|^2 C_D \right) \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \quad (4.16)$$

where  $A_{\text{eff}}$  is the effective area of the particle seen from the fluid moving towards it in the  $\mathbf{u}$  direction, hence  $\pi D^2/4$  for a sphere, and  $C_D$  is the drag coefficient [25].

## 4.4 Verification of the model using the Method of Manufactured Solutions

We perform a code verification using the Method of Manufactured Solutions (MMS) [60]. This method consists in manufacturing an exact solution for  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  and  $p(\mathbf{x}, t)$  on a given calculation domain, regardless of its physical plausibility, that is sufficiently complex to ensure a thorough code verification [61]. This means that  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  and  $p(\mathbf{x}, t)$  should be elements of

$\mathcal{C}_{(m+q)}$ , where  $m$  is larger than the number of times either  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  or  $p(\mathbf{x}, t)$  is derived in the differential equation and  $q$  is the order of the FEM scheme. We then integrate these manufactured solutions in the Navier-Stokes continuity (4.1) and momentum (4.2) equations to calculate a source term for the differential equation. We consider the following 2D exact solution in a calculation domain defined by  $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ :

$$u = \sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \quad (4.17)$$

$$v = -\cos(\pi x) \sin(\pi x) \sin(\pi y)^2 \quad (4.18)$$

$$p = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) \quad (4.19)$$

where  $\mathbf{u} = [u, v]^T$  and  $\mathbf{x} = [x, y]^T$ . The velocity and pressure fields are both infinitely differentiable (in  $\mathcal{C}_\infty$ ) because they are built from trigonometric functions. The velocity field is solenoidal, there is therefore no source term in the continuity equation. Since we consider a steady state problem without any external force, the source term on the momentum equation will take the following form:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} u\partial_x u + v\partial_y u + \frac{1}{\rho}(\partial_x p + \partial_x \tau_{xx} + \partial_y \tau_{yx}) \\ u\partial_x v + v\partial_y v + \frac{1}{\rho}(\partial_y p + \partial_x \tau_{yx} + \partial_y \tau_{yy}) \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

We use both implemented rheological models for code verification, but we only present the results for Carreau model verification in this article for brevity. Deriving an expression for the shear rate magnitude throughout the domain from (4.17) and (4.18), we get that  $\dot{\gamma} \in [0, \pi]$ . To get an exhaustive verification of the Carreau model by simulating the transition between the initial Newtonian plateau and the descending section of the viscosity (see Fig. 4.1), we set the following Carreau parameters :  $\eta_0 = 1$ ,  $\eta_\infty = 0$ ,  $\lambda = 1$  and  $n = 0.5$ , which give us the subsequent expression for viscosity :

$$\eta = (1 + \dot{\gamma}^2)^{-0.25} \quad (4.21)$$

Hence, the range of viscosity is between 0.551 and 1.000 m<sup>2</sup>/s.

Fig. 4.2 illustrates the  $\mathcal{L}^2$  norm of the error for the velocity, as the grid is globally refined, obtained using the stabilized SUPG/PSPG formulation. For Q1 through Q3 elements, the right order of convergence is obtained.



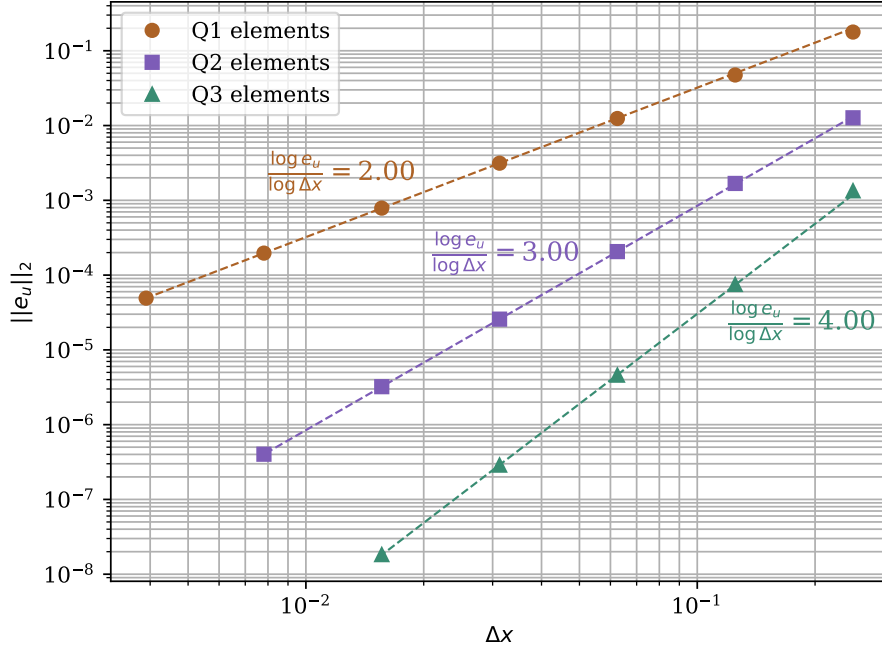


Figure 4.2 Evolution of the  $\mathcal{L}^2$  norm of the error on the velocity profile of a Carreau fluid for different scheme orders when operating a global mesh refinement. The order of convergence is consistent with the order of the underlying FEM interpolation.

## 4.5 Non-Newtonian flow past a spherical particle : Results

We present the methodology, including the adopted  $Re$  and  $n$  ranges and the  $\lambda$  range for simulations using the Carreau model. We discuss the required calculation domain size along with the selected discretization. Subsequently, the results are portrayed and discussed, including a new correlation for the drag coefficients for power-law fluids. We also discuss results using the Carreau model.

### 4.5.1 Methodology

The Reynolds number range covered in this work is from 0.1 to 100. A set of 20  $Re$  are used, all log-spaced. For both power-law and Carreau models, a set of eight values of  $n \in [0.3, 1.0]$ , each linearly-spaced, will be simulated. For Carreau-modeled simulations, for the sake of analyzing dimensionless parameters, dimensionless relaxation times  $\Lambda = 0.1, 0.4, 1, 4, 10, 100$  will be studied such that:

$$\Lambda = \lambda \dot{\gamma}_{app} \quad (4.22)$$

with  $\dot{\gamma}_{\text{app}}$  developed in (4.6).

The geometry for the simulations is given in Fig. 4.3, where  $u_\infty = \mathbf{u}(x) = 1$  m/s, the particle's diameter  $D$  is 1 m, and the height  $H$  is determined in section 4.5.1. Thus, for all simulations,  $\dot{\gamma}_{\text{app}}$  is  $1.0 \text{ s}^{-1}$ , and the Reynolds numbers are set by changing  $K$  for power-law simulations, and  $\eta_0$  for Carreau simulations (see equations (4.5) and (4.8) respectively). All lateral walls are given a `slip` boundary condition [39].

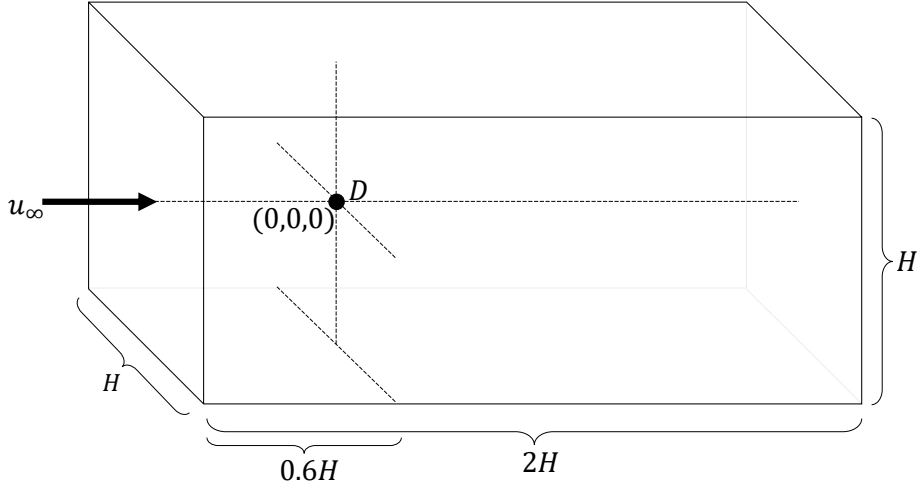


Figure 4.3 Geometry of the calculation domain and position of the particle for all simulations, with  $D$  the diameter of the spherical particle. The dimension  $H$  will be determined in section 4.5.1.

We launch all simulations using second-order elements for the velocity interpolation and first-order elements for pressure ( Q2Q1). We initially tried Q1Q1 interpolation elements, but these would have required overly fine meshes (and consequently, high number of degrees of freedom) to reach the same level of spatial accuracy. A second order interpolation allows for spatial variation of the shear rate and viscosity within cells. This has a direct impact on the drag force accuracy, and the high-order isoparametric coordinates capture the curvature of the surface of the spherical particles more adequately.

The particle is represented using a high-order sharp-interface immersed boundary method (see [48] for further information on the method). The grid is strategically refined around the particle using a 2-step adaptive refinement technique based on the Kelly error estimator on the velocity [44]. At each refinement step, the convergence criterion on the absolute norm of the solution residual is set to  $10^{-5}$ , and a relative residual of  $10^{-7}$  is obtained with respect to the initial residual. We use a 3D Cartesian grid and choose to simulate on a domain that

totally surrounds the particle. If we had chosen to only consider a half or a quarter of the domain cutting through the particle at  $(0, 0, 0)$  along the  $z$ -axis, mesh adaptation would have been hazardous along the axis of symmetry. Moreover, using a domain that encloses the spherical particle greatly helps the iterative solver.

A complete mesh analysis is presented in section 4.5.1. The domain size and mesh-sensitivity analyses are carried out using the power-law model, as power-law fluids simulations are more mesh-sensitive and difficult to simulate.

### Domain size

Considering laminar flow past a sphere, at  $\text{Re} = 100$ , the thickness of the boundary layer is small compared to the sphere diameter [62]. This means that the velocity close to the sphere rapidly reaches  $u_\infty$ . As the Reynolds number lowers down to 0.1, this boundary layer gradually thickens. The domain size  $H$  should be large enough to ensure that the resulting drag coefficient does not vary as the domain is further enlarged for low  $\text{Re}$ . We carry out the domain size study at  $\text{Re} = 0.1$  for Newtonian fluids, as the conclusions can be extended to shear thinning flow (see section 4.5.2 along with Fig. 4.11 for validation of this hypothesis). Notice that all studied domains keep the same proportions (see Fig. 4.3).

Four  $H/D$  ratios were analyzed. For each ratio, we use the same  $\frac{D}{\Delta x}$  factor close to the surface of the sphere, and we operate a 2-step adaptive mesh refinement targeting 20 % of the cells at each step (further details are given in section 4.5.1). In Fig. 4.4, we notice that, as the domain becomes larger, the error on the drag coefficient decreases compared to the largest domain. We consider that, for  $H/D = 60$ , a relative error of less than 0.5% is optimal to simultaneously minimize computational costs and error. The size of the particle is  $D = 1$ , hence  $H = 60$ . This domain size will be used for all simulations.

### Discretization

Because we are using an immersed boundary method to take the no-slip condition on the surface of the sphere into account, we will not use a conformal grid but rather mesh the entire calculation domain using a structured Cartesian mesh. This mesh should be fine close to the particle surface to properly capture the flow pattern around it. The mesh should however be coarser farther from the particle, since the flow pattern will not vary as much. We are therefore using a homogeneous grid of  $16 \times 8 \times 8$  cells, all of size  $7.5^3$ , that will later be refined around the particle. We then define a refinement zone close to the particle inside which the cells are refined six times. We choose a cubic refinement zone for low Reynolds

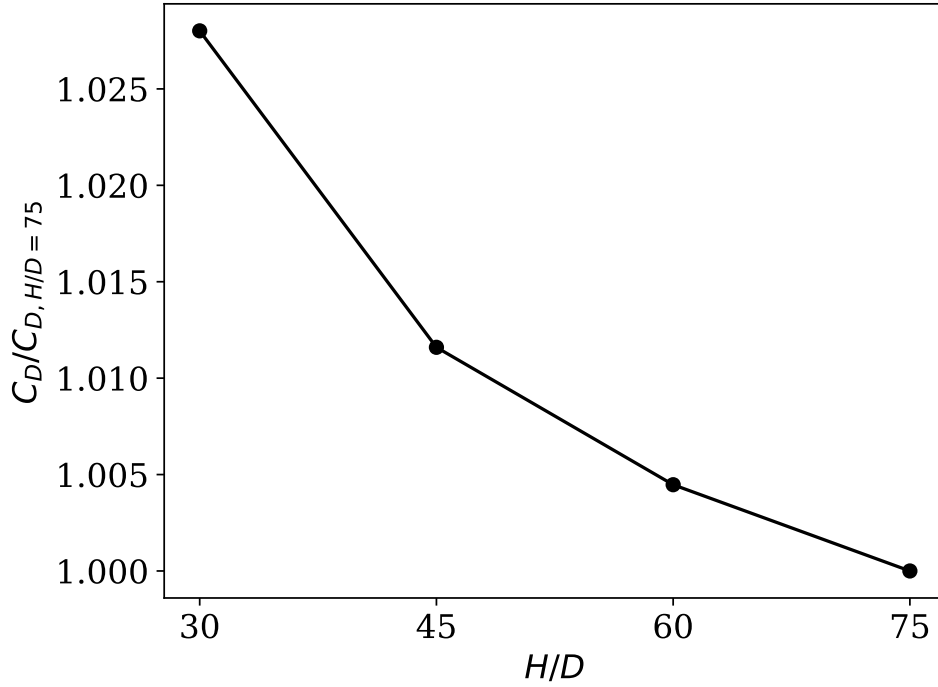


Figure 4.4 Evolution of the drag coefficient  $C_D$  as  $H/D$  is increased at  $\text{Re} = 0.1$  for Newtonian flow, considering  $C_{D, H/D=75} = 244.7$ . With an error of less than 1%, the  $H/D$  ratio of 60 is chosen.

simulations as the flow is nearly symmetrical on all three axes centering in  $(0, 0, 0)$ , and we narrow the refinement zone in the  $x$ -direction for higher Reynolds simulations. For example, at  $\text{Re} = 0.1$ , the refinement zone is defined by the cube inside  $[-2, -2, -2] \times [2, 2, 2]$ , and at  $\text{Re} = 100$ , all cells inside  $[-1.5, -1, -1] \times [4, 1, 1]$  are refined six times. The refined cells inside this zone will be of size  $0.117^3$ . For all simulations, this grid is the initial grid, or initial level of refinement, where the smallest cells are of size  $0.117^3$ , and the biggest cells far from the particle are of size  $7.5^3$ . Hence, the initial grids used for the simulations have a characteristic mesh size of  $\frac{\Delta x}{D} = 0.117$  around the particle's virtual boundaries (the rightmost points in Fig. 4.5a and Fig. 4.5b).

The idea is to keep refining until the simulated drag coefficient does not change any further. At each subsequent refinement step in the simulation (each subsequent points in Fig. 4.5), we systematically refine each cell inside a hypershell zone located inside  $0.5 \frac{D}{2} \leq \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} < 1.5 \frac{D}{2}$ . Simultaneously, we adaptively refine the grid targeting the cells with the greatest error based on the Kelly error estimator applied to the velocity field [44]. Hence, each point in figures Fig. 4.5a and Fig. 4.5b within a curve represent a level of refinement in the same

launched simulation. We operate the analysis covering the  $n$  range for  $\text{Re} = 0.1$  and  $\text{Re} = 100$ .

For each simulation, the mesh is refined four times for a total of five levels of refinement, from  $\frac{\Delta x}{D} = 0.117$  ( $\frac{D}{\Delta x} = 8.5$ ) to  $\frac{\Delta x}{D} = 7.3 \times 10^{-3}$  ( $\frac{D}{\Delta x} = 136$ ) (the leftmost points in Fig. 4.5a and Fig. 4.5b). We can observe in Fig. 4.5 that for  $\text{Re} = 0.1$  and for  $\text{Re} = 100$ , the Newtonian solution ( $n = 1$ ) is rapidly mesh-independent. There is a relative error between the calculated drag coefficient for the median refinement at  $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$  and the finest mesh of 0.6% for  $\text{Re} = 0.1$  and 0.2% for  $\text{Re} = 100$ . We also notice that the solution does not converge as rapidly for shear thinning cases. Indeed, in Fig. 4.5a, the drag coefficient convergence is delayed as  $n$  decreases. For  $\text{Re} = 100$  (Fig. 4.5b), reaching a converged solution seems hazardous for shear thinning flow as the evolution of the drag force is not monotonic. This is due to the needed convergence on the viscosity profile, which is not the case for Newtonian simulations. The viscosity range throughout the domain becomes exponentially larger as  $n$  decreases; hence the nonlinear component of equation (4.9) becomes greater and results in a much stiffer problem. For this reason, a thorough mesh-independence study is needed and its importance is even more relevant as  $n$  decreases. Conclusions on mesh-independence cannot be drawn from Newtonian simulations only.

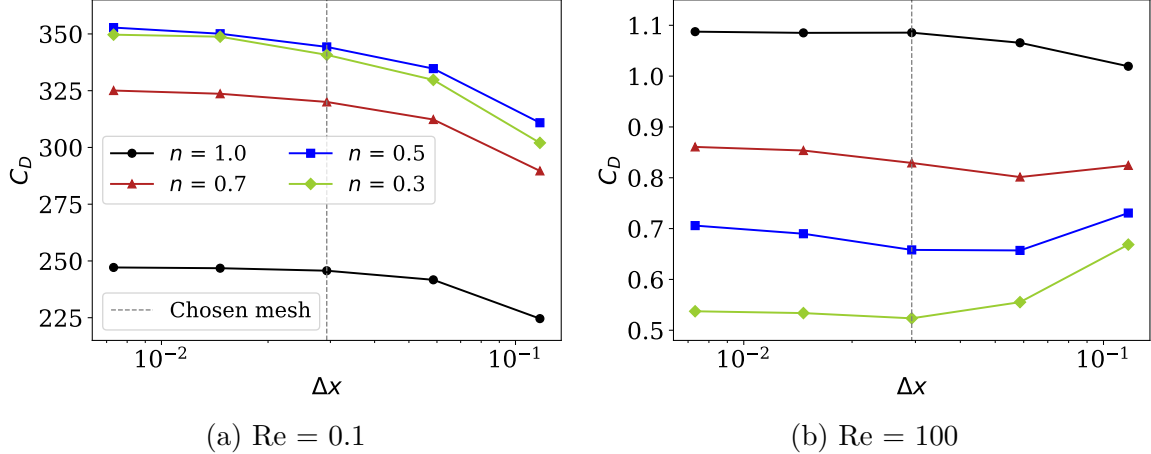


Figure 4.5 Evolution of the drag coefficient ( $C_D$ ) as the cells near the particle are refined, for different  $n$  values for (a)  $\text{Re} = 0.1$  and (b)  $\text{Re} = 100$ , using the power-law model. The chosen mesh size ( $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ ) is in grey.

For all  $n$ , the average error calculated between the drag coefficient at  $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$  and the most refined mesh ( $\frac{\Delta x}{D} = 7.32 \times 10^{-3}$ ) is below 2%, and the maximal error is encountered at  $(\text{Re}, n) = (100, 0.5)$  (6.8%). Accessing the next level of refinement ( $\frac{\Delta x}{D} = 1.46 \times 10^{-2}$ ) adds up to 2.4 times the computational costs of reaching the previous level at  $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ ,

and exceptionally 11.1 times for the  $(\text{Re}, n) = (100, 0.3)$  case. A level of refinement of  $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$  is chosen to minimize the error while maintaining reasonable computational costs.

Fig. 4.6 presents two examples of meshes used for simulations at  $\text{Re} = 0.1$  and  $\text{Re} = 100$ . The meshes present eight levels of cell refinement, with the coarsest cells of size 7.5 and the finest cells of size  $2.93 \times 10^{-2}$ . We notice in Fig. 4.6a, for  $\text{Re} = 0.1$ , that cells far from the particle are refined due to velocity diffusion captured by the Kelly error estimator and that the refinement is relatively symmetrical. In Fig. 4.6b, at  $\text{Re} = 100$ , with a thin boundary layer and a long wake downstream, the refinement focuses on the particle region and the wake region. We can also acknowledge that all cells inside  $0.5\frac{D}{2} \leq \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq 1.5\frac{D}{2}$  have reached the maximal level of refinement.

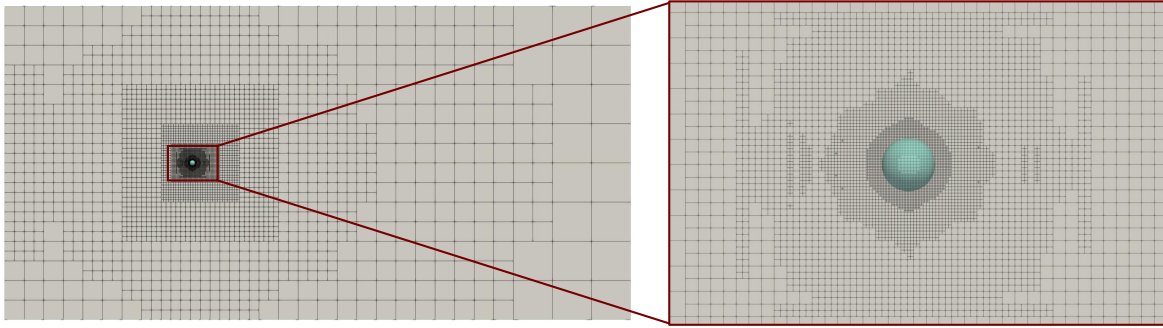
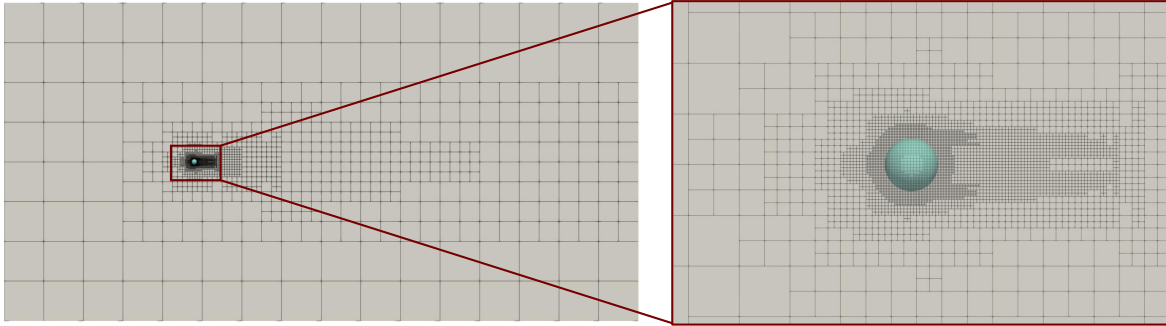
(a)  $\text{Re} = 0.1$ (b)  $\text{Re} = 100$ 

Figure 4.6 Examples of  $xy$ -plane mesh slices used for (a)  $\text{Re} = 0.1$  and (b)  $\text{Re} = 100$ , with  $H/D = 60$  around the spherical particle (in turquoise).

## On choosing a minimal shear rate for power-law simulations

As mentioned in section 4.3.2, the power-law model is ill-posed for problems that encounter very low shear rates, which is the case for this problem. For  $Re = 0.1$ , a thorough resolution of the velocity profile further from the particle is important to achieve a drag coefficient convergence. As pictured in Fig. 4.7, using a  $\dot{\gamma}_{\min} = 10^{-2}$  significantly alters the calculated velocity and viscosity profiles, it therefore alters the drag force. For each  $Re$ , it is crucial to perform a sensitivity analysis on the minimal shear rate. We choose a value that assures an accurate estimation of the drag force, while again minimizing computational costs and providing converged solutions.

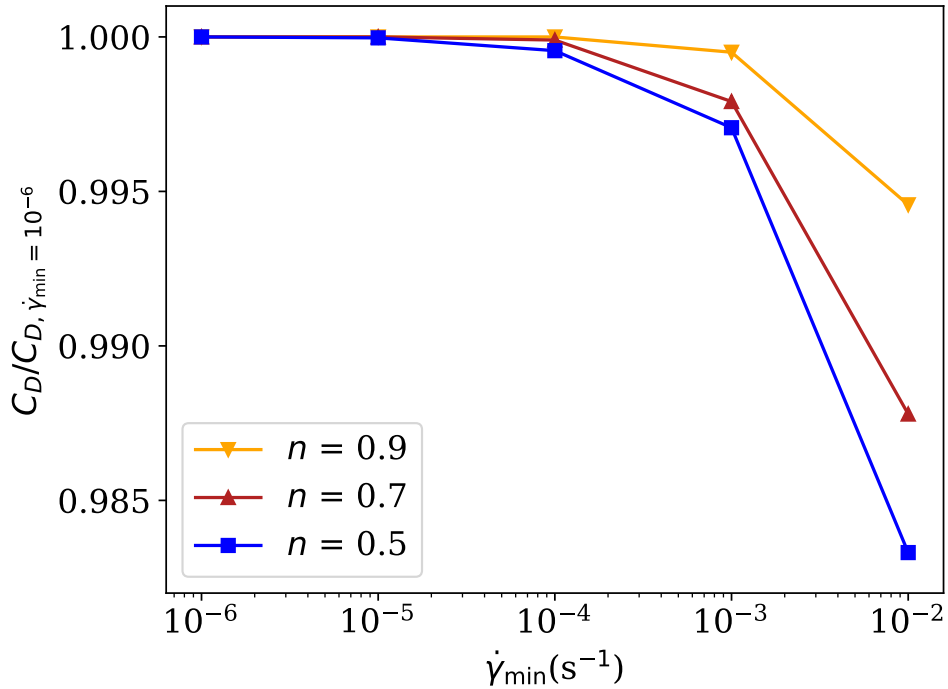


Figure 4.7 Evolution of the drag coefficient ( $C_D$ ) for  $n = \{0.5, 0.7, 0.9\}$  for a series of minimal shear rate ( $\dot{\gamma}_{\min}$ ) values used for power-law simulations, at  $Re = 0.1$ . A  $\dot{\gamma}_{\min} < 10^{-4}$  is ideal for  $Re = 0.1$ , for all  $n$ .

### 4.5.2 Results and discussion

We perform all simulations using Lethe. We first run Newtonian flow simulations, and from the vast literature on the single-sphere case, we find the best drag coefficient model to fit our data. We then simulate shear thinning fluids with both power-law and Carreau models.

## Model fitting for Newtonian flow

Many models in the literature that cover our simulations Re range (from 0.1 to 100) were compared to our results (see Fig. 4.8) [1,4–8,29–31]. Most models are, in general, in excellent agreement with our results (less than 4% error). Dhole et al.'s model is a drag correlation developed for shear thinning flows in which we have set  $n$  to 1. This model was initially developed to fit a wide range of  $n$ , leading to a more significant error (up to 5%) compared to the present work's results than other correlations restricted to Newtonian fluids. On the basis of a least squares method, the model given by Clift et al. (see (4.23)) is easily the most adequate for the range of Reynolds number investigated [4,63].

$$C_{D,0} = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}} \left[ 1 + 0.1315 \text{Re}^{0.82 - 0.05 \log_{10} \text{Re}} \right], & \text{if } \text{Re} \leq 20 \\ \frac{24}{\text{Re}} \left[ 1 + 0.1935 \text{Re}^{0.6305} \right], & \text{if } \text{Re} \geq 20 \end{cases} \quad (4.23)$$

$C_{D,0}$  represents an estimate of  $C_D|_{n=1}$  for  $\text{Re} \in [0.1, 100]$  using Clift et al.'s correlation, and  $C_{D,0}/C_D|_{n=1}$  is pictured in Fig. 4.8 in a thick yellow curve. All other models are shown in ascending order of  $\mathcal{L}^2$  norm of the error.

## Power-law simulation results

We first carry out power-law-modeled simulations for  $n \in [0.3, 0.9]$ . The drag coefficients for all  $n$  values through the Re range are compared to  $C_{D,0}$  (4.23), in order to quantify the effect of shear thinning behaviors on the drag. As many researchers observed, we notice in Fig. 4.9 that there is a switch in the shear thinning effect close to a Re of 5 or 6 [1,9,54,64]. This phenomena is essentially due to the cessation of the viscosity dominated regime. It looks as though the switch is not at a constant Re for all  $n$ . On the right part ( $\text{Re} \gtrsim 5$ ), we notice that when decreasing  $n$ , the drag is commensurately lower than for Newtonian fluids as Re increases. The change of slope for  $n \geq 0.6$  at  $\text{Re} \approx 23$  is due to the adjustment of the model for  $C_{D,0}$  at  $\text{Re} = 20$  (see (4.23)). On the left part ( $\text{Re} \lesssim 5$ ), as  $n$  decreases, the drag seems to be larger as Re decreases up until  $n = 0.4$ , after which the shear thinning effect decreases. On both sides, the slopes are monotonic for the given Re extent, although they do not seem to diverge : the  $C_D/C_{D,0}$  values tend to plateau. We design a correlation that reproduces this pattern.

The chosen form for  $C_D/C_{D,0}$  (4.24) is a hyperbolic tangent centering in  $\text{Re}_i(n)$ , where  $\alpha(n)$  is the amplitude,  $\beta(n)$  defines the speed at which  $C_D/C_{D,0}$  reaches  $\alpha(n)$  on both sides of  $\text{Re}_i$  and the vertical displacement is set to 1. All three expressions are shown in equation (4.25).  $\alpha(n)$  is a quadratic function due to the nonlinearity of  $C_D/C_{D,0}|_{\text{Re}=0.1}$ . On that matter, other



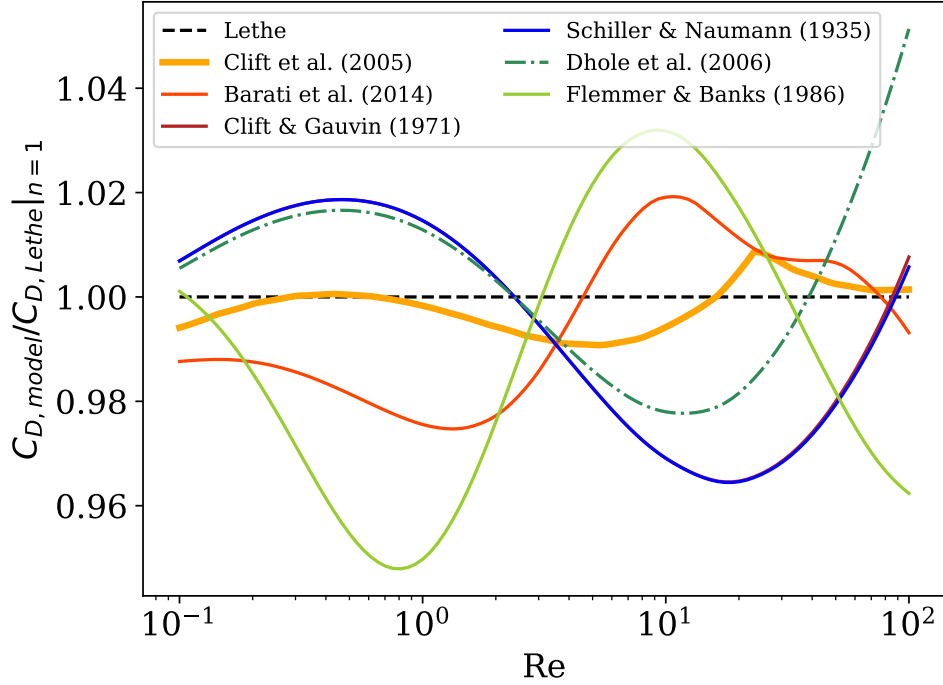


Figure 4.8 Comparison between drag coefficient models given in the literature and our results for  $\text{Re} \in [0.1, 100]$  at  $n = 1$  (the ideal ratio is  $C_D/C_{D,\text{Lethe}} = 1$ , in black) [1, 4–8]. The chosen model is Clift et al.’s, in yellow. The abrupt slope change in the yellow curve at  $\text{Re} \approx 23$  is due to the shift in the formulation at  $\text{Re} = 20$  (see equation (4.23)).

researchers also observed a quadratic pattern in the correction factor for the drag coefficient for creeping flow; indeed, it is found that  $C_D/C_{D,0}$  decreases for  $n < 0.4$ , as seen at the leftmost of Fig. 4.9 [56, 65].  $\beta(n)$  seems to increase as  $1 - n$  increases, and  $\text{Re}_i$  seems to linearly decrease as  $1 - n$  increases. The  $\mathcal{L}^2$  norm of the error on  $C_D/C_{D,0}$  is minimized when splitting the  $\text{Re}$  extent in two, as the curve pattern is slightly different on both sides. We choose a  $\text{Re}$  of 6 to split the domain.

$$\frac{C_D}{C_{D,0}}(n, \text{Re}) = \alpha(n) \tanh \left( \beta(n) \log_{10} \left( \frac{\text{Re}}{\text{Re}_i(n)} \right) \right) + 1 \quad (4.24)$$

$$\alpha(n) = \alpha_1(1 - n)^2 + \alpha_2(1 - n)$$

$$\beta(n) = \beta_1(1 - n) + \beta_2 \quad (4.25)$$

$$\text{Re}_i(n) = \text{Re}_{i,1}(1 - n) + \text{Re}_{i,2}$$

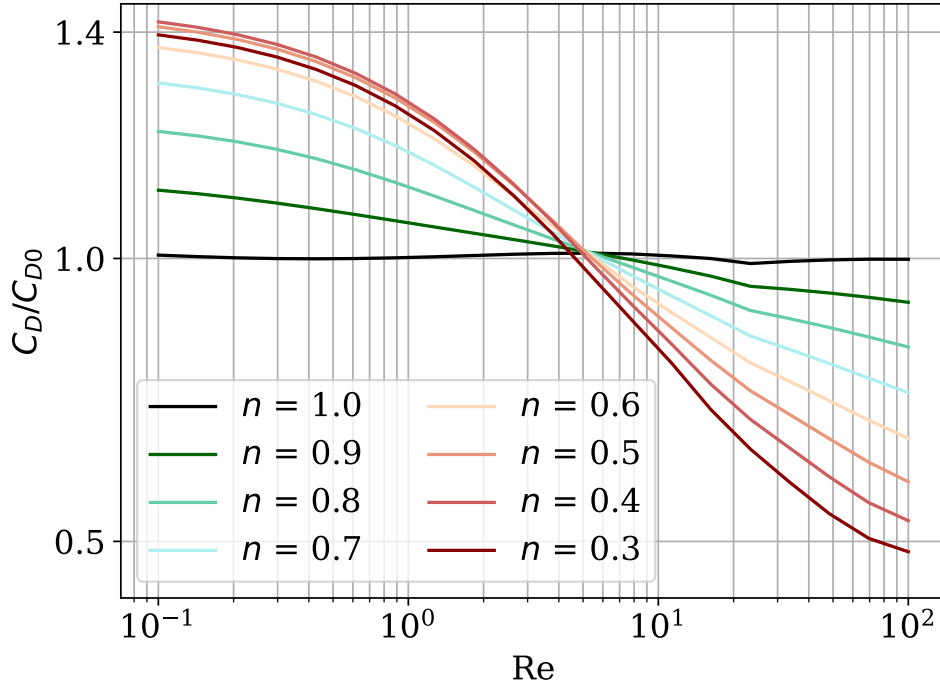


Figure 4.9 Simulation drag coefficient ratios ( $C_D/C_{D,0}$ ), with  $C_{D,0}$  defined in (4.23), for  $Re$  from 0.1 to 100 for all simulated  $n$  values using the power-law model. The subtle slope change at  $Re \approx 23$  is due to the formulation change in (4.23).

Values in Tab. 4.1 minimize the  $\mathcal{L}^2$  norm of the error for  $n \in [0.3, 0.9]$  while keeping a maximal error of 0.7% at the junction of each equation for  $Re = 6$ .

Fig. 4.10 portrays the numerical results of the drag coefficients along with the correlation given in equation (4.24). The average coefficient of determination for the suggested correlation on all  $n$  is  $R^2 = 0.998$ . The drag coefficients are compared to other numerical results in the literature [1, 2, 9–11]. We observe a very satisfying agreement with the previous article’s results.

Fig. 4.11a, 4.11b and 4.11c show flow patterns and streamlines close to the particle for Newtonian flow at  $Re = 0.1$ , 5.5 and 100, respectively. The subsequent figures show shear thinning flow patterns for  $n$  values of 0.7, 0.5 and 0.3.

We notice that, at  $Re = 0.1$ , there is no notable difference in the streamlines patterns between  $n$  values, but the velocity profile is narrower for lower  $n$ , meaning that the velocity around the particle will reach  $u_\infty$  more rapidly for lower  $n$ . For shear thinning flow, since there is a decrease in viscosity in high shear regions, namely close to the particle in this case, we observe a thinning of the boundary layer. The hypothesis made in section 4.5.1 in which

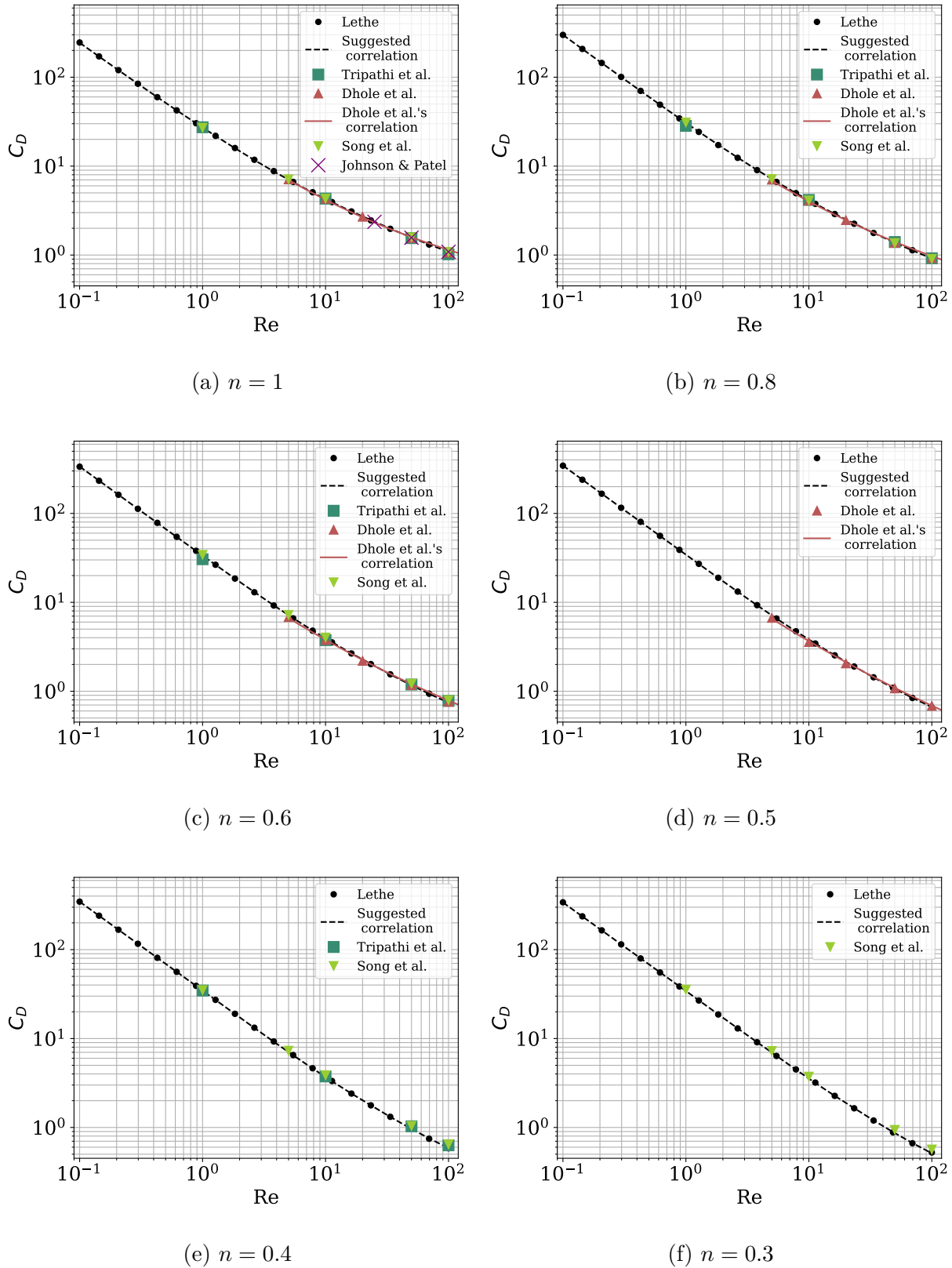


Figure 4.10 Calculated drag coefficients for power-law fluids from the Lethe simulations and the suggested correlation compared to results from Tripathi et al. [9], Dhole et al. [1] and Song et al. [2, 10]. Newtonian results ( $n = 1$  in (a)) are also compared to Johnson & Patel's [11].

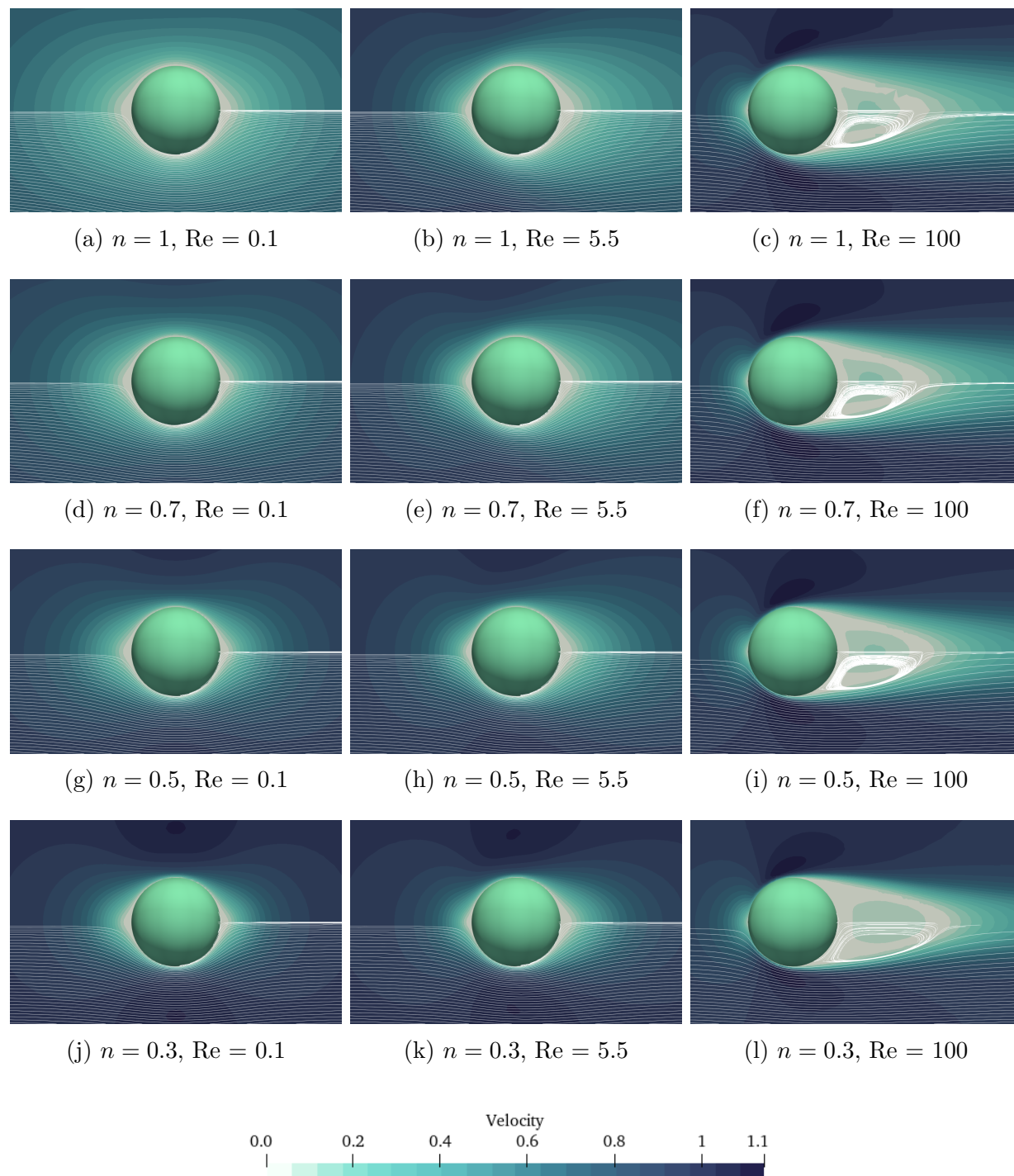


Figure 4.11  $xy$ -plane velocity profiles with streamlines (in white) around the spherical particle (in turquoise) for  $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$  and  $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$  using the power-law model.

Table 4.1 Values for correlation equation (4.25).

| Parameter  | $Re \leq 6$ | $Re \geq 6$ |
|------------|-------------|-------------|
| $\alpha_1$ | 1.56444     | 0.50762     |
| $\alpha_2$ | -1.67640    | -1.34469    |
| $\beta_1$  | 0.97094     | 0.25949     |
| $\beta_2$  | 0.45533     | 0.57677     |
| $Re_{i,1}$ | -3.14987    |             |
| $Re_{i,2}$ | 6.93023     |             |

we stated that the domain size analysis could be conducted for  $n = 1$  and extended to shear thinning flow is validated, as it seems that the most diffusion of momentum occurs for Newtonian fluids. Although the viscosity is lower close to the spherical particle for lower  $n$  values, results show that shear rates observed are greater (see Tab. 4.2), and that the viscous contribution to the drag does not noticeably change for  $Re \lesssim 5$ . We rather notice that, as  $n$  decreases, the upstream-downstream dimensionless pressure difference expands for  $Re = 0.1$  (see Tab. 4.3), and conclude that the increase of the pressure difference drives the increase on the drag. Indeed, Fig. 4.12 shows that the pressure drag contribution is proportionally larger as  $n$  decreases, and that is the case for the entire  $Re$  extent.

Table 4.2 Dimensionless maximal shear rate on the surface of the sphere for  $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$  and  $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$  using the power-law model.

|     | Maximal shear rate |            |            |
|-----|--------------------|------------|------------|
| $n$ | $Re = 0.1$         | $Re = 5.5$ | $Re = 100$ |
| 1   | 10.6               | 16.6       | 49.3       |
| 0.7 | 20.8               | 24.6       | 77.5       |
| 0.5 | 36.2               | 38.5       | 93.6       |
| 0.3 | 88.2               | 67.0       | 106.5      |

At  $Re = 5.5$ , all  $C_D/C_{D,0}$  drag coefficient results are similar regardless of  $n$  (see Fig. 4.9), but the velocity profiles are fairly different. It could mean that the slight gain in pressure drag (due to the increase of pressure difference (Tab. 4.3)) is counterbalanced by a drop in viscous drag. From the velocity profiles, no circumstance would explain the switch at  $Re = 5.5$ , in addition to the fact that all Reynolds numbers are *a priori* calculated, and hence are

Table 4.3 Dimensionless upstream-downstream pressure difference on the surface of the sphere for  $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$  and  $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$  using the power-law model.

|     | Upstream-downstream $\Delta P$ |                   |                   |
|-----|--------------------------------|-------------------|-------------------|
| $n$ | $\text{Re} = 0.1$              | $\text{Re} = 5.5$ | $\text{Re} = 100$ |
| 1   | 6.4e+01                        | 1.9e+00           | 8.5e-01           |
| 0.7 | 84e+01                         | 2.1e+00           | 8.5e-01           |
| 0.5 | 1.1e+02                        | 2.3e+00           | 8.5e-01           |
| 0.3 | 1.2e+02                        | 2.6e+00           | 8.9e-01           |

not necessarily the effective  $\text{Re}$ .

At  $\text{Re} = 100$ , the velocity profile upstream barely changes with  $n$ , whereas downstream, the tail seems to be narrower and longer when  $n$  lowers (see Tab. 4.4). As  $n$  decreases, the separation point is slightly moved upstream, and the wake is elongated. The enhancement of the tail results in more backflow towards the particle, which reduces the drag. In addition, we notice that the upstream-downstream pressure difference does not vary as  $n$  decreases, hence the pressure drag contribution does not vary. This can explain why, at  $\text{Re} \gtrsim 5$ , drag forces are lower as  $n$  decreases. To summarize, for  $\text{Re} \lesssim 5$ , the pressure drag increases as  $n$  decreases, and for  $\text{Re} \gtrsim 5$ , the viscous drag decreases as  $n$  decreases, but the pressure drag does not.

Wake lengths at  $\text{Re} = 100$  match those of Dhole et al. and Song et al., as can be seen in Tab. 4.4 [1, 2]. These results, along with comparisons shown in Fig. 4.10, lend credibility to the developed framework and the results in the present work for the power-law model.

Table 4.4 Comparison of the dimensionless wake length ( $L/D$ ) between present work values and values from the literature [1, 2] for power-law fluids.

|     | Wake length ( $L/D$ ) |                     |                    |
|-----|-----------------------|---------------------|--------------------|
| $n$ | Present work          | Dhole et al. (2006) | Song et al. (2009) |
| 1   | 0.867                 | 0.88                | 0.869              |
| 0.8 | 0.872                 | 0.87                | 0.871              |
| 0.6 | 0.908                 | 0.93                | 0.898              |
| 0.5 | 0.950                 | 0.96                | 0.924              |

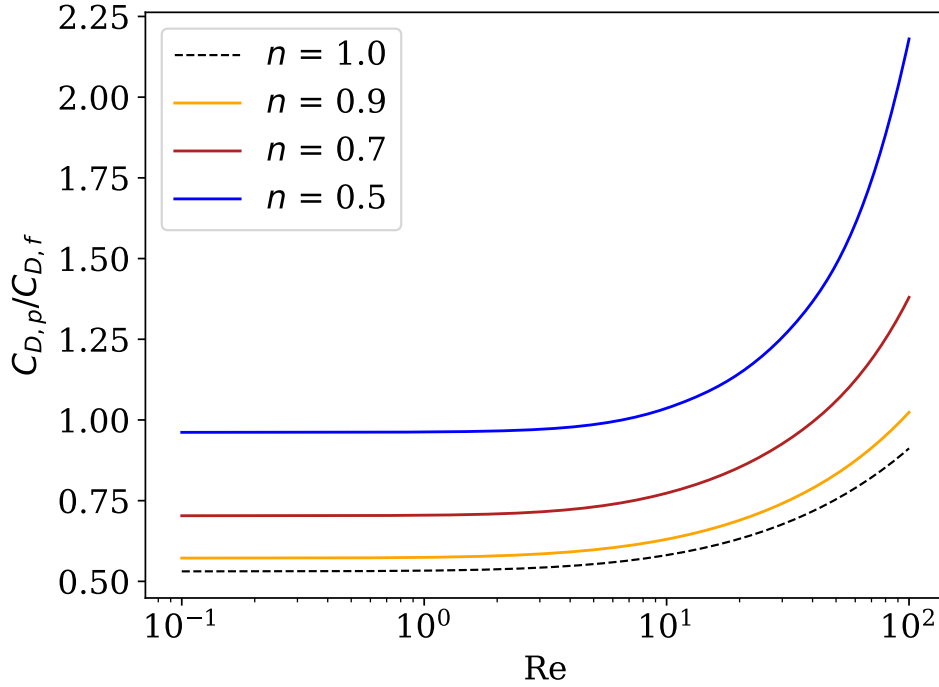


Figure 4.12 Evolution of the ratio between the pressure drag ( $C_{D,p}$ ) and the friction drag ( $C_{D,f}$ ) for  $n = \{1, 0.9, 0.7, 0.5\}$  when increasing the Reynolds number using the power-law model.

### Carreau simulation results

As mentioned above, power-law fluids are ill-posed in the zero-shear limit. Carreau fluids have a Newtonian plateau and have a well-defined viscosity at zero shear. For a low dimensionless relaxation time ( $\Lambda$ ) fluid, the transition from the plateau to the descending region (see Fig. 4.1) is delayed to high shear rates. Its behavior will resemble the Newtonian behavior. Higher  $\Lambda$  will result in a more power-law-like pattern while never fully reaching it since the shear rate becomes asymptotically zero as the distance from the sphere increases.

Carreau fluids drag coefficient results are shown in Fig. 4.13 for  $n$  values of 0.9, 0.7, 0.5 and 0.3, in which numerous relaxation times are portrayed and compared to power-law and Newtonian results.

For  $\Lambda = 0.1$ , the drag coefficients are relatively close to those for a Newtonian fluid for all  $n$ , as expected. As shown in Tab. 4.2, the maximal shear rate on the surface of the sphere essentially increases when  $Re$  increases. For  $Re \lesssim 5$ , the shear rate at the surface of the particle is relatively low, and for  $\Lambda \lesssim 1$ , the maximal shear rate is still smaller than the transitioning point in Fig. 4.1 (region 3). As  $Re$  increases, the shear rate close to the particle

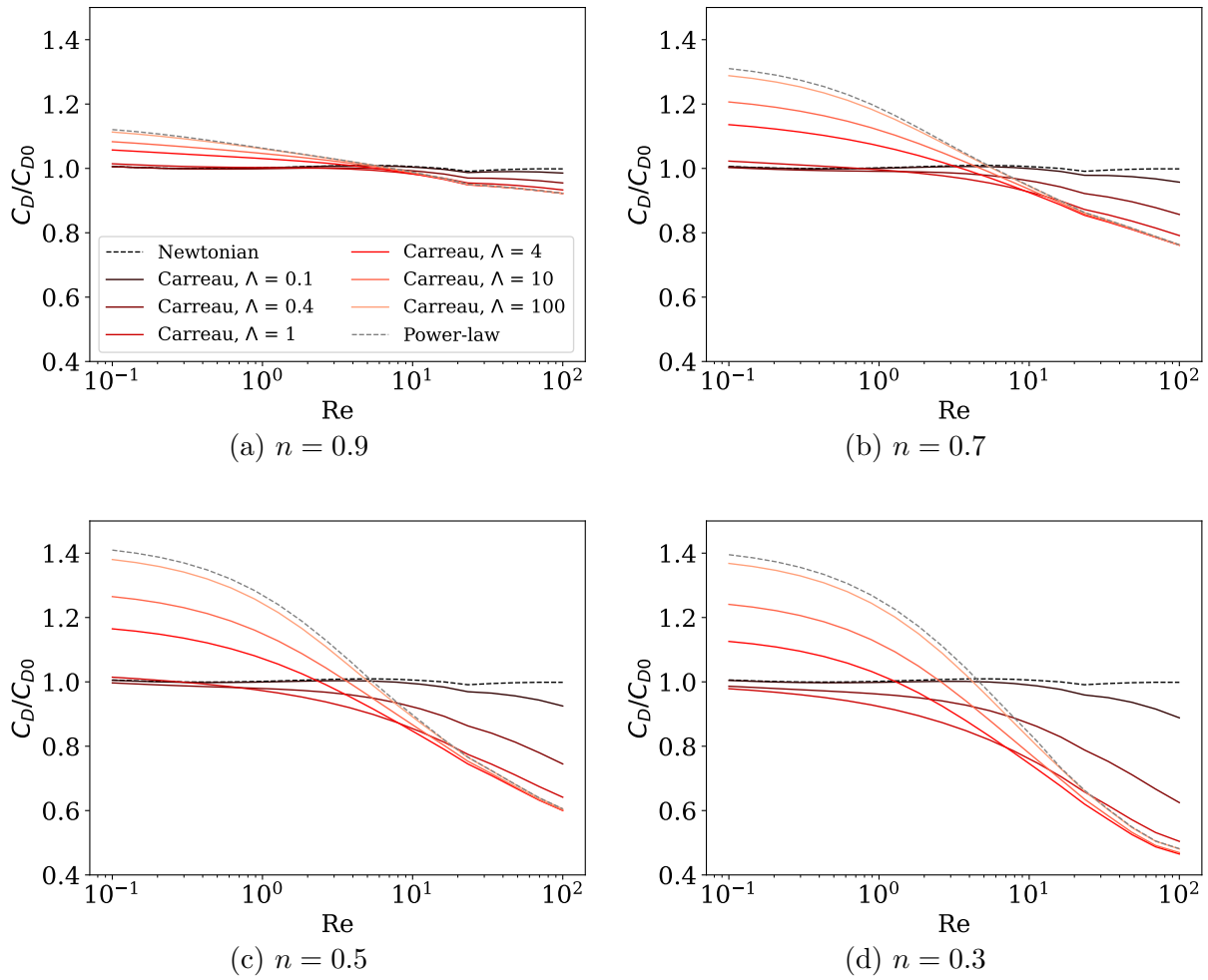


Figure 4.13 Simulation drag coefficient ratios ( $C_D/C_{D,0}$ ), with  $C_{D,0}$  defined in (4.23) for  $Re$  from 0.1 to 100 comparing Newtonian flow, power-law modeled flow and all Carreau modeled simulations for (a)  $n = 0.9$ , (b)  $n = 0.7$ , (c)  $n = 0.5$  and (d)  $n = 0.3$ .



becomes larger, reaching the critical shear rate, at which point the viscosity decreases. This loss of viscosity, in higher shear rate regions, reduces the drag. Hence, for  $\Lambda \lesssim 1$ , a notable difference between the drag given by a Newtonian simulation and a Carreau simulation will only occur at high Reynolds ( $\text{Re} \gtrsim 5$ ). There is therefore no significant change in the drag coefficient for ( $\text{Re} \lesssim 5$ ) up until  $\Lambda = 1$ .

Considering the given *a priori*  $\text{Re}$  definition (4.8), the *a priori* shear rate on the sphere is  $1 \text{ s}^{-1}$ . This coincides with the order of magnitude of  $\Lambda$  at which the shear rate on the surface of the sphere is larger than the critical shear rate, even for  $\text{Re} \lesssim 5$ . For  $\Lambda > 1$ , as the critical shear rate is lowered (see Fig. 4.1), the viscosity power-law region takes a more predominant scope, and the drag coefficient is more affected by its shear thinning behavior. We notice that for the highest value of  $\Lambda$ , the drag coefficient profile is very close to that of the power-law curve.

Surprisingly, the calculated drag coefficients for all Carreau fluids do not meet at  $C_D/C_{D,0} = 1$  close to  $\text{Re} = 5.5$  (see Fig. 4.13). In fact, regardless of  $n$ , the drag coefficients for Carreau fluids never exceed either the power-law prediction or the Newtonian prediction. Using a Carreau model does not greatly change the viscosity on the surface of the particle, but at a great distance from the surface, since the viscosity is capped, the flow pattern will inevitably change. When using the power-law model, the drop in viscosity close to the particle reduces the drag, but the very high viscosity far from the particle has an important effect on the drag. With the Carreau model, the upper limit on the viscosity reduces the drag. This may explain why, at  $\text{Re} \approx 5.5$ , the Carreau calculated drag coefficients are systematically lower. Indeed, Carreau fluids benefit from a viscosity reduction on the surface of the particle, without having the very high viscosity far from the particle that the power-law model generates.

Flow patterns and streamlines for  $n = 0.3$  with  $\Lambda = \{0.4, 4\}$  are shown in Fig. 4.14. In essence, for all pictured Reynolds numbers, the velocity profile has a pattern between the Newtonian flow and the power-law model flow for  $n = 0.3$ , respectively to their Reynolds number. The  $\Lambda = 0.4$  velocity pattern looks closer to the Newtonian one, and the  $\Lambda = 4$  resembles the power-law pattern. For  $\text{Re} = 0.1$  and  $\text{Re} = 5.5$ , we appreciate the forming of a thinner boundary layer for  $\Lambda = 4$ . For  $\text{Re} = 100$ , a much longer wake region for  $\Lambda = 4$  explains the large drop in the drag force observed in Fig. 4.13d.

As mentioned in the previous section, it is nearly impossible to draw further conclusions comparing the drag coefficients between  $\Lambda$  values at a consistent  $\text{Re}$ ; since all given  $\text{Re}$  are *a priori* estimations, they are inevitably not effective  $\text{Re}$ . In fact, many other researchers used a slightly different definition of  $\text{Re}$ , omitting the  $n$  and  $\Lambda$  values [12, 55, 57, 66].

Carreau results at  $\text{Re} = 0.1$  are compared to experimental drag coefficients presented by

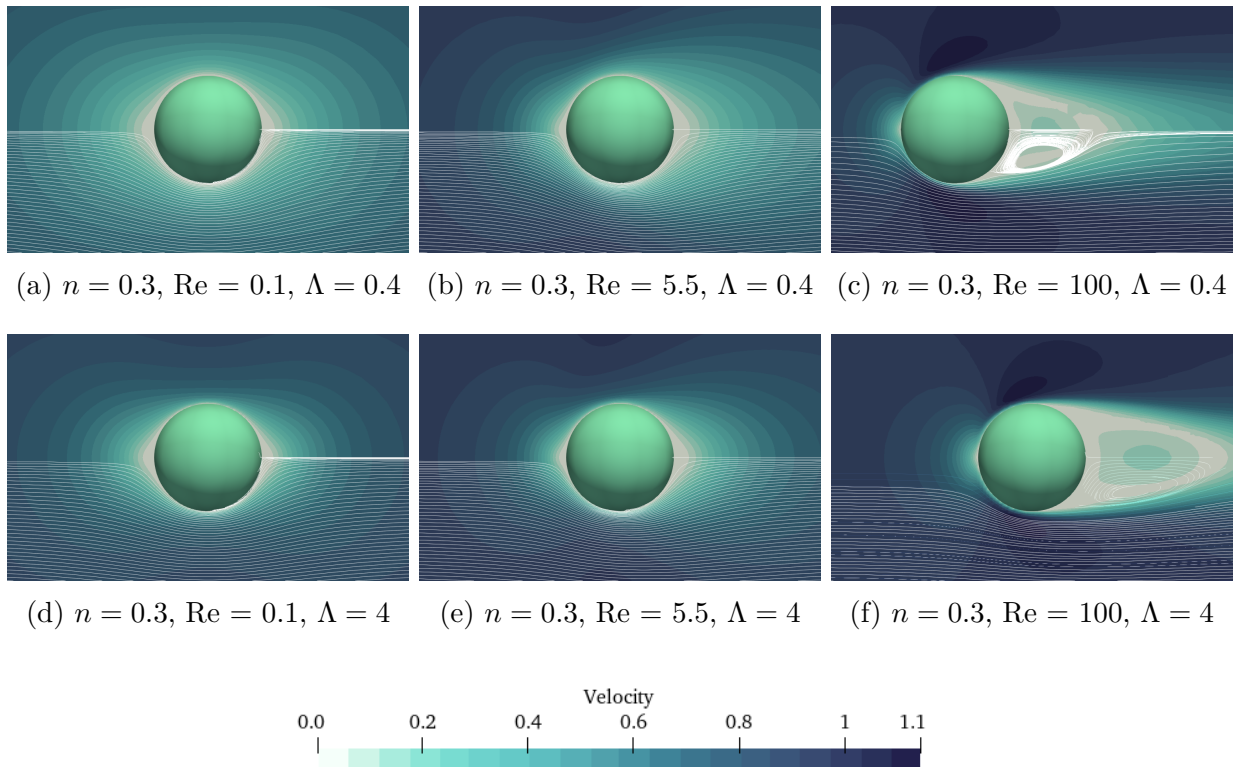


Figure 4.14  $xy$ -plane velocity profile with streamlines (in white) around spherical particle (in turquoise) for  $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$  and  $n = 0.3$  using the Carreau model with  $\Lambda = \{0.4, 4\}$ .

Chhabra & Uhlherr in the creeping flow regime [12]. The fluids used in Chhabra & Uhlherr’s work are chosen to have the least elastic properties, to best suit the Carreau model that treats inelastic fluids. The article presents results in the fashion of a correction factor to the drag coefficient predicted for Newtonian flow, where  $C_{D,0} = 24/\text{Re}$  and the shear-thinning drag coefficient, in creeping flow, being  $C_D = XC_{D,0}$ . Chhabra & Uhlherr defined their Reynolds as  $\text{Re} = \rho u_\infty D/\eta_0$ , that is slightly different from equation (4.8). The present work’s Reynolds numbers are adapted to their definition to compare the correction factors appropriately. Since  $((1+\Lambda)^2)^{\frac{n-1}{2}}$  of equation (4.8) is lesser than 1 for shear thinning flow, the newly calculated Re numbers for Lethe simulations are all less than 0.1. We are, therefore, well into the creeping flow regime. Their dimensionless relaxation times are also corrected, as they used a different definition ( $2\lambda u_\infty D^{-1}$ ). Therefore, their  $\Lambda$  are divided by 2 to match equation (4.22).

The correction factors as a function of the dimensionless relaxation time are presented in Fig. 4.15. As expected, upon decreasing  $\Lambda$ ,  $X$  reaches 1 as the behavior of the fluid approaches the Newtonian behavior. The drag coefficient decreases as  $\Lambda$  increases; this was also observed by Hsu et al. [57]. Experimental results are shown for  $n = \{0.75, 0.53\}$ , indicating excellent agreement with the numerical results. This validation case lends further credibility to the proposed non-Newtonian framework.

Drag coefficients for Newtonian, power-law and Carreau simulations are available [67].

## 4.6 Conclusion

This work presents a stabilized finite element solver extension of Lethe that enables high-order simulations of power-law and Carreau fluids. The implementation is verified using the Method of Manufactured Solutions. We perform an extensive study of shear thinning flow past a sphere. Results for an *a priori* Reynolds range of 0.1 to 100 and  $n \in [0.3, 1.0]$  are shown, using both the power-law model and the Carreau model. For the Carreau model, dimensionless relaxation times of  $\Lambda = \{0.1, 0.4, 1, 4, 10, 100\}$  are studied. All calculated drag coefficients are available in a public repository. For shear thinning flow past a sphere a reduction in  $n$  has the following effects:

- The total drag increases for  $\text{Re} < 5$  to 6;
- The total drag decreases for  $\text{Re} > 5$  to 6;
- The wake is longer for high Re;
- The separation point is moved upstream for high Re; and
- There is the development of a thinner boundary layer, regardless of Re.

Additionally, as Re increases,  $C_D/C_{D,0}$  systematically decreases for  $\text{Re} \in [0.1, 100]$ , regardless of the relaxation time. Drag coefficient results using the power-law model are compared to

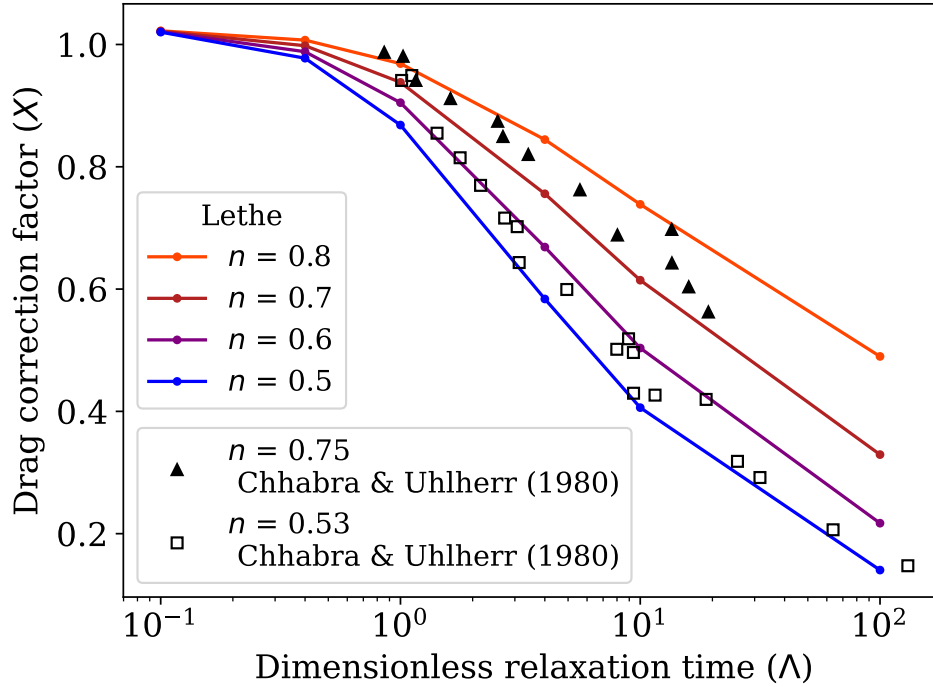


Figure 4.15 Drag coefficient correction factors ( $X$  in  $C_D = \frac{24}{Re} X$ ) at  $Re = 0.1$  simulated in Lethe using the Carreau model as a function of the dimensionless relaxation time  $\Lambda$ , compared to experimental data provided by Chhabra & Uhlherr [12] in the creeping flow regime.

numerical results in the literature and show good agreement. We propose a correlation for the drag coefficient of power-law fluids compared to Newtonian fluids. The correlation is particularly well-posed, we obtain a coefficient of determination  $R^2 = 0.998$ . It is observed that a logarithmic spacing between the Reynolds numbers used for the simulations greatly helped in generating a formulation that evenly minimized the error over the  $Re$  extent, as the behavior of  $C_D$  is  $\log(Re)$ -dependent. The authors believe this correlation can be further extended to lower  $n$  values because of the hyperbolic tangent behavior of the correction.

For flow-past-a-sphere cases, using a Carreau model with an appropriate maximal viscosity will significantly impact the velocity profile and the calculated drag force. Considering an *a priori* Reynolds number, power-law and Newtonian simulations predictions will not necessarily bound the drag coefficient of a shear thinning fluid past a sphere. This non-intuitive behavior is explained by the significant decrease of the viscosity far from the sphere which greatly increases the viscosity of power-law fluids.

## 4.7 Acknowledgements

The authors of this article would like to warmly thank the `deall.II` community for their volunteer support. Carole-Anne Daunais is grateful for financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) through CSG Masters awards, and from the Quebec Research Fund Nature and Technology (QRFNT) through *Bourse de formation à la maîtrise*. Bruno Blais would like to acknowledge the financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) [RGPIN-2020-04510 Discovery Grant]. The authors would also like to acknowledge technical support and computing time provided by Digital Alliance Canada and Calcul Québec. Simulated cases shown in this work were made on the supercomputers Narval, Niagara and Beluga managed by Digital Alliance Canada and Calcul Québec.

## CHAPITRE 5 DÉVELOPPEMENT DE MÉTHODES D'ORDRE ÉLEVÉ POUR DES ÉCOULEMENTS NON-NEWTONIENS : APPLICATION AUX ÉCOULEMENTS AUTOUR D'UNE SPHÈRE

Cette section portera sur le contenu du projet de maîtrise qui n'a pas été discuté dans l'article du chapitre précédent, ou dont l'étendue n'a pas été complètement dépeinte. La formulation en éléments finis pour les écoulements non-newtoniens sera abordée dans cette section. Un retour exhaustif sur la vérification de code sera fait, pour compléter le contenu de la section 4.4. Les profils de viscosité obtenus seront montrés et discutés. La plage de valeurs de  $n$  traitée dans l'article I sera justifiée. Finalement, un retour sur le choix de schémas d'ordre élevé pour les simulations d'écoulement autour d'une sphère sera effectué.

### 5.1 Formulation faible

La formulation faible pour les écoulements newtoniens a été dépeinte dans la revue de littérature. L'équation (2.34) est la forme faible (intégrée par partie) du système d'équations (2.32). En (2.32), on a sorti  $\eta$  de l'intégrale puisqu'elle ne varie pas à l'intérieur de  $\Omega$ , ce qui n'est pas le cas pour les écoulements non-newtoniens. Or, la formulation faible de (2.34) ne vaut plus, il faut la redéfinir.

D'une part, à chaque itération du solveur non-linéaire, il faut recalculer la viscosité à chaque point de quadrature (voir figure 2.10). Cette viscosité dynamique calculée avec le modèle rhéologique choisi est considérée pour l'assemblage du résidu :

$$\begin{aligned} \mathcal{R} = & \int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega + \int_{\Omega} v_k (\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} p (\partial_k v_k) d\Omega + \int_{\Omega} \eta (\partial_l u_k + \partial_k u_l) (\partial_l v_k) d\Omega \end{aligned} \quad (5.1)$$

où on conserve  $\eta$  à l'intérieur de l'intégrale. Pour ce qui est du jacobien des NSI, où on dérive la forme faible par rapport à  $u_k$  et  $p$ , on obtient inévitablement un terme supplémentaire dû au fait que  $\eta = f(|\underline{\dot{\gamma}}|)$  (et cette fonction est dictée par le modèle rhéologique). Rappel :  $|\underline{\dot{\gamma}}|$  et  $\dot{\gamma}$  sont équivalentes et représentent la norme du tenseur du taux de cisaillement ; j'utiliserai  $\dot{\gamma}$  pour alléger le texte. En développant au long le jacobien de la forme faible du terme de tenseur des contraintes visqueuses, on a que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_k} \int_{\Omega} \eta (\partial_l u_k + \partial_k u_l) (\partial_l v_k) \, d\Omega &= \int_{\Omega} \eta \cdot \frac{\partial}{\partial u_k} \left[ (\partial_l u_k + \partial_k u_l) (\partial_l v_k) \right] \, d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\partial \eta}{\partial u_k} \cdot \left[ (\partial_l u_k + \partial_k u_l) (\partial_l v_k) \right] \, d\Omega \end{aligned} \quad (5.2)$$

où, par emploi d'une dérivée en chaîne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta}{\partial u_k} &= \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial u_k} \\ &= \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial}{\partial u_k} \left[ \left( \frac{\dot{\gamma} : \dot{\gamma}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\ &= \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \left( \frac{1}{2} \right) \left( \frac{\dot{\gamma} : \dot{\gamma}}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2} \right) \frac{\partial}{\partial u_k} (\dot{\gamma} : \dot{\gamma}) \\ &= \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \left( \frac{1}{2} \right) (\dot{\gamma}^{-1}) \left( \frac{1}{2} \right) \frac{\partial}{\partial u_k} (\dot{\gamma} : \dot{\gamma}) \\ &= \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \left( \frac{1}{2} \right) (\dot{\gamma}^{-1}) \left( \frac{1}{2} \right) (2) \dot{\gamma} \cdot \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial u_k} \end{aligned} \quad (5.3)$$

L'opération de l'avant-dernière ligne à la dernière ligne est possible puisque  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}^T$ . Le terme  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  est un scalaire dépendant du modèle rhéologique et facilement dérivable. En employant une approche similaire à celle présentée dans la revue de littérature (section 2.4.1), on a pour jacobien :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \int_{\Omega} q \partial_l \phi_{l,j} \, d\Omega + \int_{\Omega} v_k (\partial_t \phi_{k,j} + \phi_{l,j} \partial_l u_k + u_l \partial_l \phi_{k,j}) \, d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \psi_j (\partial_k v_k) \, d\Omega + \int_{\Omega} \eta (\partial_l \phi_{k,j} + \partial_k \phi_{l,j}) (\partial_l v_k) \, d\Omega \\ &+ \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{2\dot{\gamma}} \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \left( (\partial_k u_l + \partial_l u_k) \cdot (\partial_l \phi_{k,j} + \partial_k \phi_{l,j}) \right) \left[ (\partial_l u_k + \partial_k u_l) (\partial_l v_k) \right] \, d\Omega}_{\text{Terme ajouté}} \end{aligned} \quad (5.4)$$

avec  $j$  les nœuds de la cellule. L'intégrale sur  $\Omega$  est faite de la même façon que celle présentée dans la revue de littérature, avec la méthode de Gauss-Legendre (équation 2.44). À chaque itération de Newton-Raphson, il faut assembler le tenseur du taux de cisaillement, calculer la norme de ce tenseur et calculer  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  à chaque point de quadrature de Gauss. On a donc une double non-linéarité : celle qui vient du terme d'advection, et une seconde liée au terme

ajouté de l'équation (5.4). Le solveur non-newtonien est forcément plus couteux à assembler, le système à résoudre est plus rigide ; il converge moins rapidement vers un profil de vitesse et de pression.

Pour le solveur GLS, des termes de stabilisation sont ajoutés, tel que montrés à la section 4.3.2 de l'article I.

## 5.2 Solveur Grad-Div non stabilisé

On a vu que la méthode GLS avec des termes de stabilisation SUPG (streamline-upwind/Petrov-Galerkin) et PSPG (pressure-stabilizing/Petrov-Galerkin) permettait de pallier le problème engendré par le bloc  $\mathbf{0}$  du jacobien, tel qu'introduit à la section 3.2. Une autre méthode implémentée dans Lethe pour éviter ce problème est l'ajout d'un terme de pénalisation Grad-Div, exploitant le complément de Schur comme préconditionneur [68] (voir [69] pour plus de détails sur la méthode). La formulation faible pour le solveur GD doit être ajustée de la même façon que pour le solveur GLS (équations (5.1) et (5.4)). Le solveur Grad-Div non-newtonien n'a pas été utilisé pour générer les résultats présentés dans l'article. L'implémentation de code est vérifiée pour les deux modèles rhéologiques ; seuls les résultats utilisant le solveur GLS sont montrés à la section 5.3. Les résultats de vérification de code pour le solveur GD sont montrés à l'annexe A.

## 5.3 Vérification de code

Pour la vérification de code, la Méthode des Solutions Manufacturées (MMS) est utilisée. Sont présentés dans la section 4.4 de l'article I les résultats de l'analyse de convergence de l'erreur sur la vitesse d'une MMS en 2-dimensions utilisant le modèle de Carreau. La solution exacte choisie pour la vitesse et la pression  $y$  est présentée (équation (4.20)). Dans cette section, on verra l'analyse de convergence de l'erreur pour les profils de vitesse et de pression pour les deux modèles rhéologiques, avec le solveur GLS. La vérification de code pour le solveur GD est montrée à l'annexe A.

### 5.3.1 Modèle de Carreau

Rappelons que la MMS proposée présente une étendue de taux de cisaillement telle que  $\dot{\gamma} \in [0, \pi]$ . Pour les paramètres de Carreau proposés à la section 4.4, l'expression de la viscosité est la suivante :

$$\eta = (1 + \dot{\gamma}^2)^{-0.25} \quad (5.5)$$



ce qui implique que la viscosité se situe dans l'intervalle  $\eta \in [0.55, 1.0]$ . Les profils de vitesse et de viscosité sont présentés à la figure 5.1.

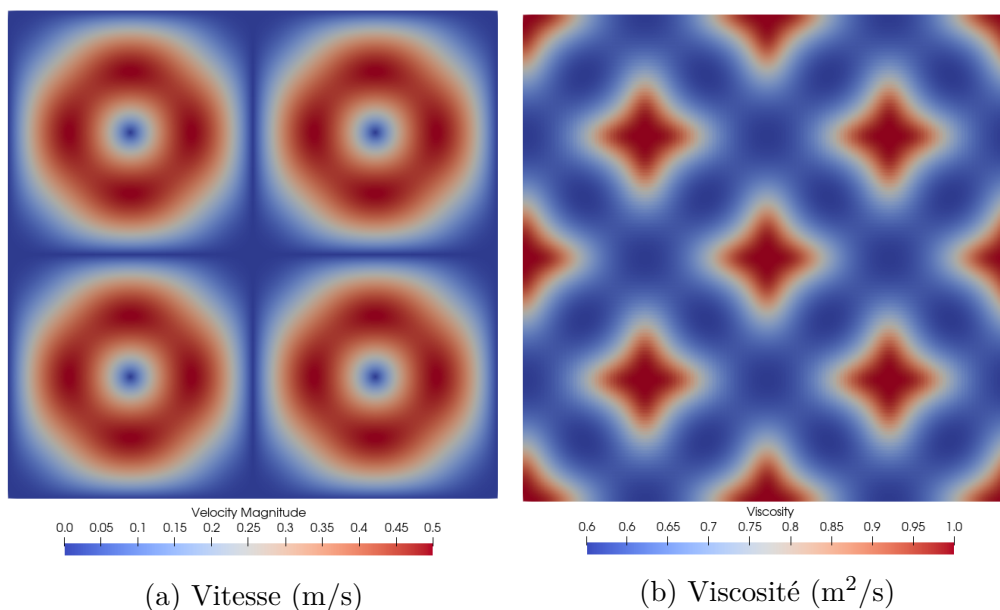


FIGURE 5.1 Profil de l'amplitude de la vitesse et de la viscosité avec le modèle de Carreau.

Les analyses de convergence de l'erreur sur la solution pour la vitesse et la pression sont présentées à la figure 5.2. Dans le cadre d'une vérification de code, on cherche à connaître l'ordre de convergence de l'erreur, c'est-à-dire, à quelle vitesse, ou à quel ordre, l'erreur sur la solution exacte diminue, en réduisant la taille des cellules d'un facteur 2. Autrement dit, plus le maillage initial est grossier, plus l'erreur sur la solution est grande. À mesure que le maillage est raffiné, en coupant les cellules en quatre sous-cellules, l'erreur sur la solution diminue toujours. En employant des éléments d'interpolation d'ordre 1, l'erreur devrait être quatre fois plus petite, ou  $2^2$  fois plus petite, à chaque raffinement uniforme du maillage. Pour des éléments d'interpolation d'ordre 2, l'erreur devrait être huit ( $2^3$ ) fois plus petite à chaque raffinement du maillage. L'ordre de convergence théorique de l'erreur sur la vitesse est donc  $p = m + 1$ , avec  $m$  l'ordre des polynômes d'interpolation pour la vitesse [35]. C'est bien ce qu'on retrouve à la figure 5.2a, en plus d'observer une diminution de l'erreur, pour un même maillage, en augmentant l'ordre.

L'ordre de convergence théorique de l'erreur sur la pression est  $p = m$ , avec  $m$  l'ordre des polynômes d'interpolation pour la vitesse, si et seulement si l'écart entre le degré des polynômes de vitesse et de pression est d'au plus 1 [70]. Autrement dit, pour des éléments Q3Q2 et Q3Q3, l'erreur sur la pression converge à l'ordre 3, mais pour des éléments Q3Q1, l'erreur sur la pression converge à l'ordre 2. C'est ce que l'on constate à la figure 5.2b, où l'ordre de

convergence de la pression est fonction de l'ordre des éléments pour la vitesse, alors que la norme de l'erreur diffère légèrement en fonction de l'ordre des polynômes de pression. On remarque aussi que l'ordre de convergence de l'erreur sur la pression est de 1.64 pour les éléments Q1Q1, et c'est ce qui est attendu. En effet, l'ordre de convergence varie généralement entre 1.5 et 1.9 pour des éléments Q1Q1, et dépend du régime d'écoulement (pour les écoulements purement visqueux, l'ordre théorique de convergence de l'erreur est  $\phi \approx 1.618$ , soit le nombre d'or). L'atteinte de la région asymptotique est retardée (à des maillages plus fins) pour les éléments Q1Q1.

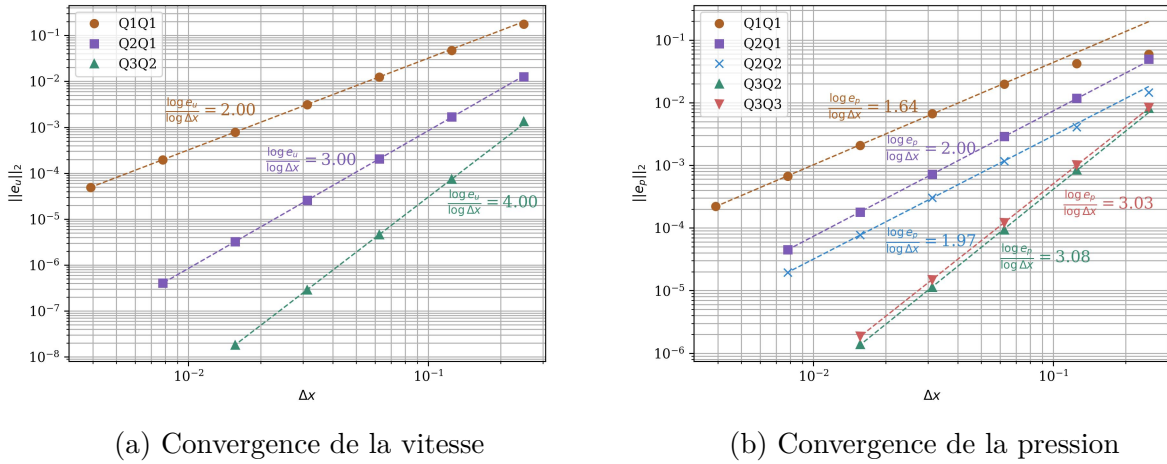


FIGURE 5.2 Évolution de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur sur la (a) vitesse et sur la (b) pression pour différentes combinaisons de polynômes d'interpolation vitesse-pression, en considérant un raffinement de maillage global.

### 5.3.2 Modèle de loi de puissance

La vérification du modèle de loi de puissance n'a pas été discutée dans l'article I. Posons les paramètres du modèle  $K = 1$  et  $n = 0.5$  (voir modèle de la loi de puissance à la section 2.2.2). L'équation pour la viscosité dynamique est :

$$\eta = \dot{\gamma}^{-0.5} \quad (5.6)$$

Avec une plage de taux de cisaillement  $\dot{\gamma} \in [0, \pi]$ , on a que, théoriquement,  $\eta \in [0.56, +\infty[$ . Comme ce n'est pas numériquement possible de résoudre un écoulement où la viscosité est infinie, on impose une viscosité maximale par l'imposition d'un taux de cisaillement minimal (introduit à la section 4.3.2). Le terme source ajouté aux équations différentielles (4.20) ne tient cependant pas compte de la contrainte dure imposée sur la viscosité. Il s'agit donc de

faire un compromis en posant un  $\dot{\gamma}_{\min}$  qui rende la solution numériquement résolvable, en altérant le moins possible la solution pour limiter l'erreur résiduelle (qui persiste en raffinant le maillage). En posant  $\dot{\gamma}_{\min} = 10^{-4}$ , la plage de viscosité devient  $\eta \in [0.56, 100]$ . Le profil de vitesse et le profil de viscosité sont montrés à la figure 5.3.

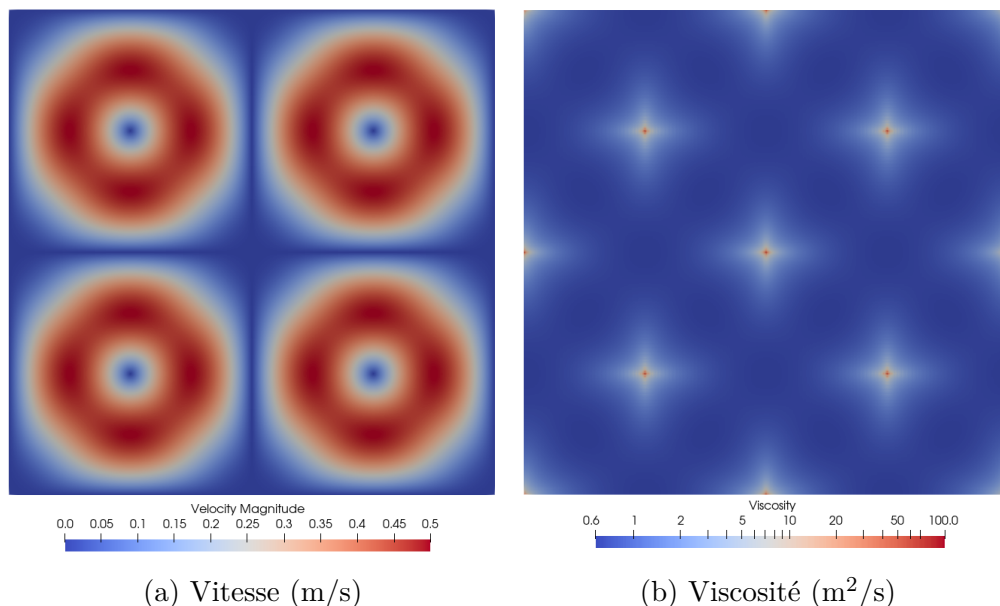
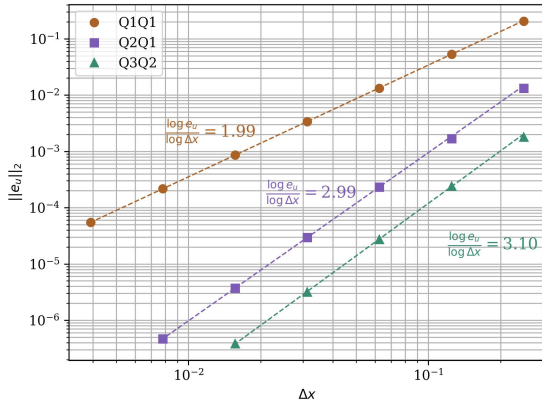


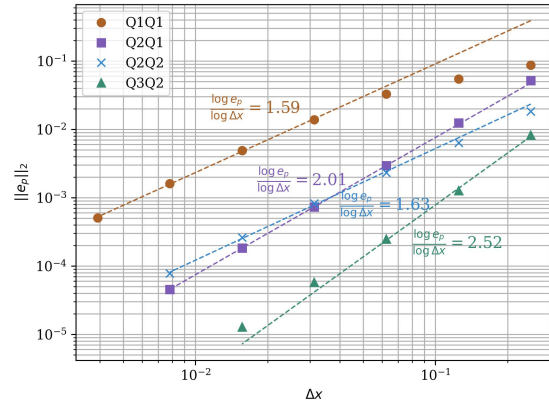
FIGURE 5.3 Profil de l'amplitude de la vitesse et de la viscosité avec le modèle de loi de puissance.

Les ordres de convergence de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur sur la vitesse sont tels qu'attendu pour les éléments Q1Q1 et Q2Q1, alors que pour les polynômes cubiques en vitesse, l'ordre théorique de 4 n'est pas atteint (figure 5.4a). Pour la pression, l'ordre de convergence pour les éléments Q2Q2 et Q3Q2 est légèrement en deçà des ordres attendus. Pour les éléments Q3Q2, on remarque que l'erreur diminue moins rapidement pour les maillages les plus fins : ceci peut être dû à l'erreur résiduelle sur le terme source, qui se manifeste aux ordres élevés.

Ce qui est à retenir de cette vérification de code, c'est que l'analyse de convergence de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur avec le modèle de Carreau montre que l'implémentation logicielle du schéma mathématique est adéquate. En effet, du cas avec le modèle de Carreau en 5.3.1 au cas avec le modèle de loi de puissance en 5.3.2, l'architecture du solveur est inchangée, seul les termes  $\eta$  et  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$  varient d'un modèle rhéologique à l'autre. Comme les ordres de convergence obtenus avec le modèle de Carreau sont tels qu'attendus, on conclut que les écarts observés pour le modèle de loi de puissance sont dus aux limitations du modèle. Il est à noter que ce problème n'a rien à voir avec la non-plausibilité de la solution, puisque la méthode de solutions manufacturées ne requière pas la plausibilité physique de la solution [60].



(a) Convergence de la vitesse



(b) Convergence de la pression

FIGURE 5.4 Évolution de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur sur la (a) vitesse et sur la (b) pression pour différentes combinaisons de polynômes d'interpolation vitesse-pression, en considérant un raffinement de maillage global.

Dans la prochaine section, on verra une comparaison qualitative entre les coefficients de traînée tirés des simulations sur Lethe et certains résultats de la littérature.

## 5.4 Quelques exemples de profils de viscosité

Sont présentés dans cette section quelques exemples de profils de viscosité autour de la particule sphérique, en comparant les résultats du modèle de loi de puissance au modèle de Carreau. La figure 5.5 montre les profils de viscosité calculés pour le modèle de loi de puissance, avec  $Re = \{0.1, 100\}$  et  $n = \{0.9, 0.3\}$ . À  $Re = 0.1$ , le taux de cisaillement minimal imposé au modèle est  $\dot{\gamma}_{\min} = 10^{-4}$ , et pour les simulations à  $Re = 100$ ,  $\dot{\gamma}_{\min} = 10^{-2}$  (le choix d'un  $\dot{\gamma}_{\min}$  différent pour les deux  $Re$  est discuté dans la section 4.5.1).

Tel que montré à la figure 4.11 de l'article I, plus l'écoulement est rhéofluidifiant (plus  $n$  diminue), plus mince est la couche limite. En diminuant  $n$ , la diminution du taux de cisaillement est plus rapide en région proche de la sphère. C'est effectivement ce que l'on remarque aux figures 5.5a et 5.5c. En effet, à  $n = 0.9$ , dans l'encadré centré sur la particule, on n'a pas encore atteint  $\dot{\gamma}_{\min}$ , et ainsi, la viscosité maximale  $\eta = 25.1$  n'est pas atteinte. À  $n = 0.3$ , l'ellipse de viscosité autour de la sphère est artificiellement formé par  $\dot{\gamma}_{\min}$ .

Les figures 5.5b et 5.5d montrent les profils de viscosité à  $Re = 100$ , pour des valeurs de  $n$  et 0.9 et 0.3 respectivement. Les profils sont semblables ; à haut Reynolds, la viscosité varie rapidement proche de la sphère et le profil de viscosité n'est plus symétrique.

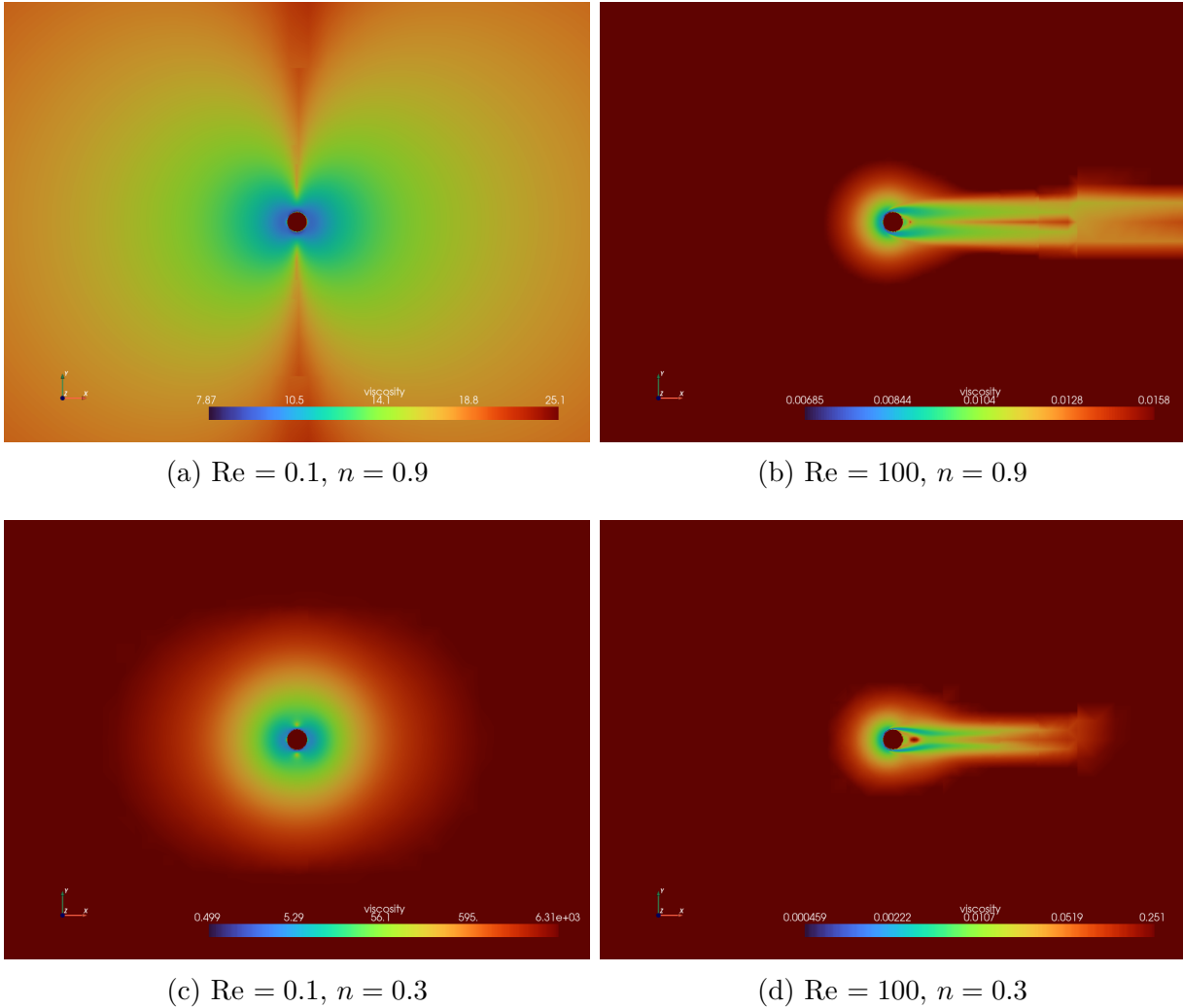


FIGURE 5.5 Profil de viscosité dans le plan  $xy$  près de la sphère pour plusieurs  $Re$  et  $n$  pour le modèle de loi de puissance.

La figure 5.6 présente les profils de viscosité pour les mêmes  $n$  et  $Re$  *a priori*, avec un temps de relaxation adimensionnel  $\Lambda = 4$ . Avec le modèle de Carreau, la viscosité est bornée naturellement par  $\eta_0$ . On observe une progression graduelle de la viscosité jusqu'à l'atteinte de  $\eta_0$ , ce qui n'est pas le cas à la figure 5.5.

En général, la viscosité proche de la sphère est comparable entre les deux modèles rhéologiques, pour les mêmes  $Re$  et  $n$ , tel qu'en témoignent les échelles de viscosité sur les figures. La différence entre les profils de viscosité réside loin de la sphère. Pour  $n = 0.9$ , comme la pente de viscosité est faible (voir région 2 de la figure 2.3), le choix de  $\dot{\gamma}_{\min}$  n'a pas de répercussion significative sur la viscosité maximale atteinte. Pour  $n = 0.3$ , la pente de viscosité (figure 2.3) est plus abrupte ;  $\dot{\gamma}_{\min}$  a un impact notable sur  $\eta_{\max}$ .

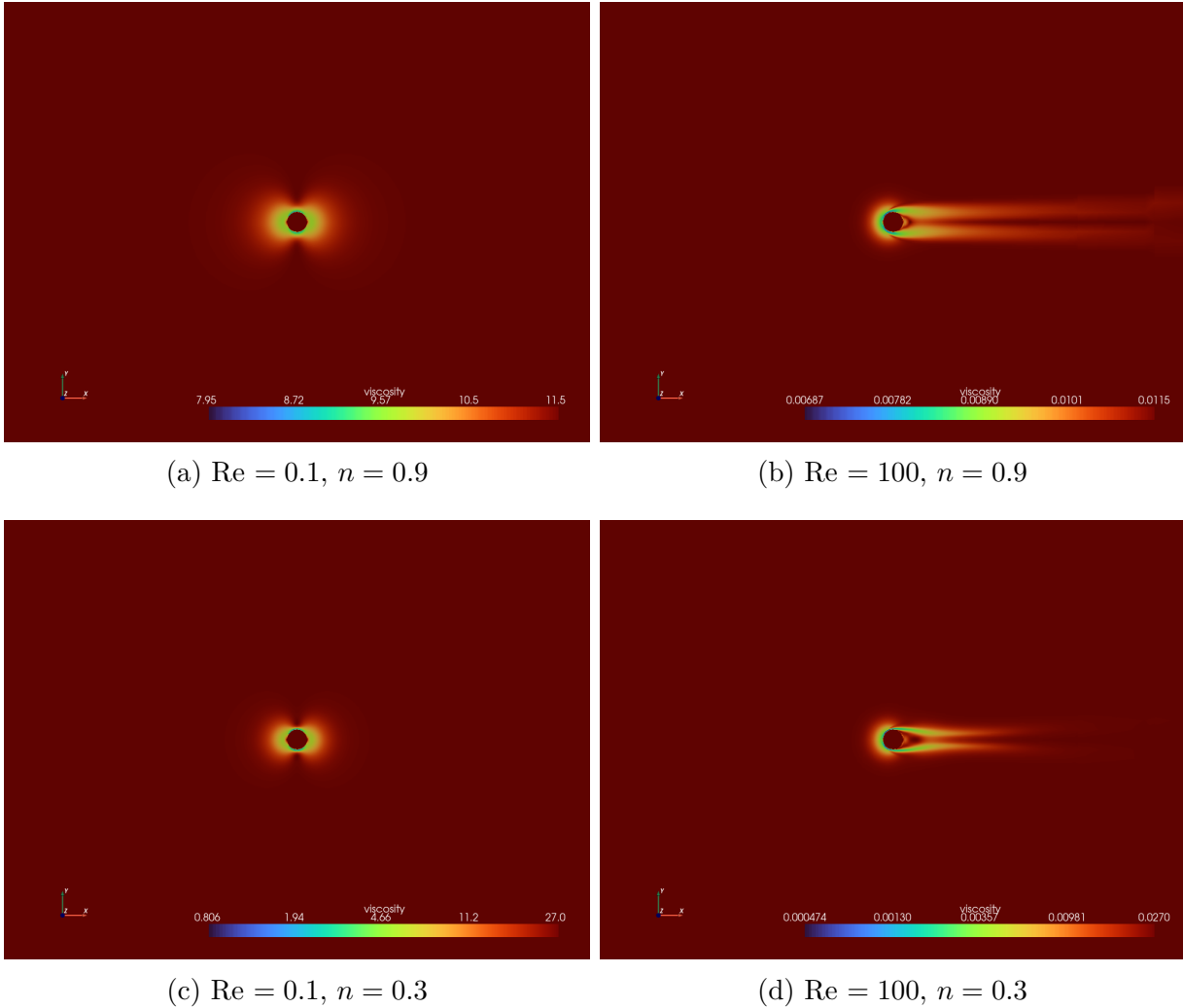


FIGURE 5.6 Profil de viscosité dans le plan  $xy$  près de la sphère pour plusieurs  $Re$  et  $n$  pour le modèle de Carreau, avec  $\Lambda = 4$ .

C'est ce qu'on constate au tableau 5.1 qui présente, pour chacun de ces exemples, le ratios entre la viscosité maximale rencontrée dans le domaine de calcul et la viscosité minimale en région près de la sphère. Pour les simulations à  $n = 0.9$ , les ratio de viscosités conservent le même ordre de grandeur, tous Reynolds confondus. Pour  $n = 0.3$ , à  $Re = 0.1$ , la viscosité loin de la sphère est plus de 10 000 fois plus élevée qu'en proche sphère pour le fluide de loi de puissance. Le ratio est bien plus faible pour  $Re = 100$ ; c'est grâce au  $\dot{\gamma}_{\min}$  plus grand.

Les résultats du tableau 5.1 illustrent bien le cœur de la problématique numérique concernant les fluides de loi de puissance. Chaque ligne du système matriciel, composé du jacobien présenté dans la section 5.1 (équation (5.4)), représente un DOF. Pour chacun de ces DOF, la viscosité ( $\eta$ ) varie d'un facteur  $10^4$ . Ainsi, il y a une grande variabilité de l'ordre de grandeur

TABLEAU 5.1 Exemples de ratio entre la viscosité la plus élevée du domaine de calcul ( $\eta_{\max}$ ) et la viscosité à la surface de la sphère ( $\eta_{\min}$ ) pour les fluides de la loi de puissance et de Carreau pour un temps de relaxation adimensionnel  $\Lambda = 4$ .

|                           |     | Re = 0.1          | Re = 100                  |
|---------------------------|-----|-------------------|---------------------------|
|                           |     | $n$               | $\eta_{\max}/\eta_{\min}$ |
| Loi de puissance          | 0.9 | 3.2               | 2.3                       |
|                           | 0.3 | $1.3 \times 10^4$ | $5.5 \times 10^2$         |
| Carreau ( $\Lambda = 4$ ) | 0.9 | 1.4               | 1.7                       |
|                           | 0.3 | $3.3 \times 10^1$ | $5.7 \times 10^1$         |

d'une ligne de la matrice à une autre. Les termes sur la diagonale de la matrice sont d'ordres de grandeur complètement distincts, ce qui rend difficile la génération du préconditionneur de GMRES utilisé pour accélérer le solveur (cet aspect sera abordé à la section 5.5). C'est l'une des raisons pour laquelle l'atteinte d'une solution convergée est hasardeuse plus  $n$  diminue.

### 5.5 Retour sur la plage de $n$ traitée dans l'article 1

La plage de  $n$  qui devait initialement être couverte est  $n \in [0.1, 1.0]$ , espacée en bonds de 0.1, pour les deux modèles rhéologiques. En effet, des simulations ont été lancées pour  $n = \{0.1, 0.2\}$  pour tous les Re couverts dans l'article.

On a vu à la section 5.4 que le ratio entre la plus grande viscosité et la plus petite viscosité à l'intérieur du domaine de calcul augmente à mesure que  $n$  diminue, pour tous Re. À bas Reynolds ( $Re < 1$ ), l'écart est déjà assez important entre  $\eta_{\max}$  et  $\eta_{\min}$  à  $n = 0.3$ , ce qui implique que l'ordre de grandeur des lignes du système matriciel varie significativement. Plus l'étendue des ordres de grandeur de la matrice est large, plus c'est difficile de trouver  $\mathcal{M}$ , le préconditionneur qui aide à résoudre le système linéarisé (voir la méthodologie au Chapitre 3 pour plus de détails sur la méthode GMRES). Même en augmentant le nombre de vecteurs de Krylov pour générer le sous-espace de Krylov, et même en ne limitant pas le nombre d'itérations pour le solveur linéaire itératif, il a été impossible de converger pour  $n = \{0.1, 0.2\}$  à bas Reynolds au même niveau de maillage que celui présenté à la section 4.5.1 de l'article 1.

À haut Reynolds, en plus du problème de l'étendue des ordres de grandeur dans le jacobien, il existe aussi la possibilité qu'il n'y ait pas de solution stationnaire pour d'aussi petites valeurs de  $n$ . En effet, à mesure que  $n$  diminue, la couche limite s'amincit. La viscosité varie

drastiquement dans cette mince couche limite, ce qui peut causer des instabilités près de la sphère.

Pour les fluides de Carreau, plus  $\Lambda$  est petit, plus on se rapproche du comportement newtonien (voir section 4.5.2). Les difficultés de convergence du solveur linéaire itératif ont été rencontrées pour  $\Lambda \geq 1$ .

La prochaine section, qui clôt le chapitre sur le contenu complémentaire à l'article, traitera du choix de l'ordre des polynômes de Lagrange utilisés pour l'interpolation des profils de vitesse et de pression.

## 5.6 Retour sur les méthodes d'ordre élevé

Tel que mentionné à la section 4.5.1 de l'article 1, l'interpolation des profils de vitesse et de pression pour les simulations d'écoulement autour d'une sphère est faite avec l'emploi de polynômes quadratiques et linéaires, respectivement. Ce choix a été fait suite à l'analyse des figures 5.7a et 5.7b, où on compare l'erreur relative sur le coefficient de traînée convergé ( $C_D$  pour le maillage le plus fin, avec des éléments Q2Q1) en fonction du nombre de degrés de liberté (du nombre d'inconnues au système matriciel à résoudre). Le premier résultat à gauche de chacune des courbes représente le même niveau de raffinement, soit le raffinement initial ; en Q2Q1, on a davantage de degrés de liberté (d'inconnues en vitesse). Pour  $n = 1$ , on constate que les simulations en éléments Q2Q1 convergent vers un  $C_D$  stable plus rapidement que pour les éléments Q1Q1, et c'est particulièrement flagrant pour  $(Re, n) = (100, 1)$ . Au niveau de raffinement initial, l'estimé de  $C_D$  est plus précis pour les simulations Q2Q1, et à partir du maillage choisi (en gris), la valeur de  $C_D$  obtenue ne semble plus varier. En général, pour les écoulements présentant des trajectoires curvilignes (comme c'est le cas autour d'une sphère), des éléments quadratiques pour la vitesse permettent de mieux représenter le profil d'écoulement curviligne, d'où la convergence plus rapide. En revanche, comme c'est montré à aux figures 5.2b et 5.4b, l'emploi d'éléments Q2Q2 n'a pas prouvé avoir un net avantage par rapport aux éléments Q2Q1.

L'étude sur l'ordre des éléments d'interpolation pour la vitesse n'a initialement pas été étendue aux écoulements rhéofluidifiants : il était assumé que l'effet serait le même. Étonnement, on n'observe pas le même phénomène aux figure 5.7c et 5.7d. On avait vu dans la section traitant de l'analyse de convergence en maillage de l'article (section 4.5.1) que la convergence du  $C_D$  est de moins en moins rapide à mesure de  $n$  diminue. Ce qui est étonnant, c'est que le  $C_D$  semble converger aussi rapidement, avec des éléments Q1Q1, à la figure 5.7c ( $n = 0.5$ ) qu'à la figure 5.7a ( $n = 1$ ). Encore plus étonnant, il semble que pour  $(Re, n) = (100, 0.5)$ ,



la solution converge rapidement pour les éléments Q1Q1, alors qu'en Q2Q1, c'est difficile de parler de convergence du  $C_D$ . On constate que les conclusions tirées à  $n = 1$  ne peuvent pas être étendues aux écoulements rhéofluidifiants.

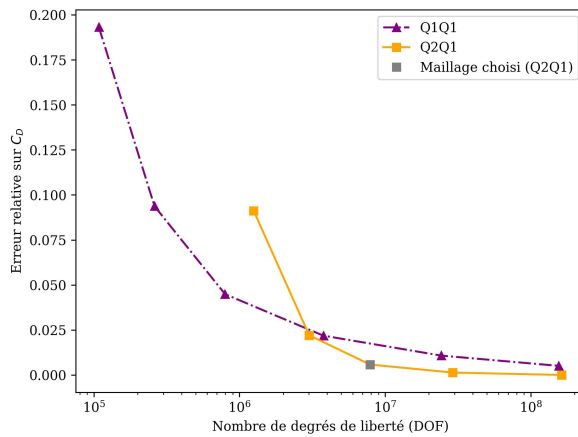
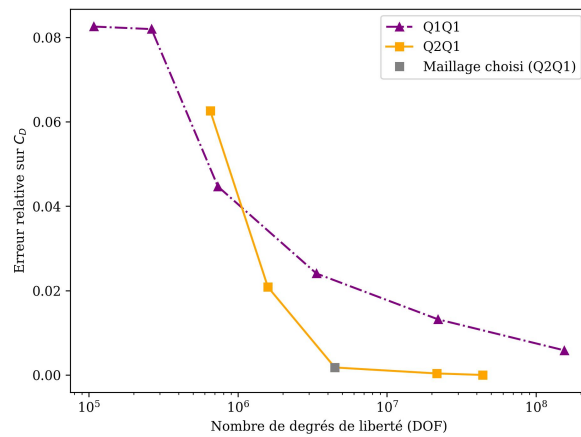
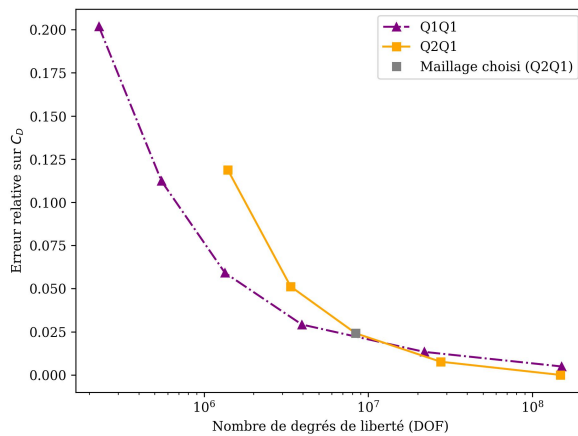
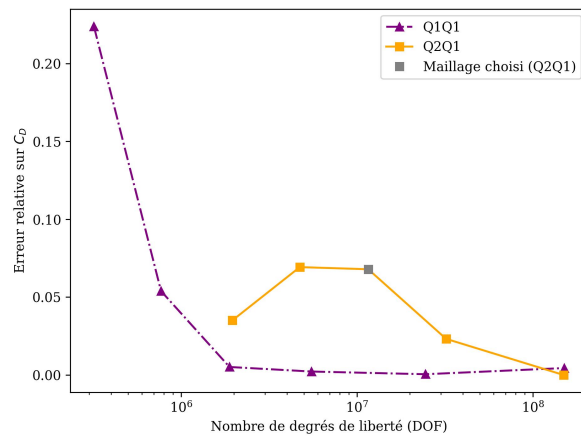
(a)  $Re = 0.1, n = 1$ (b)  $Re = 100, n = 1$ (c)  $Re = 0.1, n = 0.5$ (d)  $Re = 100, n = 0.5$ 

FIGURE 5.7 Évolution de l'erreur relative sur le  $C_D$  en fonction du nombre de degrés de liberté (DOF) pour des éléments Q1Q1 et Q2Q1.

Comme mentionné plus haut, c'est un constat qui a été fait après la génération des résultats de l'article 1. Dans l'article, il a été jugé pertinent de connaître l'ordre de grandeur de l'erreur sur le coefficient de traînée calculé au maillage choisi, il n'a jamais été considéré de revoir les solutions calculées pour des éléments Q1Q1. Après cette analyse, cela paraît évident de le faire! L'auteur du mémoire n'a pas pour autant trouvé de justification à ce phénomène.

La figure 5.8 montre le temps de calcul cumulatif nécessaire aux simulations en fonction de l'erreur relative sur le  $C_D$ , toujours par rapport au  $C_D$  du maillage le plus fin simulé en

Q2Q1. En imposant une échelle logarithmique pour l'erreur relative, on ne voit pas le dernier point pour les simulations en Q2Q1. À titre indicatif, plus près on se trouve du coin inférieur gauche, plus c'est efficace. On remarque donc clairement que le choix d'éléments d'ordre 2 pour les simulations d'écoulement newtonien est justifié, alors que ce n'est pas le cas pour les écoulements à  $n = 0.5$ .

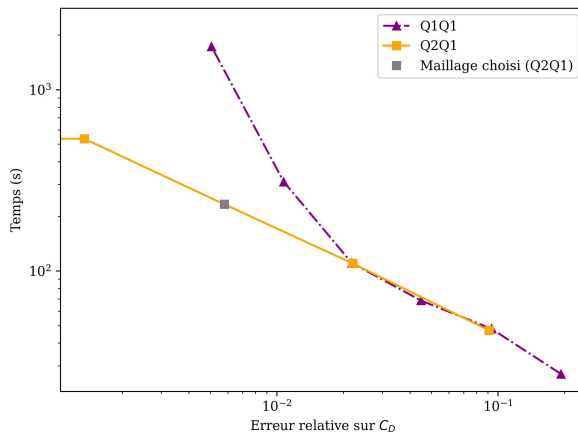
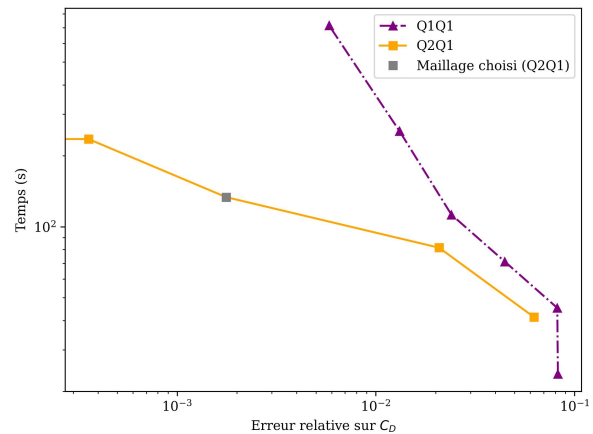
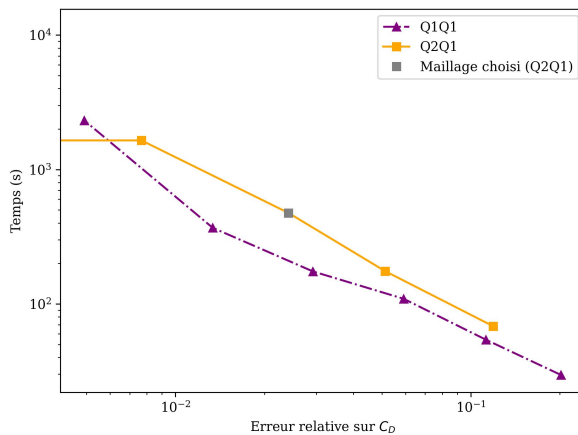
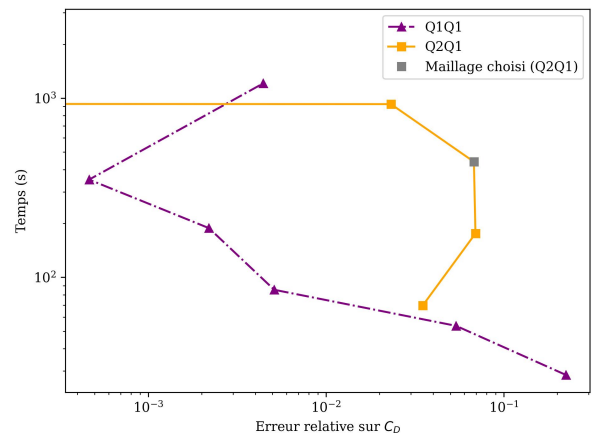
(a)  $Re = 0.1, n = 1$ (b)  $Re = 100, n = 1$ (c)  $Re = 0.1, n = 0.5$ (d)  $Re = 100, n = 0.5$ 

FIGURE 5.8 Évolution de l'erreur relative sur le  $C_D$  en fonction du nombre de degrés de liberté (DOF) pour des éléments Q1Q1 et Q2Q1, sur la grappe Niagara de Calcul Québec avec 10 nœuds de calcul.

Ceci conclut le chapitre sur le contenu supplémentaire à l'article. La prochaine section visera à revoir les éléments importants du mémoire.

## CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE

Ce projet de recherche a assurément une étendue plus large que le contenu de l'article scientifique soumis. En effet, la raison d'être du projet émerge d'un manque initial de solveurs stabilisés, pour lesquels la jacobienne du système matriciel soit bien posée pour les écoulements non-newtoniens. Le solveur proposé sera (et est d'ailleurs déjà) utile à de multiples applications. Présentement, le solveur non-newtonien est utilisé à des fins de recherche au sein de l'URPEI et pour deux partenaires industriels. Dans le cadre de son doctorat, une étudiante dans l'URPEI étudie le mélange de liquides rhéofluidifiants pour le design d'un procédé de fabrication additive. L'un des projets industriels vise à simuler le mouvement d'un polymère fondu hautement rhéofluidifiant dans un mélangeur. Le second projet industriel étudie le mouvement de la pâte à pain, aussi rhéofluidifiante, dans un mélangeur industriel, dans le but d'optimiser le processus de préparation. Toujours du mélange!

Idéalement, l'auteure souhaite que l'outil numérique proposé puisse être utilisé à de nombreuses autres applications industrielles et laboratoires, et que les fonctionnalités du solveur soient étendues pour élargir le champ d'applications (ce sera discuté dans la section 7.3).

Tel qu'évoqué dans l'article 1, la proportion de fluides utilisés dans l'industrie chimique qui présentent des comportements non-newtoniens est considérable. La majorité de ces fluides non-newtoniens sont rhéofluidifiants. De ce fait, le modèle de Carreau est le modèle le mieux adapté pour représenter le plus fidèlement le comportement en viscosité de la majorité des fluides. En effet, le modèle de loi de puissance s'avère mal posé pour représenter la viscosité d'un fluide là où des régions de faible taux de cisaillement surviennent, mais il peut être particulièrement accommodant puisqu'il est facile à paramétrer. Essentiellement, si on cherche à simuler un écoulement rhéofluidifiant pour un schéma qui ne présente pas de faibles taux de cisaillement, le modèle de loi de puissance est recommandable.

Dans les procédés chimiques industriels, on a souvent recours à des particules, souvent sphériques, notamment dans les réacteurs à lits de particule, dans des procédés de mélange ou de séparation de phase. Le comportement des suspensions de particules joue un rôle important dans l'efficacité de ces procédés, d'où l'intérêt de l'étudier. On s'intéresse particulièrement à la force de traînée des particules immergées dans un fluide.

La revue de littérature a permis de constater qu'il existe peu de modèles de prédiction du coefficient de traînée valides pour une plage étendue de  $Re$  pour les écoulements non-newtoniens. Plusieurs modèles ont été développés dans le dernier demi-siècle pour les écoulements non-newtoniens en régime de Stokes; ils sont absolument pertinents, mais strictement réservés à

ce régime d'écoulement. Les études concernant les écoulements rhéofluidifiants autour d'une sphère pour  $Re > 1$  sont limitées. On a voulu investiguer la problématique en simulant des écoulements autour d'une sphère pour une plage de  $Re$  étendue, pour calculer les coefficients de traînée résultants et déduire une corrélation entre le  $C_D$ , le  $Re$  et la valeur de  $n$ . Parallèlement, on a aussi voulu observer l'impact du temps de relaxation intrinsèque au fluide sur la force de traînée subie par la particule et, peut-être, corréler cet impact par rapport au comportement des fluides de loi de puissance.

La corrélation du  $C_D$  en fonction de  $Re$  et de  $n$  pour les fluides de loi de puissance est apparue presque évidente, du fait qu'on retrouve pratiquement le même profil  $C_D/C_{D,0}$  sur  $Re \in [0.1, 100]$  pour tous les  $n$ , à des amplitudes différentes. La difficulté résidait dans la conception d'un modèle minimisant l'erreur par rapport aux résultats de simulation.

Les coefficients de traînés pour les fluides de Carreau à bas Reynolds ( $Re = 0.1$ ) sont comparés à des résultats expérimentaux obtenus en régime de Stokes. Ce cas de comparaison procure une validation des méthodes numériques implémentées, vue l'adéquation aux résultats.

Ce travail ne propose pas de corrélation entre  $C_D$ ,  $Re$ ,  $n$  et  $\Lambda$  pour les fluides de Carreau. En effet, comme le coefficient de traînée d'un fluide de Carreau n'est pas borné entre celui d'un fluide newtonien et celui d'un fluide de loi de puissance, il est difficile d'élaborer une formulation qui ait un sens physique. La notion du  $Re$  *a priori* est également erronée; elle est largement employée dans la littérature et facilite la comparaison entre articles et à des résultats expérimentaux, mais il est clair que l'estimation du  $Re$  n'est pas suffisamment adéquate pour des comparaisons d'un fluide à l'autre. C'est d'ailleurs une limitation à l'analyse des résultats.

Les analyses de sensibilité au maillage et à la taille du domaine ont mis en lumière certains aspects peu discutés dans la littérature, notamment que la taille du domaine ait un impact notoire sur la force de traînée calculée à bas Reynolds en raison de la grande couche limite. On a aussi constaté que la convergence en maillage pour la force de traînée est plus lente à mesure qu'on s'éloigne de  $n = 1$ . Plusieurs études montrent une analyse de convergence en maillage à  $n = 1$  seulement; c'est difficile, voire impossible, de conclure sur la convergence en maillage pour les écoulements rhéofluidifiants. On a aussi constaté que l'emploi d'éléments quadratiques pour l'interpolation de la vitesse n'était pas nécessairement justifié pour les écoulements rhéofluidifiants. Les conclusions tirées de l'analyse de sensibilité au maillage pour le cas précis d'écoulement autour d'une sphère peuvent assurément être étendues à d'autres géométries d'écoulement rhéofluidifiant. En effet, l'objectif du projet n'était pas seulement d'étudier les écoulements rhéofluidifiants autour d'une sphère, c'était aussi l'occasion de montrer la démarche menant au solveur stabilisé, de montrer les limitations

des modèles rhéologiques et les défis que posent les écoulements non-newtoniens sur le plan numérique.

## CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

### 7.1 Synthèse des travaux

Le projet de recherche a été initié par le développement d'un modèle numérique d'ordre élevé pour la simulation d'écoulements rhéofluidifiants et rhéoépaississants, considérant des fluides de loi de puissance et des fluides de Carreau. Le système d'équations est résolu itérativement avec la méthode de Newton-Raphson ; le terme de stabilisation numérique et la jacobienne du système matriciel sont ajustés aux écoulements non-newtoniens. Pour ce faire, il a été nécessaire de redéfinir la formulation faible en éléments finis des équations de continuité et de quantité de mouvement de NSI. L'implémentation logicielle est rigoureusement vérifiée par l'emploi d'une solution manufacturée (MMS) complexe : l'ordre de convergence de l'erreur attendu sur la solution est conservé pour les ordres élevés. De ce fait, les **S.O.1** et **S.O.2** sont réussis.

Le schéma d'application est celui d'écoulement rhéofluidifiant autour d'une sphère, où on s'intéresse à l'impact des effets rhéofluidifiants sur la force de traînée subie par une sphère lisse seule. La plage de Reynolds d'intérêt est  $Re \in [0.1, 100]$ , la plage du paramètre  $n$  est  $n \in [0.3, 1]$ , et pour les fluides de Carreau, on choisit une plage de temps de relaxation adimensionnel  $\Lambda \in [0.1, 100]$ . Des analyses de convergence en maillage et de sensibilité à la taille du domaine ont été conduites.

L'article présente une corrélation pour  $C_D/C_{D,0}$  pour les fluides de loi de puissance ayant la forme d'une tangente hyperbolique pour laquelle le coefficient de détermination est  $R^2 = 0.998$ . Les auteur.e.s de l'article croient que les corrélations de loi de puissance pourront être étendues par interpolation pour  $0.3 < n < 1$ , et ne voient pas de contrainte à extrapoler pour des  $n < 0.3$ , sous condition qu'une solution stationnaire existe.

Les coefficients de corrélation pour les fluides de Carreau ont été comparés aux résultats numériques de Tripathi et al. (1994), de Dhole et al. (2006) et de Song et al. (2011), puis les coefficients de corrélation pour les fluides de Carreau sont comparés à des mesures expérimentales de Chhabra & Uhlherr (1980) en régime de Stokes ; les résultats sont en adéquation avec la littérature. Des difficultés numériques ont été rencontrées quant à la stabilité du solveur linéaire. En effet, plus les écoulements sont rhéofluidifiants, plus la plage de viscosité dans le domaine est grande et plus le solveur linéaire peine à converger. Considérant les limites numériques (et potentiellement physiques) pour les simulations à  $n = \{0.1, 0.2\}$ , l'objectif **S.O.3** est réussi.

Les résultats montrent clairement que, pour un schéma d'écoulement où on a des régions de faible de taux de cisaillement, le modèle de loi de puissance n'est pas adapté pour la prédiction du profil d'écoulement, ni même de la force de traînée. En effet, ce qui se produit loin de la sphère a également un impact sur la force de traînée sur la particule ; c'est préférable d'utiliser un modèle comme celui de Carreau qui tient compte du plateau newtonien et de la transition graduelle entre ce plateau et la région descendante de viscosité.

## 7.2 Limitations de la solution proposée

Bien que le modèle de Carreau ne soit réservé qu'aux fluides rhéofluidifiants, le modèle de loi de puissance permet également de simuler les écoulements rhéoépaississants. Quoiqu'on en retrouve moins dans l'industrie chimique, ce mémoire ne traite pas du tout les fluides pour  $n > 1$ .

En plus d'être rhéofluidifiants (ou rhéoépaississants), certains fluides présentent aussi un caractère élastique, comme c'est le cas pour la pâte à pain. Les modèles de loi de puissance et de Carreau ne tiennent pas compte de l'aspect élastique des fluides. Dans Lethe, les simulations d'écoulements non-newtoniens assument un comportement purement visqueux.

Finalement, le modèle pourrait être plus amplement validé. En effet, il faudrait effectuer de nouvelles mesures pour une géométrie différente, pour valider le modèle. En effet, ce n'est pas que la force de traînée qui puisse être étudiée. Des tests d'écoulement de liquides rhéofluidifiants sur un plan incliné, par exemple, pourraient être menés pour comparer les trajectoires.

## 7.3 Travaux futurs

Tel que mentionné plus haut, ce projet s'inscrit dans la démarche vers une meilleure compréhension du comportement des suspensions de particules sphériques dans des fluides rhéofluidifiants. L'étude pour une sphère seule était nécessaire ; elle doit être poursuivie pour considérer les effets non-newtoniens sur les interactions entre les particules. Dans un premier temps, il serait pertinent d'étudier l'écoulement autour de deux sphères, puis d'observer les effets rhéofluidifiants sur l'attraction entre les sphères. En effet, l'attrition est un problème couramment rencontré dans un contexte de suspensions de particules, et cela impacte grandement l'efficacité des procédés [71]. Il existe des modèles de prédiction de la force de traînée pour des lits fluidisés (utilisés en CFD-DEM non résolu), comme l'équation d'Ergun, qui considèrent un écoulement newtonien ; c'est à redéfinir pour les écoulements non-newtoniens [72].

Il serait intéressant d'intégrer dans Lethe d'autres modèles rhéologiques qui tiennent compte des effets élastiques. Les simulations actuelles de la pâte à pain sont faites ne considérant pas l'effet élastique de la pâte, on émet donc une erreur dans les prédictions. Les écoulements viscoélastiques sont beaucoup plus complexes que ceux purement visqueux, il faudrait redéfinir le système matriciel à résoudre puisqu'on considérerait l'élongation  $\epsilon$ . C'est un projet d'envergure.

La plus grande difficulté technique rencontrée dans ce projet a été la difficulté à faire converger le solveur linéaire GMRES. Ce problème était dû au fait que l'ordre de grandeur des éléments de la matrice pouvaient varier considérablement. Une potentielle solution à ce problème serait d'uniformiser les lignes de la matrice en imposant des 1 sur la diagonale. En effet, si on impose 1 sur la diagonale et les autres termes de la ligne sont ajustés proportionnellement, on résout le même système matriciel. Cet algorithme d'uniformisation de la matrice pourrait être implémenté dans la librairie `deal.II`.

#### 7.4 Mot de la fin

J'aimerais finir en remerciant toutes les personnes qui ont contribué à ce projet de près ou de loin. Rien de tout cela n'aurait été possible sans la contribution des développeur.e.s de Lethe et de `deal.II`, ainsi que le support académique et administratif que j'ai reçu à Polytechnique Montréal. C'est avec grande fierté et beaucoup d'enthousiasme que je rends ce mémoire, et je souhaite que le travail accompli cette dernière année et demie soit réinvesti et mis à profit. C'est pourquoi l'entièreté du travail en développement logiciel est disponible sur la plateforme web GIT, en libre accès, pour favoriser son utilisation.



## RÉFÉRENCES

- [1] S. D. Dhole, R. P. Chhabra et V. Eswaran, “Flow of power-law fluids past a sphere at intermediate reynolds numbers,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 45, n°. 13, p. 4773–4781, may 2006.
- [2] D. Song, R. K. Gupta et R. P. Chhabra, “Wall effects on a sphere falling in quiescent power law fluids in cylindrical tubes,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 48, n°. 12, p. 5845–5856, may 2009.
- [3] P. J. Carreau, D. C. R. D. Kee et R. P. Chhabra, *Rheology of Polymeric Systems*. Hanser Fachbuchverlag, sept. 2021.
- [4] R. Clift, J. R. Grace et M. E. Weber, *Bubbles, drops and particles*. Mineola, N.Y. : Dover Publications, 2005.
- [5] R. Barati, S. A. A. S. Neyshabouri et G. Ahmadi, “Development of empirical models with high accuracy for estimation of drag coefficient of flow around a smooth sphere : An evolutionary approach,” *Powder Technology*, vol. 257, p. 11–19, may 2014.
- [6] R. Clift et W. H. Gauvin, “Motion of entrained particles in gas streams,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 49, n°. 4, p. 439–448, aug 1971.
- [7] L. Schiller et Z. Naumann, “A drag coefficient correlation,” *VDI Zeitungk*, vol. 77, p. 318–320, 1935.
- [8] R. Flemmer et C. Banks, “On the drag coefficient of a sphere,” *Powder Technology*, vol. 48, n°. 3, p. 217–221, nov 1986.
- [9] A. Tripathi, R. P. Chhabra et T. Sundararajan, “Power law fluid flow over spheroidal particles,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 33, n°. 2, p. 403–410, feb 1994.
- [10] D. Song, R. K. Gupta et R. P. Chhabra, “Drag on a sphere in poiseuille flow of shear-thinning power-law fluids,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 50, n°. 23, p. 105–115, feb 2011.
- [11] T. A. JOHNSON et V. C. PATEL, “Flow past a sphere up to a reynolds number of 300,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 378, p. 19–70, jan 1999.
- [12] R. P. Chhabra et P. H. T. Uhlherr, “Creeping motion of spheres through shear-thinning elastic fluids described by the carreau viscosity equation,” *Rheologica Acta*, vol. 19, n°. 2, p. 187–195, mar 1980.

- [13] F. Morrison, *Understanding Rheology*, ser. Raymond F. Boyer Library Collection. Oxford University Press, 2001.
- [14] J. N. Reddy, *An Introduction to Continuum Mechanics*, 2<sup>e</sup> éd. Cambridge University Press, 2013.
- [15] M. Zarei et J. Aalaie, “Application of shear thickening fluids in material development,” *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 9, n<sup>o</sup>. 5, p. 10 411–10 433, sep 2020.
- [16] L. Ibarrientos, G. L. Tangonan et L. Macaraig, “Analysis of falling using an inertial measurement unit (imu) and surface electromyography (semg) armband and one- electrode bracelet design,” 2019.
- [17] G. MacKenzie, “Finagling the Flow : Making Viscosity Work For You In Molding,” <https://www.ptonline.com/blog/post/finagling-the-flow-making-viscosity-work-for-you-in-molding>, nov. 2016, En ligne ; accédé le 8 octobre 2022.
- [18] J. Salençon, *Mécanique des milieux continus*. Polytechnique Montréal, 2005.
- [19] G. K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2000.
- [20] P. Peter Chadwick, *Continuum Mechanics : Concise Theory and Problems*. DOVER PUBN INC, janv. 1998.
- [21] L. D. Landau, *Fluid mechanics*. Pergamon Press, 1987.
- [22] R. Bird, E. Lightfoot et W. Stewart, *Transport Phenomena*. J. Wiley, 2002.
- [23] H. Brewster, *Fluid Mechanics*. Oxford Book Company, 2009.
- [24] T. Abbasov, S. Herdem et A. Memnedov, “On the drag force of a solid sphere in power law flow model,” *Mathematical and Computational Applications*, vol. 4, n<sup>o</sup>. 2, p. 161–167, 1999.
- [25] G. W. Griffiths, *Numerical Analysis Using R Solutions to ODEs and PDEs*. Cambridge University Press, 2016.
- [26] P. K. Kundu et I. M. Cohen, *Fluid Mechanics*. Elsevier Science & Technology Books, 2010.
- [27] E. Buckingham, “On physically similar systems : Illustrations of the use of dimensional equations,” *Physical Review*, vol. 4, n<sup>o</sup>. 4, p. 345–376, oct 1914.
- [28] G. Bagheri et C. Bonadonna, “On the drag of freely falling non-spherical particles,” *Powder Technology*, vol. 301, p. 526–544, 2016.
- [29] F. F. Abraham, “Functional dependence of drag coefficient of a sphere on reynolds number,” *Physics of Fluids*, vol. 13, n<sup>o</sup>. 8, p. 2194, 1970.

- [30] H. Brauer et D. Mewes, “Strömungswiderstand sowie stationärer und instationärer stoff- und wärmeübergang an kugeln,” *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 44, n°. 13, p. 865–868, jul 1972.
- [31] P. P. Brown et D. F. Lawler, “Sphere drag and settling velocity revisited,” *Journal of Environmental Engineering*, vol. 129, p. 222–231, 2003.
- [32] T. J. Santner, B. J. Williams et W. I. Notz, *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer-Verlag GmbH, janv. 2019.
- [33] COMSOL, “Understanding, and hanging, the element order,” <https://www.comsol.com/support/knowledgebase/1270>, En ligne ; accédé le 26 septembre 2022.
- [34] M. G. Larson, *The finite element method : theory, implementation, and applications / Mats G. Larson, Fredrik Bengzon.*, ser. Texts in computational science and engineering, 10. Heidelberg ; : Springer, 2013 - 2013.
- [35] J. N. Reddy, *Introduction to the Finite Element Method*. McGraw-Hill Education, 2018.
- [36] W. Frei, “Keeping track of element order in multiphysics models,” <https://www.comsol.com/blogs/keeping-track-of-element-order-in-multiphysics-models/>, Février 2016, En ligne ; accédé le 27 septembre 2022.
- [37] A. Fortin, *Analyse numérique pour ingénieurs*. Presses internationales Polytechnique, 2008.
- [38] E. at Alberta, “One and two dimensional isoparametric elements and gaussian intergration : Gauss intergration,” <https://engcourses-uofa.ca/books/introduction-to-solid-mechanics/finite-element-analysis/one-and-two-dimensional-isoparametric-elements-and-gauss-integration/gauss-integration/>, En ligne ; accédé le 4 octobre 2022.
- [39] B. Blais, L. Barbeau, V. Bibeau, S. Gauvin, T. E. Geitani, S. Golshan, R. Kamble, G. Mirakhori et J. Chaouki, “Lethe : An open-source parallel high-order adaptative cfd solver for incompressible flows,” *SoftwareX*, vol. 12, p. 100579, 2020.
- [40] D. Carlson, “What are Schur complements, anyway?” *Linear Algebra and its Applications*, vol. 74, p. 257–275, 1986.
- [41] D. Arndt, W. Bangerth, M. Feder, M. Fehling, R. Gassmöller, T. Heister, L. Heltai, M. Kronbichler, M. Maier, P. Munch, J.-P. Pelteret, S. Sticko, B. Turcksin et D. Wells, “The deal.II library, version 9.4,” *Journal of Numerical Mathematics*, vol. 0, n°. 0, jul 2022.
- [42] “Message passing interface,” <https://hpc.nmsu.edu/discovery/mpi/introduction/>, En ligne ; accédé le 29 septembre 2022.

- [43] deal.II, “Gridgenerator namespace reference,” <https://www.dealii.org/current/doxygen/deal.II/namespaceGridGenerator.html>, En ligne ; accédé le 26 septembre 2022.
- [44] D. W. Kelly, J. P. D. S. R. Gago, O. C. Zienkiewicz et I. Babuska, “A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method : Part i—error analysis,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 19, n<sup>o</sup>. 11, p. 1593–1619, nov 1983.
- [45] “TrilinosWrappers,” [https://www.dealii.org/current/doxygen/deal.II/group\\_\\_TrilinosWrappers.html](https://www.dealii.org/current/doxygen/deal.II/group__TrilinosWrappers.html), En ligne ; accédé le 11 octobre 2022.
- [46] R. Mittal et A. Al-Kurdi, “An efficient method for constructing an ILU preconditioner for solving large sparse nonsymmetric linear systems by the GMRES method,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 45, n<sup>o</sup>. 10-11, p. 1757–1772, may 2003.
- [47] W. Kim et H. Choi, “Immersed boundary methods for fluid-structure interaction : A review,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 75, p. 301–309, 2019.
- [48] L. Barbeau, S. Etienne, C. Béguin et B. Blais, “Development of a high-order continuous galerkin sharp-interface immersed boundary method and its application to incompressible flow problems,” *Computers & Fluids*, vol. 239, p. 105415, 03 2022.
- [49] K. Adachi, N. Yoshioka et K. Yamamoto, “On non-newtonian flow past a sphere,” *Chemical Engineering Science*, vol. 28, n<sup>o</sup>. 11, p. 2033–2043, 1973.
- [50] A. Acharya, R. A. Mashelkar et J. Ulbrecht, “Flow of inelastic and viscoelastic fluids past a sphere,” *Rheologica Acta*, vol. 15, n<sup>o</sup>. 9, p. 454–470, sep 1976.
- [51] M. A. Lockyer, J. M. Davies et T. E. R. Jones, *The Importance of Rheology in the Determination of the Carrying Capacity of Oil-Drilling Fluids*. Boston, MA : Springer US, 1980, p. 127–132.
- [52] G. D. R. Tanner, “The drag on a sphere in a power-law fluid,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 17, p. 1–12, 1985.
- [53] Y. Kawase et M. Moo-Young, “Approximate solutions for power-law fluid flow past a particle at low reynolds numbers,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 21, n<sup>o</sup>. 2, p. 167–177, jan 1986.
- [54] M. Renaud, E. Mauret et R. P. Chhabra, “Power-law fluid flow over a sphere : Average shear rate and drag coefficient,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 82, n<sup>o</sup>. 5, p. 1066–1070, may 2004.
- [55] R. P. Chhabra et P. H. T. Uhlherr, “Sphere motion through non-newtonian fluids at high reynolds number,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 58, n<sup>o</sup>. 1, p. 124–128, feb 1980.

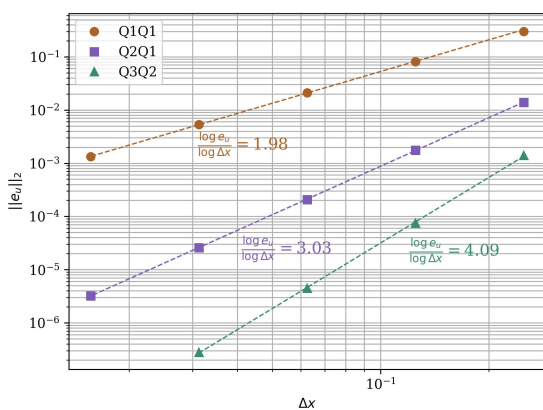
- [56] M. Bush et N. Phan-Thien, “Drag force on a sphere in creeping motion through a Carreau model fluid,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 16, n<sup>o</sup>. 3, p. 303–313, 1984.
- [57] J. Hsu, S. Yeh et S. Tseng, “Drag on a sphere in a spherical dispersion containing Carreau fluid,” *Powder Technology*, vol. 188, n<sup>o</sup>. 1, p. 34–41, dec 2008.
- [58] T. Tezduyar et S. Sathe, “Stabilization parameters in SUPG and PSPG formulations,” *Journal of Computational and Applied Mechanics*, n<sup>o</sup>. 4, p. 71–88, 2003.
- [59] “Viscosity for non-newtonian fluids,” <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/node297.htm>, Online ; accessed 2 September 2022.
- [60] W. L. Oberkampf, *Verification and validation in scientific computing*. Cambridge University Press, 2010.
- [61] P. J. Roache, *Verification and validation in computational science and engineering*. Hermes publishers, 1998.
- [62] H. Schlichting et J. Kestin, *Boundary layer theory*. Springer, 1961, vol. 121.
- [63] J. Wolberg, *Data Analysis Using the Method of Least Squares*. Springer, 2006.
- [64] D. Graham et T. Jones, “Settling and transport of spherical particles in power-law fluids at finite Reynolds number,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 54, p. 465–488, aug 1994.
- [65] I. Machač et B. Šiška, “Calculation of terminal falling velocity of spherical particles moving through polymer solutions using a power-law viscosity model,” *Scientific papers of the University of Pardubice*, n<sup>o</sup>. 25, p. 117–126, 2019.
- [66] R. P. C. Doayun Song, Rakesh K., “Wall effect on a spherical particle settling along the axis of cylindrical tubes filled with Carreau model fluids,” 2011.
- [67] C.-A. Daunais, “Shear thinning flow past a sphere drag coefficients results (Power-law and Carreau),” [https://github.com/lethe-cfd/lethe-utils/tree/master/cases/non\\_newtonian/sphere](https://github.com/lethe-cfd/lethe-utils/tree/master/cases/non_newtonian/sphere), 2022.
- [68] T. Heister et G. Rapin, “Efficient augmented Lagrangian-type preconditioning for the Oseen problem using grad-div stabilization,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 71, n<sup>o</sup>. 1, p. 118–134, jan 2012.
- [69] T. H. Liang Shao, “The step-57 tutorial program,” [https://www.dealii.org/developer/doxygen/deal.II/step\\_57.html](https://www.dealii.org/developer/doxygen/deal.II/step_57.html), En ligne ; accédé le 12 octobre 2022.
- [70] M. El-Amrani et M. Seaid, “Convergence and stability of finite element modified method of characteristics for the incompressible Navier–Stokes equations,” vol. 15, n<sup>o</sup>. 2, p. 101–135, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1515/jnma.2007.006>

- [71] Y.-C. Ray, T.-S. Jiang et C. Wen, “Particle attrition phenomena in a fluidized bed,” *Powder Technology*, vol. 49, n°. 3, p. 193–206, 1987. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032591087801286>
- [72] B. Halvorsen, J. Plessis et S. Woudberg, “The performance of drag models on flow behaviour in the cfd simulation of a fluidized bed,” vol. 52, 04 2006, p. 3–12.

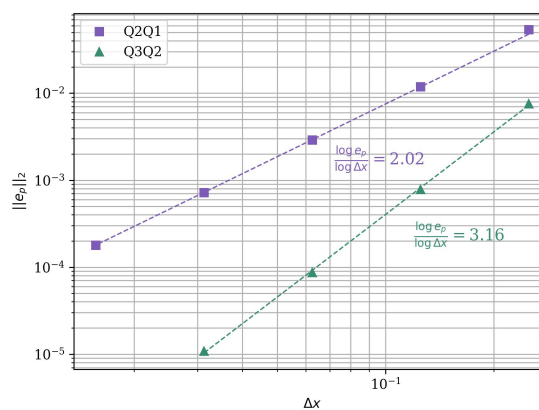
## ANNEXE A VÉRIFICATION DE CODE : SOLVEUR GRAD-DIV

Les solutions exactes et paramètres de modèles sont les mêmes que ceux présentés dans la section 5.3. L'emploi du solveur Grad-Div ajoute une condition d'utilisation : la résolution du profil de pression est mal posée pour des éléments d'interpolation de pression d'ordre égal ou supérieur aux éléments d'interpolation de la vitesse. Ceci est dû à la condition de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi (LBB) utilisée. La preuve est laissée au (à la) lecteur(trice) intéressé(e).

La figure A.1 montre les ordres de convergence de l'erreur sur la vitesse et la pression pour le fluide de Carreau. Les ordres obtenus sont tels qu'attendus, et semblables à ceux montrés à la section 5.3.1.



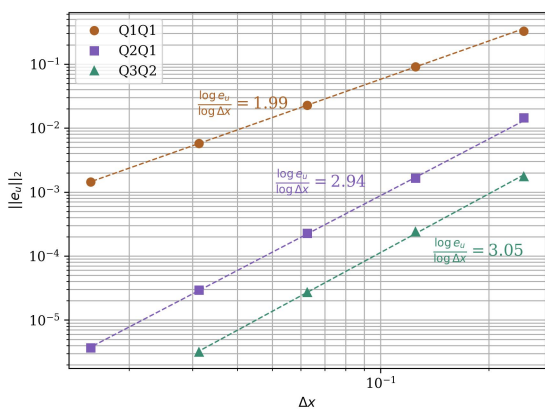
(a) Convergence de la vitesse



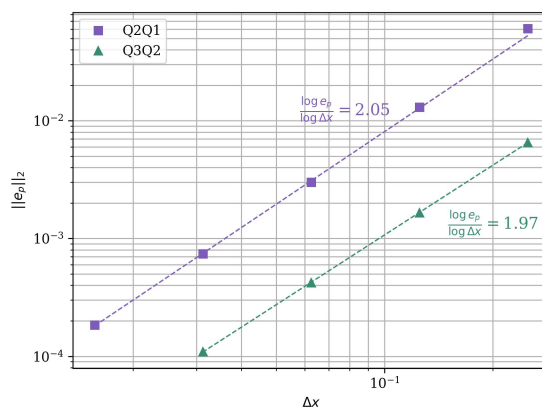
(b) Convergence de la pression

FIGURE A.1 Évolution de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur sur la (a) vitesse et sur la (b) pression avec le modèle de Carreau pour différentes combinaisons de polynômes d'interpolation vitesse-pression, en considérant un raffinement de maillage global avec le solveur Grad-Div.

Comme montré à la section 5.3.2, les résultats de la figure A.2 avec le modèle de loi de puissance témoignent de la limitation du modèle à ordre élevé.



(a) Convergence de la vitesse



(b) Convergence de la pression

FIGURE A.2 Évolution de la norme  $\mathcal{L}^2$  de l'erreur sur la (a) vitesse et sur la (b) pression avec le modèle de loi de puissance pour différentes combinaisons de polynômes d'interpolation vitesse-pressure, en considérant un raffinement de maillage global avec le solveur Grad-Div.