PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Développement d'un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel pour des applications au mélange solide-liquide
Auteur: Author:	Bastien Delacroix
Date:	2019
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Delacroix, B. (2019). Développement d'un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel pour des applications au mélange solide-liquide [Master's thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/4127/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/4127/
Directeurs de recherche: Advisors:	François Bertrand, Louis Fradette, & Bruno Blais
Programme: Program:	Génie chimique

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Développement d'un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel pour des applications au mélange solide-liquide

BASTIEN DELACROIX
Département de génie chimique

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

Décembre 2019

© Bastien Delacroix, 2019.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Développement d'un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel pour des applications au mélange solide-liquide

présenté par **Bastien DELACROIX**
en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Jason Robert TAVARES, président
François BERTRAND, membre et directeur de recherche
Louis FRADETTE, membre et codirecteur de recherche
Bruno BLAIS, membre et codirecteur de recherche
Jean-Philippe HARVEY, membre

REMERCIEMENTS

Je voudrais, dans un premier temps, adresser de sincères remerciements aux professeurs François Bertrand et Louis Fradette pour leur confiance tout au long de ce projet, la toujours très grande pertinence de leurs remarques et pour avoir toujours su être disponibles et réactifs, et ce, malgré leurs responsabilités administratives. Mais ce pourquoi je tiens vraiment à les remercier, c'est pour m'avoir donné l'opportunité de traiter d'un sujet à dominante numérique, et ce malgré mes connaissances limitées dans ce domaine, au début du projet.

Je voudrais ensuite adresser de très grands remerciements à mon troisième directeur, Bruno Blais, qui m'a suivi sur ce projet dès le début (nostalgie des skypes du vendredi matin), avant même qu'il ne soit nommé professeur. Je le remercie pour son aide, son soutien et pour avoir toujours cru en moi. Je ne le remercierai, ensuite, jamais assez, pour tout le temps qu'il a pris pour partager ses connaissances en matière de mécanique des fluides, que ce soit en lien ou non avec mon sujet, et ce quasiment chaque jour en deux ans. MERCI !

Je souhaiterais ensuite remercier Anya et Julianne pour leur aide précieuse et leurs idées novatrices qui m'ont grandement aidé sur différentes parties du projet.

Je ne serais ensuite pas arrivé à un tel résultat, sans une bonne ambiance de travail au quotidien. C'est pourquoi, je tiens à remercier chaleureusement mes amis de l'URPEI, que je côtoie depuis deux ans maintenant : Igor (alias Barnabé) pour nos débats quotidiens sur l'actualité sportive et pour m'avoir rebaptisé à plusieurs reprises, Jean-Mich pour tes histoires toujours plus rocambolesques, Christine pour ta bonne humeur et ton optimisme sans faille, Alexandre pour ton humour unique et Tiffany (la française du Pacifique) pour avoir redynamisé le bureau à ton arrivée. Mais aussi, à toutes les autres personnes que j'ai pues côtoyer durant ces deux ans à l'école : Antoine, Bing, Valérie, Rémi, Asher, Shuli, Shahab, Lucas, Tony, Ghazale... Remerciements tout particuliers à David Vidal pour ses précieux conseils et ses blagues qui me manqueront assurément.

La fin de cette maitrise marque également la fin de mon aventure au Canada. C'est pourquoi, je tiens également à remercier les personnes qui ont partagé ma vie ici et qui ont permis de faire de ces deux ans, une expérience inoubliable. Pour cela, je pense tout particulièrement à mes colocataires durant ces deux ans : Philou à jamais le numéro 1, Rémy le comédien aspirant à prendre sa place, Andrès canard officiel et exotisme de la coloc, Alexios la douceur incarnée et amateur de belles photographies, Lucos le dijonnais rentré trop tôt et légende du gofio, Mary pour son côté maniaque apprécié de tous, Bastouille le macgyver, Laurence la squatteuse, Simon le bodybuildeur, Saloua l'insomniaque, Allison la photographe, Corentin

le plongeur, Kevin le belge et Tom le philosophe. Ainsi, que nos deux colocs non-officiels préférés : Théo et Manon, pour nos débats interminables et Manon pour ton rire si particulier.

Je souhaiterais également remercier tous les membres du club de ski de fond avec qui j'ai partagé tant de fins de semaines sur les pistes et sentiers du Québec : Thibault, Noémie, Solen, Léo, William, Mathéo, Paul 1 2 3, Gauthier, Rosalie, Andréa, Kristina, Victor... Et, tout particulièrement Léa et Michel (mes préfs).

Je tenais aussi, à remercier Mélanie pour son soutien moral, pour toute l'aide qu'elle a pue m'apporter dans ce projet et pour m'avoir toujours soutenu dans ma démarche de partir de l'autre côté de l'Atlantique.

Enfin, mes plus vifs remerciements iront à mes parents et ma petite soeur qui m'ont toujours soutenu tout au long de ma scolarité qui s'achève aujourd'hui, et qui m'ont toujours donné l'opportunité de faire ce dont j'avais envie. Si j'ai pu venir faire cette maitrise à 6000km de Dijon, c'est avant tout grâce à eux.

RÉSUMÉ

Nous pouvons regretter aujourd'hui encore que la majorité des études portant sur le mélange solide-liquide se base sur des corrélations empiriques dont la précision n'a de cesse d'être remise en cause et dont les applications sont valides pour des cas de figures extrêmement précis. L'exemple le plus frappant est la corrélation de Zwietering publiée il y a plus de 60 ans maintenant, mais qui est encore au coeur de tous les débats. Nous pensions alors qu'il était plus facile, pour mélanger deux substances, d'agiter rapidement pour créer un maximum de turbulence. Cette idée, plutôt compréhensible, a donc mené à des centaines d'études de mélange solide-liquide sur le régime turbulent. Cependant, aujourd'hui, on peut noter de plus en plus d'applications industrielles en régime laminaire et avec des concentrations en particules plus élevées. La compréhension des phénomènes physiques, sous-jacents à de tels systèmes, demeure, cependant, encore très limitée. C'est donc dans cette optique que ce projet de maitrise s'inscrit, à travers le développement d'un modèle numérique robuste et précis pour l'étude de systèmes de mélange solide-liquide en milieux visqueux.

Nous pouvons noter qu'il existe déjà de nombreux modèles numériques pour simuler des opérations de mélange solide-liquide. Mais la majorité est basée sur des approches continues de type Euler-Euler, pour modéliser le fluide et les particules. Ceci limite grandement la précision des études, notamment sur la description de la dynamique des particules. Pour ce qui est des approches de type Euler-Lagrange, c'est le temps de calcul qui devient problématique, car le comportement de chaque particule est étudié individuellement. C'est pourquoi, pour conserver des temps de simulations raisonnables, les modèles développés jusqu'alors, sont limités à la modélisation de géométries relativement simples.

Cependant en régime laminaire, les géométries d'agitateurs les plus performantes, sont des géométries plutôt complexes, comme les rubans hélicoïdaux, par exemple. C'est pourquoi, dans la présente étude, nous nous sommes attachés au développement d'un modèle Euler-Lagrange pour la modélisation des opérations de mélange solide-liquide qui se veut le plus universel possible sans limitation sur les géométries d'agitateurs étudiables. Pour ce faire, une approche CFD-DEM, combinant la mécanique des fluides numérique (CFD) avec la méthode des éléments discrets (DEM), en référentiel tournant, a été choisie.

Faire une étude numérique en référentiel tournant est quelque chose de relativement commun en CFD ; mais ce ne l'est pas en dynamique granulaire. C'est pourquoi, dans toute la première partie de ce projet, nous avons développé un modèle DEM en référentiel tournant en accordant une grande importance à la compréhension de tous les enjeux impliqués par l'ajout des forces

centrifuges et de Coriolis. Cette dernière étant particulièrement intéressante car elle dépend de la vitesse des particules. Ce paramètre est relativement problématique avec les schémas d'intégration numérique classiquement utilisés en DEM, comme le schéma de Verlet vitesse ; schéma très intéressant pour ses propriétés symplectiques (c-à-d de conservation de l'énergie). Ainsi, à travers cette première partie, nous avons pu conclure qu'il était possible de faire une étude DEM en référentiel tournant mais que l'utilisation d'un schéma de Verlet vitesse n'est pas particulièrement justifié. En effet, l'ajout d'une force qui dépend de la vitesse, dégrade la précision à l'ordre 1 et fait perdre le caractère symplectique.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés au couplage de ce nouveau modèle DEM avec la mécanique des fluides. Pour ce faire, nous avons procédé de façon incrémentale en complexifiant le modèle CFD-DEM progressivement et en accordant une grande importance au processus de validation. Nous avons basé ce processus de validation sur l'étude d'un système de mélange avec une turbine à pâles inclinées dont de nombreux résultats expérimentaux et numériques sont disponibles dans la littérature. Au vu des excellents accords entre les résultats expérimentaux et ceux obtenus avec le modèle numérique, nous avons pu conclure que pour bien retranscrire la dynamique des interactions solide-liquide dans un référentiel tournant, un modèle CFD-DEM doit tenir compte de la fraction volumique dans le calcul de la force de trainée et de la viscosité. D'autre-part l'utilisation d'un couplage explicite entre les deux phases est nécessaire. Et enfin, la dynamique du fluide doit reposer sur les équations de Navier-Stokes non-moyennées, contrairement à ce qui est fait d'habitude, dans les études diphasiques de type solide-liquide.

Fort de ce nouveau modèle validé, nous avons ensuite dédié une partie à l'étude d'un système de mélange avec un double ruban hélicoïdal. Ce qui est complètement novateur en termes de modélisation numérique d'opérations de mélange solide-liquide.

En définitive, cette étude a permis, en premier lieux, de fournir un modèle CFD-DEM robuste en référentiel tournant adapté à tout type de géométrie, quelque soit leur complexité. Ce travail a également permis d'amener des connaissances supplémentaires sur les schémas d'intégrations symplectiques, couramment utilisé en DEM, notamment lorsque l'on ajoute des forces dépendant de la vitesse comme ce fut le cas dans ce projet avec la force de Coriolis.

Mots-clefs : Mélange solide-liquide - Régime laminaire - Mécanique des fluides numérique - Méthodes des éléments discrets - CFD-DEM - Schéma symplectique - Force de Coriolis

ABSTRACT

Solid-liquid mixing is a significant process that is critical to pharmaceutical, biomechanical, food processing and other industries. Despite the relevance of solid-liquid mixing applications, the physics governing the suspension of particles in agitated vessels is still poorly understood. This can lead to sub-optimal designs and important energy waste or even an incapacity to achieve the desired mixing state. Important criteria that characterize solid-liquid mixing, like the just-suspended speed (Njs) and the homogeneity of the suspension, are difficult to predict. Consequently, engineers often rely on correlations to design solid-liquid mixing vessels, like the Zwietering correlation which is the most famous. But if these correlation present good results in turbulent regime it is not the case for the laminar. And today more and more industrial process occures with viscous fluid. That's why, there is a need for more studies on solid-liquid mixing in laminar regime and, more particularly, for new simulation models to predict suspension dynamics. Therefore, this master project is dedicate to the development of a robust and accurate numerical model for the study of solid-liquid mixing systems in viscous environments.

Today the majority of the existing numerical model are based on continuous Euler-Euler approaches to model fluid and particles. This greatly limits the accuracy of studies, particularly on the transcription of particle dynamics. But the problematic of the Euler-Lagrange approach is the very important computational coast due to the resolution of each particle individually. That's why the different Euler-Lagrange model developed so far are only adaptated to simulate relatively simple geometry. However, complex geometries can be used to meet specific process requirements, in particular for the laminar regime. Thus, the goal of the present work is the development of an accurate and robust Euler-Lagrange numerical model based on CFD for the fluid dynamics and on the discrete element method (DEM) for the granular dynamics. This model should be adapted for close-clearance impellers used in viscous mixing. For this, the particularity of this work is to develop all this model in a rotating frame of reference.

To obtained the model different steps had to be complete. Thus, the present thesis is decomposed into two main part. First, we assess the DEM sub-model in a rotating frame of reference. This is not trivial, because it implies the addition of a velocity-dependent force related to the Coriolis effect. For DEM simulations, symplectics integrators are often use, due to their energy conservation property. Currently, the velocity Verlet scheme is one of the most commonly used. With this study we showed that additional velocity dependent

force leads to a degradation of the global order of the symplectic velocity Verlet integration scheme and, more importantly, to a loss of its ability to conserve energy.

Then we have coupled this new DEM model with the fluid dynamics. We made some difference simple test case to adapt and correct the model. As with any numerical work, validation was an essential element of this project. Our final model was validated against experimental data and numerical studies previously carried in our lab with a simple geometry: the pitched blade turbine. With these conclusive results we were able to conclude that to have a CFD-DEM model in non-inertial frame which is able to reproduce the different hydrodynamics phenomena of solid-liquid mixing operation we have to use the voidfraction in the calculation of the viscosity and the drag force, we have to use an explicit coupling between the two phases, and finally, we have to use the "classical" Naviers-Stokes equation instead of the volume averaged equations, usually used with this kind of diphasique problem.

To conclude this work, we have applied this model to a complex impeller geometry with the double helical ribbon, which is completely innovative in terms of numerical modeling of solid-liquid mixing operations.

In a nutshell, the result of this work is a robust CFD-DEM model in non-inertial frame adapted to close clearance impellers. As well as additional knowledge on the impact of velocity dependent force, such as the Coriolis and the Lorentz force, on symplectic integrator schemes commonly used in DEM.

Keywords: Solid-liquid mixing - Laminar regime - Computational fluid dynamics - Discrete element method - CFD-DEM - Symplectic scheme - Coriolis force

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS iii

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES TABLEAUX xii

LISTE DES FIGURES xiii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xix

LISTE DES ANNEXES xxi

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE 4

2.1 Introduction aux opérations de mélange 4

2.1.1 La mécanique des fluides et ses différents régimes 5

2.1.2 Les différents types d'agitateurs 8

2.1.3 Impact des paramètres géométriques sur l'écoulement dans un mélangeur 12

2.1.4 Analyse énergétique d'un système de mélange 14

2.2 Le mélange solide-liquide 16

2.2.1 Caractérisations des suspensions solides dans un liquide 16

2.2.2 Vitesse minimale de suspension complète $\boldsymbol{N_{js}}$ 17

2.2.3 Méthode de détermination expérimentale de $\boldsymbol{N_{js}}$ 18

2.2.4 Rhéologie 21

2.2.5 Interaction solide-liquide 26

2.3 Approches numériques pour l'étude de système diphasique de type solide-liquide 32

2.3.1 Les différentes échelles d'un système diphasique de type solide-liquide 32

2.3.2 Approches Euler - Euler appliquées aux mélanges solide-liquide . . . 35

2.3.3 Approches Euler - Lagrange appliquées aux mélanges solide-liquide . 36

2.4 La CFD-DEM : méthode et enjeux 38

2.4.1 Mécanique des fluides numérique (CFD) 38

2.4.2 La méthode des élements discrets (DEM) 42
2.4.3 Schémas numériques pour la résolution d'EDO : Application à la méthode des éléments discrets 46
2.4.4 CFD-DEM pour des applications solide-liquide 47
2.4.5 Conditions limites en mouvements 50
2.5 Synthèse et objectifs de recherche 53

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION 55
3.1 Description des logiciels utilisés 55
3.1.1 CFD : Open∇FOAM 55
3.1.2 DEM : LIGGGHTS 56
3.1.3 CFD-DEM : CFDEM 56
3.2 Organisation du mémoire 56

CHAPITRE 4 ARTICLE 1 : SIMULATION OF GRANULAR FLOW IN A ROTATING FRAME OF REFERENCE USING THE DISCRETE ELEMENT METHOD . . 59
4.1 Abstract 59
4.2 Introduction 59
4.3 Discrete Element Method 61
4.4 Non-inertial Frame of Reference 62
4.5 Symplectic Integration Scheme 64
4.6 Application to the Harmonic Oscillator 67
4.7 The Coriolis Force 71
4.8 DEM Test Case 73
4.9 Verification with Damping Forces 75
4.9.1 Verification with one particle 76
4.9.2 Verification with N particles 77
4.10 Computational Performance Study 82
4.11 Conclusion 82
4.12 Acknowledgements 83

CHAPITRE 5 DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE CFD-DEM EN RÉFÉRENTIEL NON-INERTIEL POUR DES APPLICATIONS AUX OPÉRATIONS DE MÉLANGE SOLIDE-LIQUIDE 84
5.1 Équations de la CFD-DEM 84
5.1.1 Équations régissant la dynamique des particules 84
5.1.2 Équations régissant la dynamique des fluides 85

5.2 Mise en place d'une expérience de CFD-DEM en référentiel tournant 85
5.3 Cas test 1 : Le couette cylindrique 86
5.3.1 Description du modèle CFD-DEM 88
5.3.2 Résultats et discussion 91
5.4 Cas test 2 : Cuve sans mélangeur 91
5.4.1 Description du modèle CFD-DEM 91
5.4.2 Résultats et discussion **N**°1 95
5.4.3 Résultats et discussion **N**°2 97
5.4.4 Résultats et discussion **N**°3 98
5.5 Cas test 3 : Validation et vérification du modèle en référentiel tournant avec un système de cuve agitée par une PBT 98
5.5.1 Description du modèle CFD-DEM 99
5.5.2 Description de la géométrie 99
5.5.3 Validation visuelle 101
5.5.4 Validation quantitative 102
5.6 Application au double ruban hélicoïdal 106
5.7 Résultats additionnels : Stratégie d'agglomération des particules 108
5.7.1 Masse équivalente 109
5.7.2 Masse équivalente et viscosité équivalente 111

CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE 114

CHAPITRE 7 CONCLUSION 117
7.1 Synthèse des travaux 117
7.2 Limitations de la solution proposée 118
7.3 Travaux futurs 119
7.4 Mot de la fin 119

RÉFÉRENCES 121

ANNEXES 136

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Différents paramètres intervenant dans une étude de mélange solide-liquide	5
Tableau 2.2	Puissance générée par un agitateur en fonction du régime d'écoulement	16
Tableau 2.3	Evolution du coefficient de trainée en fonction du nombre de Reynolds particulaire - adapté de [1, 2]	28
Table 4.1	Equations for the DEM model adapted from [3]	63
Table 4.2	Parameters for the hourglass simulation based on a previous study that investigated the behaviour of fine particles [4]	77
Tableau 5.1	Paramètres de simulation CFD-DEM pour le cas du couette cylindrique	89
Tableau 5.2	Modèle de forces CFD-DEM utilisées dans le cas du couette cylindrique	89
Tableau 5.3	Paramètre de simulation CFD-DEM pour le cas de la cuve sans mélangeur.	93
Tableau 5.4	Modèle de force CFD-DEM utilisé dans le cas de la cuve agitée avec une PBT	99
Tableau 5.5	Paramètres géométriques utilisés pour la simulation d'un mélangeur avec une PBT	100
Tableau 5.6	Comparaison de la dimension des cônes obtenus expérimentalement et avec différentes méthodes numériques pour différentes vitesses	104
Tableau 5.7	Paramètres géométriques utilisés pour la simulation d'un mélangeur avec un double ruban hélicoïdal	107

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 Illustration figurant sur la première de couverture du premier livre traitant de mélange connu à ce jour. 1

Figure 2.1 Illustration d'un flux d'air turbulent généré par un avion au décollage 7

Figure 2.2 Illustration du phénomène d'étirement-repliement. (a) Fluide au repos (b) Etirement du fluide après le premier passage de l'agitateur (c) Repliement du fluide (d) Illustration du fluide mélangé après N rotations 9

Figure 2.3 (a) Turbine à écoulement axial : Turbine marine (b) Turbine à écoulement mixte : Turbine à pâles inclinées (PBT) 9

Figure 2.4 Différentes turbines à écoulement radial (a) Turbine Rushton (b) Open Flat Blade (c) Backswept open 10

Figure 2.5 Différents agitateurs raclants (a) Ancre (b) MaxBlend Turbine (c) Double ruban hélicoïdal 11

Figure 2.6 Écoulements fluides pour différents types de turbines (a) Axial (b) Radial (c) Tangentiel (d) Double Ruban Hélicoïdal -inspiré et extrait de [5,6] 11

Figure 2.7 Illustration des différents paramètres géométriques pour un double ruban hélicoïdal - inspiré de [7] 12

Figure 2.8 Profil d'écoulement influencé par le dégagement au fond - extrait de [5] 13

Figure 2.9 Courbes de puissance pour différents agitateurs - extrait de [8] 15

Figure 2.10 Les différents types de suspension. (a) Suspension partielle (b) Suspension complète (c) Suspension uniforme - extrait de [9] 17

Figure 2.11 Illustration des profils de pression obtenus avec des agitateurs à écoulement axial et radial (a) et avec des agitateurs raclant (b) - extrait de [7,10]. 20

Figure 2.12 Catégorisation de la mécanique des milieux continus 21

Figure 2.13 Illustration de la déformation de cisaillement pour un cas de symétrie plane 22

Figure 2.14 Rhéogramme pour différent types de fluides 24

Figure 2.15 Viscosité réduite $\mu_r = \mu/\mu_0$, avec μ_0 la viscosité initiale du fluide, en fonction de la fraction volumique pour des particules de tailles comprises entre $0.1\mu m$ et $65\mu m$. Le trait plein représentant le modèle de Krieger-Dougherty - extrait de [11]. 25

Figure 2.16 Évolution du coefficient de trainée avec le nombre de Reynolds pour l'écoulement autour d'une sphère - extrait de [2]. 27
Figure 2.17 Évolution du profil d'écoulement autour d'une sphère - adaptée de [1] 29
Figure 2.18 Représentation des différentes échelles intervenant dans un système de mélange solide-liquide - inspirée de [12]. 33
Figure 2.19 Comparaison des courbes de fractions suspendues obtenues expérimentalement et numériquement avec une approche CFD-DEMs associée à différentes méthodes de mesures : (a) PGT (B) LSFA (C) DFA - extrait de [3]. 38
Figure 2.20 Illustration de la méthode des volumes finis en deux dimensions. . . . 40
Figure 2.21 Illustration des différentes étapes d'un pas de temps DEM 43
Figure 2.22 Illustration des principales différences entre des géométries que l'on peut considérer comme relativement simples et complexes (a) Turbine à pâle inclinée (b) Double ruban hélicoïdal 52
Figure 3.1 Décompositon des différentes étapes d'un pas de temps CFD-DEM avec la plateforme *CFDEM* 57
Figure 3.2 Organisation du présent mémoire 58
Figure 4.1 Illustration of the principle of the Discrete Element Method 61
Figure 4.2 Illustration of the Liouville-Poincaré invariant: $A^t = A^{t+\Delta t} = A^{t+2\Delta t}$. 65
Figure 4.3 Illustration of the symplectic property of an integration scheme. Deviation of the numerical energy from the theorical energy ($\Delta Energy = E_{th} - E_{num}$) for a constant time step $\delta t = 0.1$ with $w = 0.5$ - (a) Euler explicit scheme, (b) Runge-Kutta 2 scheme, (c) Runge-Kutta 4 scheme, (d) velocity Verlet scheme 70
Figure 4.4 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for the harmonic oscillator: order 4 for RK4, order 2 for RK2 and velocity Verlet, and order 1 for Euler explicit, which is highlighted by the slope "**s**". We can see that for the RK4 scheme we have reached machine precision for $\Delta t = 0.001$. 71
Figure 4.5 Classical velocity Verlet scheme with a velocity-dependent force . . . 71
Figure 4.6 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for the damped oscillator: order 4 for RK4, order 2 for RK2, order 1 for Euler explicit and unlike the theory, order 1 for velocity Verlet, which are highlighted by the slope "**s**". 72

Figure 4.7 Trajectory of a particle in the $x-y$ plane in a rotational frame without any forces except Coriolis and centrifugal forces. (a) $dt = 0.01$, (b) $dt = 0.0001$, (c) $dt =$ 1e−5, (d) $dt =$ 1e−6 74
Figure 4.8 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for a particle in a non-inertial rotating frame of reference: order 4 for RK4, order 2 for RK2, order 1 for explicit Euler, and order 1 for velocity Verlet which are indicated by the slope "**s**". 75
Figure 4.9 Trajectory of the particle in the two different frames of reference for a frame velocity of $20 rad/s$: (a) in the Eulerian frame and (b) in the Lagrangian frame 78
Figure 4.10 Motion of the particles during the revolution, of period $2T$, of an hourglass (30 RPM) - (a) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Lagrangian frame (b) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Eulerian frame (c) Simulated in the Eulerian frame and illustrated in the Eulerian frame 79
Figure 4.11 Motion of the particles during the revolution, of period $2T$, of an hourglass (120 RPM) - (a) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Lagrangian frame (b) Simulated inthe Lagrangian frame and illustrated in the Eulerian frame (c) Simulated in the Eulerian frame and illustrated in the Eulerian frame 80
Figure 4.12 Comparison of the mass of particles at the bottom of the hourglass in the two different frames of reference at a frame velocity of 30 rpm ($R_o = 0.5$). The vertical bar shows the end of the rotation phase (t=T). 81
Figure 4.13 Comparison of the mass of particles at the bottom of the hourglass in the two different frames of reference at a frame velocity of 120 rpm ($R_o = 0$). The vertical bar shows the end of the rotation phase (t=T). 81
Figure 4.14 Distribution of the CPU in the x-y direction. Only one CPU was used in the z direction. 82
Figure 5.1 Illustration des différentes étapes préliminaires d'une expérience de CFD-DEM en référentiel tournant 87
Figure 5.2 Illustration des conditions limites imposées dans le référentiel Eulérien (a) et Lagrangien (b) pour le cas du couette cylindrique 88
Figure 5.3 Simulation d'une particule dans un écoulement de type couette cylindrique - (a) Maillage employé (b) Illustration de la force exercée par la particule sur le fluide (K_{pf}) 90

Figure 5.4 Trajectoire de la particule vue depuis le référentiel Eulérien (a) et depuis le référentiel Lagrangien (b) 92
Figure 5.5 Illustration de la méthode de lissage diffusif isotrope - (a) Début du pas de temps CFD (b) Résultat obtenu sans lissage (c) Résultat obtenu en appliquant la méthode de lissage. Plus le paramètre λ est élevé, plus la distribution de la force dans la cellule 1 considérée, sera répartie sur les cellules voisines. 95
Figure 5.6 Évolution du lit de particule avec une stratégie de couplage implicite entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 10s$. On remarquera que le lit de particule ne demeure pas stable au niveau du bord de la cuve. 95
Figure 5.7 Illustration de l'impact du maillage sur la différence de vitesse $\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f$. 96
Figure 5.8 Comparaison de la composante U_x de la vitesse des particules simulée dans le référentiel Lagrangien et ramenée dans le référentiel Eulérien avec un couplage implicite (a) et explicite (b). 97
Figure 5.9 Évolution du lit de particules avec une stratégie de couplage explicite entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 10s$. On remarquera que le lit de particule ne demeure pas stable au centre de la cuve. 97
Figure 5.10 Évolution du lit de particules avec une stratégie de couplage explicite et un solveur CFD basé sur les équations de Navier-Stokes non-moyennées entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 60s$, après 250 tours. 98
Figure 5.11 Géométrie utilisée pour simuler une opération de mélange solide-liquide avec une PBT - (a) Différents paramètres (b) Vue de coupe du maillage employé 100
Figure 5.12 Vue en coupe dans le plan $y-z$ des composantes axiales (a) et radiales (b) de la vitesse du fluide, ramenées dans le référentiel Eulérien pour une vitesse d'agitation de 450RPM 101
Figure 5.13 Vue en coupe dans le plan $y-z$ de la fraction de vide, en régime permanent, pour différentes vitesses d'agitation - (a) 250RPM, (b) 350RPM, (c) 450RPM 102
Figure 5.14 Illustration du comportement des particules obtenu pour différentes vitesses d'agitation avec : (a) un modèle CFD-DEM utilisant la méthode des conditions immergées, (b) avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant, (c) de façon expérimentale. 103
Figure 5.15 Comparaison des courbes de puissances obtenues expérimentalement et numériquement avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant (échelle log-log). 104

Figure 5.16 Illustration de la méthode LSFA pour différents cas : (a) La particule est considérée comme suspendue (b) La particule n'est pas considérée comme suspendue (c) La particule est considérée comme suspendue malgré le fait qu'entre les positions initiales et finales il n'y ait pas une distance de Δz_{js} - extrait de [3] 105
Figure 5.17 Comparaison des courbes de fractions suspendues obtenues de façon expérimentale [10] et de façon numérique avec un modèle CFD-DEM basé sur la méthode des conditions immergées [3] et avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant. 106
Figure 5.18 Géométrie utilisée pour simuler une opération de mélange solide-liquide avec un double ruban hélicoïdal - (a) Différents paramètres (b)Vu de coupe du maillage employé 107
Figure 5.19 Vue en coupe dans le plan $y - z$ de la magnitude de la vitesse du fluide dans le référentiel Eulérien (a) ainsi que de ses composantes radiales (b) et axiales (c) pour une vitesse d'agitation de 200RPM 108
Figure 5.20 Vue en coupe dans le plan $y - z$ de la fraction de vide, en régime permanent, pour différentes vitesses d'agitation - (a) 10RPM, (b) 50RPM, (c) 110RPM, (d) 150RPM, (e) 200RPM 109
Figure 5.21 Courbe de fraction suspendue obtenue avec un double ruban hélicoïdal 110
Figure 5.22 Illustration du principe de la stratégie d'agglomération des particules 110
Figure 5.23 Comparaison des résultats obtenus précédemment (Di Felice Lagrangien) avec les résultats obtenus en utilisant une stratégie d'agglomération des particules utilisant une masse équivalente (Coarse graining 1) et une viscosité équivalente (Coarse graining 2). Pour les mesures nous utilisons la méthode LSFA avec les critéres $\Delta z_{js} = d_p = 3mm$ et $\Delta t_{js} = 2sec.$ 112
Figure A.1 Illustration du cas test utilisé ainsi que du maillage employé identiquement pour tous les solveurs testés : $n_x = n_y = 30$ & $n_z = 1$ 136
Figure A.2 Solution stationnaire obtenue pour un couette cylindrique avec rotation du mur extérieur à 250RPM. (a) Pression (b) Vitesse radiale 138
Figure A.3 Comparaison des solutions en pression et vitesse obtenues pour différents solveurs avec la solution analytique. 138
Figure B.1 Illustration d'un maillage non-structuré utilisé pour la modélisation d'une cuve agitée par un double ruban hélicoïdal - (a) 50k cellules (b) 75k cellules (c) 150k cellules (d) 1000k cellules 140

Figure B.2 Courbes de puissances obtenues avec une cuve agitée par un double ruban hélicoïdal pour différentes tailles de maillages 140
Figure B.3 Évolution de K_p avec le nombre de Reynolds pour un maillage non-structuré de 75k cellules 141
Figure B.4 Évolution de la pression en fond de cuve en fonction de la vitesse d'agitation d'un ruban hélicoïdal 142

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Abréviations

URPEI	Unité de Recherche en Procédé d'Écoulement Industriel
DEM	Discret Element Method
CFD	Computational Fluid Dynamic
SM	Sliding Mesh
IB	Immersed Boundaries
VV	Velocity Verlet
LSFA	Lagrangian Suspended Fraction Analysis
PGT	Pressure Gauge technique
DFA	Decorrelated Fraction Analysis
LIGGGHTS	LAMMPS Improved for General Geometry and Granular Heat Transfer Simulations
SRF	Single Reference Frame
MRF	Multiple Reference Frame
VANS	Volume Average Navier-Stokes
FVM	Finite Volume Method
PBT	Pitched Blade Turbine
DHR	Double Helical Ribbon
TFM	Two Fluid Model
TPM	Two Phase Model
EDP	Équation aux Dérivées Partielles
EDO	Équation Différentielle Ordinaire

Symboles

$\boldsymbol{u}_f$	Vitesse du fluide
$\boldsymbol{u}_p$	Vitesse d'une particule
$\mathbf{g}$	Accélération de la pesanteur
T	Diamètre de la cuve
D	Diamètre de l'agitateur
C	Dégagement au fond
H	Hauteur de liquide
ϵ_f	Fraction de fluide
ϵ_p	Fraction de particule

ϵ_p^*	Fraction d'empilement de particules maximale
d_p	Diamètre des particules
C_D	Coefficient de trainée
N	Vitesse d'agitation
N_{js}	Vitesse minimale de suspension complète
$\mathbf{\Omega}$	Vecteur instantané de rotation d'un référentiel
P	Pression
P_f	Puissance dissipée par la fluide
V_t	Vitesse de sédimentation
ρ_f	Densité du fluide
ρ_p	Densité des particules
μ_f	Viscosité dynamique du fluide
ν_f	Viscosité cinématique du fluide

Nombres adimensionnels

Re	Nombre de Reynolds
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
Np	Nombre de puissance
Fr	Nombre de Froude
St	Nombre de Stokes
Ar	Nombre d'Archimède
Ro	Nombre de Rossby

LISTE DES ANNEXES

Annexe A Vérification de l'implémentation des différents solveurs utilisés 136
Annexe B Analyse de maillage et résultats monophasiques 139

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Le mélange ! Cette opération que l'on retrouve dans notre quotidien, que ce soit au moment de sucrer son café, de mélanger ses céréales ou encore de se brosser les dents, est également un procédé largement utilisé aujourd'hui dans de nombreux domaines industriels, comme l'agroalimentaire, le domaine pharmaceutique ou encore celui des cosmétiques. Cependant, malgré son apparente simplicité, ce procédé présente de nombreux enjeux. Et il s'avère d'autant plus important, que le plus souvent, c'est cette opération de mélange qui limite l'efficacité d'un processus. D'après [13], on estime aujourd'hui les pertes dues à une mauvaise utilisation de ce procédé, à environ 10 milliards de dollars, uniquement pour les industries Nord-Américaines. Ce chiffre est d'autant plus troublant, que l'étude du mélange n'est pas une activité de recherche récente. En effet, on estime à 1556, la publication du premier ouvrage traitant de ce sujet, De Re Metallica, Georgius Agricola (Figure 1.1).

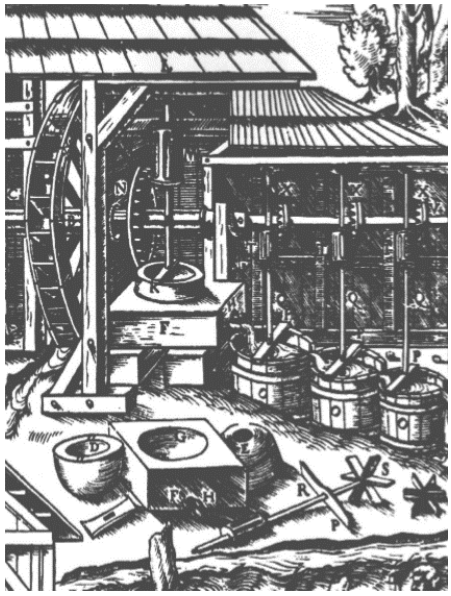

Figure 1.1 Illustration figurant sur la première de couverture du premier livre traitant de mélange connu à ce jour.

A ce stade, le lecteur non-initié aura donc l'image d'un procédé extrêmement simple, utilisé tous les jours dans notre quotidien, étudié depuis le $XVI^{ème}$ siècle mais qui, pourtant, génère des pertes de plusieurs milliards de dollars dans l'industrie...

Il s'avère donc nécessaire de reprendre la genèse et la description, de façon précise et rigou-

reuse, de ce procédé que l'on nomme mélange. Tout d'abord, nous voudrions attirer l'attention du lecteur sur la distinction entre agitation et mélange. Si la première ne nécessite la présence que d'une seule phase, on ne pourra parler de mélange qu'en présence de deux phases bien distinctes, qu'elles soient ou non de même natures. Ensuite, si nous devions décrire simplement ce que signifie, mélanger, nous dirions, que c'est avant tout, un processus de « *réduction des différences* ». Ainsi, avec une telle opération, on cherche à réduire les inhomogénéités, qu'elles soient de concentration, de répartition spatiale ou encore de température. Cependant, le mélange parfait n'existe pas. Il sera toujours relatif à l'échelle d'observation. Ainsi, à l'échelle macroscopique, on pourra considérer le système comme mélangé, alors, qu'en réalité, il ne le sera pas du tout à l'échelle microscopique... De plus, en fonction des différentes phases mélangées, les approches seront complètement différentes. Effectivement, en présence de deux liquides miscibles, on cherchera avant tout à homogénéiser le milieu alors qu'avec deux liquides immiscibles on parlera de dispersions ou d'émulsions. Pour le mélange solide-liquide, la discussion sera tournée vers la suspension des particules pour assurer un transfert de masse optimal, alors que pour un mélange liquide-gaz, on cherchera une dispersion maximale, comme c'est le cas par exemple, dans des opérations de fermentation ou d'oxygénation.

Cette description, bien que succincte, donne un aperçu sur la difficulté à appréhender le mélange. Et, elle explique pourquoi les différents phénomènes physiques sous-jacents, sont encore un sujet actif de recherche.

Pour ce qui est de la présente étude, nous nous plaçons dans le contexte des mélanges biphasiques de type solide-liquide. Nous comprenons que de tels systèmes présentent de nombreux enjeux, dûs à la présence de deux phases immiscibles et de natures distinctes. En effet, l'hydrodynamique est très difficile à prévoir et va dépendre de nombreux paramètres, tels que la quantité de particules, leurs tailles, le type de fluide, la rhéologie globale ou encore la géométrie du système. Ce dernier joue un rôle particulièrement intéressant en mélange solide-liquide, car la majorité de ces opérations se font en cuve mécaniquement agitée. Ceci implique que l'agitateur aura une grande influence sur l'efficacité globale du procédé. Le choix du type d'agitateur est donc un élément clef mais difficile à appréhender. En effet, en fonction de sa forme, sa taille, sa position, l'écoulement généré pourra être axial, radial, tangentiel ou même une combinaison de ceux-ci. Un mauvais choix d'agitateur pourra donc s'avérer très pénalisant quant à la finalité d'une opération de mélange solide-liquide. L'objectif final étant de suspendre complètement les particules pour assurer un transfert de masse optimal. A noter que, pour certaines applications spécifiques, en plus de la mise en suspension, un mélange homogène est nécessaire comme cela peut être le cas dans le domaine pharmaceutique. Et cela pour des raisons évidentes. Ainsi, le critère le plus utilisé pour décrire une opération de mélange solide-liquide, est la *vitesse minimale de suspension complète*. Zwietering présenta

la première corrélation empirique, permettant d'approximer cette vitesse, en 1958 ; date qui marquera l'intensification des recherches sur ce sujet. Ainsi, depuis maintenant plus de 60 ans, nous recensons des centaines d'études expérimentales, mais aussi numériques, cherchant à caractériser, décrire et comprendre, au mieux, ce procédé complexe. Cependant, on peut regretter que la majorité de ces recherches soient tournées vers les mêmes problématiques. À savoir l'étude du régime turbulent pour des solutions diluées. Ceci est d'autant plus regrettable, que de plus en plus d'applications industrielles utilisent des fluides visqueux, avec des concentrations de particules importantes. Le manque d'informations sur ce type de régime ne permet pas d'opérer dans les conditions optimales de mélange. Ce qui a pour conséquences, des pertes énergétiques et économiques considérables.

C'est dans cette optique, que depuis quelques années, l'URPEI (*Unité de recherche en procédé d'écoulement industriel*) mène des activités de recherche sur le sujet du mélange solide-liquide. Plusieurs études expérimentales et numériques ont déjà pu être menées. Et, c'est fort de ces connaissances déjà développées et dans la continuité des projets antérieurs, que ce projet de maitrise s'inscrit pleinement. Avec comme objectif de développer un modèle numérique robuste permettant de simuler de façon précise les opérations de mélange solide-liquide en régime laminaire.

Pour ce faire, nous nous appliquerons, en premier lieu, à présenter une revue détaillée et précise, sur les connaissances actuelles en matière de mélange solide-liquide ainsi que sur les différentes approches numériques qui traitent des problèmes diphasiques. Puis, au vu de cette analyse, nous définirons différents objectifs intermédiaires, lesquels permettront de donner une certaine structure et une logique à la construction de ce projet. Ensuite, nous nous attacherons à décrire, au mieux, les différentes problématiques rencontrées ainsi que les différentes solutions apportées. Enfin, pour conclure, nous résumerons les différentes contributions scientifiques apportées par cette étude, tout en critiquant le travail réalisé et en donnant différentes pistes d'explorations futures.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

L'objectif de la présente étude est le développement d'un nouveau modèle numérique pour l'étude du mélange solide-liquide en régime laminaire. Nous comprenons donc que différentes thématiques doivent être abordées dans cette revue de la littérature. Premièrement, il semble naturel et essentiel d'accorder une large partie de cette revue au mélange lui même et plus particulièrement au mélange solide-liquide. En effet, bien comprendre la physique avec tout ce que cela implique comme la rhéologie, l'hydrodynamique des suspensions, le régime d'étude ou encore l'influence des différents paramètres géométriques, est un élément essentiel avant d'envisager toute étude numérique.

Ensuite, une seconde partie sera largement dédiée à l'approche numérique des systèmes multiphasiques de type solide-liquide. Tout d'abord, nous nous attacherons à donner une revue générale des différentes méthodes existantes pour traiter des problèmes d'interaction solide-liquide. Puis nous nous focaliserons plus particulièrement sur une de ces méthodes qui utilise une approche de type Euler-Lagrange : la CFD-DEM. Nous accorderons une place importante à la description de cette méthode numérique relativement novatrice ainsi qu'à ses différents enjeux comme les schémas d'intégrations numériques ou encore le traitement des conditions limites de géométrie en rotation comme c'est le cas dans les systèmes de mélange.

Mais avant toute chose, nous voudrions commencer cette étude de façon très simple en listant tous les paramètres intervenant dans une étude de mélange solide-liquide (Tableau 2.1). Nous pouvons compter 9 paramètres dont 8 ayant une dimension. De plus, l'ensemble de ces variables physiques peuvent être décrites avec seulement 3 unités fondamentales que sont la masse, la longueur et le temps. En s'appuyant sur le théorème de Vaschy-Buckingham [14], nous pouvons alors décrire une expérience de mélange solide-liquide avec 5 nombres adimensionnels. Ces nombres adimensionnels nous serviront de fils conducteurs tout au long de la description de la physique des mélanges solide-liquide.

2.1 Introduction aux opérations de mélange

Pour commencer cette étude, il semble intéressant et nécessaire d'avoir une vue d'ensemble sur ce qu'est une opération de mélange. C'est l'objet de cette première section dans laquelle sont abordés les concepts généraux liés à ce procédé.

Paramètre	Symbole	Unité
Vitesse d'agitation	N	$tour/s$
Diamètre de l'agitateur	D	m
Masse volumique du fluide	ρ_f	kg/m^3
Puissance dissipée par le fluide	P_f	$kg.m^2/s^3$
Accélération de la pesanteur	g	m/s^2
Viscosité dynamique	μ_f	$kg/m/s$
Diamètre des particules	d_p	m
Masse volumique des particules	ρ_p	kg/m^3
Fraction volumique de solide	ϵ_p	()

Tableau 2.1 Différents paramètres intervenant dans une étude de mélange solide-liquide

2.1.1 La mécanique des fluides et ses différents régimes

Pour s'assurer de la bonne exécution d'une opération de mélange, un des éléments le plus important à comprendre et observer, est son hydrodynamique. C'est pourquoi nous nous devons de commencer par rappeler les équations qui régissent la physique des écoulements : les équations de Navier-Stokes. Dans toute la suite, nous utiliserons les notations utilisées dans [15]. Ainsi les équations de continuité, de conservation de la quantité de mouvement et d'énergie sont données par :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}) = 0 \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial \rho_f \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho_f \mathbf{g} \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial \rho_f e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (p\mathbf{u}) - \tau : \nabla \boldsymbol{u} + \rho_f \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{q} \tag{2.3}$$

Avec $\mathbf{u}$ le vecteur vitesse, p la pression, $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses, e l'énergie interne du système d'étude et $\mathbf{q}$ le le flux de chaleur thermique par conduction et radiation. Dans le cas de fluide parfait i.e., de viscosité négligeable, le tenseur des contraintes visqueuses est nulle mais ceci reste un cas limité et dans le cas général le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit sous la forme :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_f(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t) + \mu'(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \tag{2.4}$$

Avec μ la viscosité dynamique et μ' la seconde viscosité et $\mathbf{I}$ le tenseur identité. Le premier terme correspond au tenseur de déformation dû au cisaillement entre les différentes couches d'un fluide visqueux.

En regardant plus attentivement ces équations, on devine 6 inconnues : la masse volumique du fluide, la pression, la vitesse dans les 3 directions spatiales et l'énergie interne. Mais on note seulement 5 équations. On comprend donc qu'une $6^{ème}$ équation est nécessaire. C'est pourquoi, pour compléter les équations de Navier-Stokes, on utilise toujours une équation d'état dont la plus connue est sans doute l'équation des gaz parfaits $PV = nRT$. Cependant, lorsque l'on est en présence de fluide plus complexe, il n'existe pas de relation aussi simple. C'est pourquoi, il est souvent fait l'hypothèse forte de considérer les fluides (souvent les liquides) avec une densité constante menant à la très simple équation d'état :

$$\rho_f = cst \tag{2.5}$$

Finalement, on obtient les équations de Navier-Stokes incompressibles avec viscosité constante.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{2.6}$$

$$\rho_f \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_f \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu_f \Delta \mathbf{u} + \rho_f \mathbf{g} \tag{2.7}$$

Ces équations nous permettent de calculer le champ de vitesse du fluide. Pour ce qui est de la pression (qui est aussi un paramètre essentiel en mécanique des fluides), elle sera calculée directement avec une équation qui n'est autre que la divergence de l'équation de conservation de la quantité de mouvement 2.7.

Après cette brève introduction générale à la mécanique des fluides, il s'agit maintenant de segmenter l'étude de ce vaste sujet. En effet, lorsque l'on commence une étude en mécanique des fluides, l'une des premières questions que l'on se doit de poser, est dans quel régime nous plaçons-nous ? Pour cela, il s'agit de comparer l'importance relative des forces dissipatives et des forces inertielles. En d'autres termes il s'agit de comparer l'importance relative du terme d'advection (terme non linéaire de 2.7) et du terme diffusif (laplacien de 2.7) dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. C'est alors que nous introduisons le premier nombre adimensionel : le célèbre nombre de Reynolds apparu en 1883 avec les travaux d'Osborne Reynolds. Dans le cadre particulier de cuves agitées, celui-ci se présente sous la forme :

$$Re = \frac{\rho_f N D^2}{\mu_f} \tag{2.8}$$

Nous pouvons distinguer trois types de régimes en fonction de la valeur du nombre de Reynolds.

Le régime turbulent

Le régime turbulent est effectif pour des nombres de Reynolds élevés et c'est sans doute ce que nous pouvons considérer comme le régime d'écoulement fluide le plus commun dans notre quotidien. En effet, lorsque nous ouvrons un robinet ou même lorsque nous respirons, nous engendrons un écoulement turbulent. Ce type d'écoulement se caractérise par une prédominance des forces inertielles sur les forces visqueuses. Ce qui va mener à des fluctuations spatiales du champ de vitesse sur des tailles caractéristiques très variées. Cette variation implique la création de tourbillons au sein même de l'écoulement. Ceci amène une propriété importante des écoulements turbulents à savoir que ce sont des écoulements rotationels (Figure 2.1). Cette propriété est comprise depuis très longtemps comme en témoigne certains croquis de Leonard de Vinci datant du XVème siècle. Nous comprenons que ces irrégularités et ce caractère tourbillonnant de l'écoulement présentent des caractéristiques très intéressantes lorsque l'on veut faire du mélange. Ce qui explique le très grand nombre d'études menées jusqu'alors en régime turbulent. Mais nous comprenons aussi que cette physique multi-échelle caractéristique de ce type d'écoulement, implique de nombreux défis quant à sa compréhension. C'est pourquoi, aujourd'hui encore la turbulence reste un sujet d'étude très actif.

Figure 2.1 Illustration d'un flux d'air turbulent généré par un avion au décollage

Le régime transitoire

Le régime transitoire est effectif pour des nombres de Reynolds intermédiaires. C'est sûrement le régime le moins bien compris actuellement. En effet, les effets inertiels et visqueux ont tous les deux une influence, sans qu'il y ait de prédominance de l'un ou l'autre. Cette incompréhension n'incite pas à mener des expériences de mélange dans cette zone de Reynolds. C'est pourquoi, nous ne développerons pas d'avantage ces types d'écoulement.

Le régime laminaire

Le régime laminaire est quant à lui effectif pour de faibles valeurs de nombres de Reynolds. Ce qui signifie que c'est le phénomène diffusif qui est dominant dans le système. Le plus souvent, ce régime est la conséquence de fluides avec de forte viscosités. Nous comprenons que, mélanger un fluide très visqueux, présente un réel défi et la littérature sur l'étude de tel régime reste très pauvre comparativement au régime turbulent. La principale difficulté réside dans le fait qu'en régime laminaire la physique est dominée par des phénomènes linéaires et auto-adjoints, et des champs de vitesses qui fluctuent peu dans le temps. La condition pour pouvoir obtenir un mélange efficace en régime laminaire, est donc que l'agitateur, par son mouvement, génère des structures chaotiques au sein même de la cuve. Dans une cuve agitée périodiquement, cela se manifeste par un phénomène d'étirement-repliement [16, 17] appelé « transformation de boulanger », en référence à l'action de pétrissage de la pâte. Ainsi, au fur et à mesure du passage de l'agitateur, les différentes parties du fluide s'étirent et se superposent augmentant la surface de contact entre ces différentes parties (Figure 2.2) ; ce qui fini par aboutir à un fluide mélangé.

Dans le cas plus particulier des mélanges solides-liquides, les applications industrielles aux régimes laminaires sont encore plus pertinentes. En effet, au delà de la viscosité du fluide, il peut être nécessaire d'avoir de faibles vitesses d'agitation pour ne pas dégrader les particules solides mélangées comme cela peut être le cas par exemple dans l'industrie pharmaceutique. Malgré cela, les études sur ce type de régime restent limitées.

2.1.2 Les différents types d'agitateurs

Un écoulement peut se caractériser par son régime, comme nous venons de le voir ; mais il est aussi caractérisé par sa direction. Cette dernière propriété est fortement liée au type d'agitateur employé. On en dénote plusieurs centaines [8], chacun présentant des avantages et des inconvénients en fonction de son domaine d'application. On se limitera ici à une classification en trois catégories distinctes :

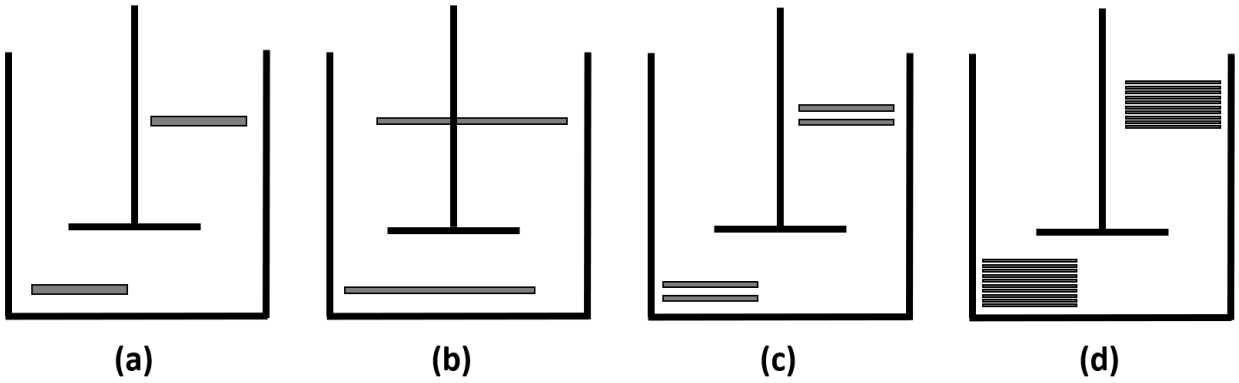

Figure 2.2 Illustration du phénomène d'étirement-repliement. (a) Fluide au repos (b) Etirement du fluide après le premier passage de l'agitateur (c) Repliement du fluide (d) Illustration du fluide mélangé après N rotations

Agitateur à écoulement axial

Les agitateurs à écoulement axial sont principalement utilisés avec des fluides peu visqueux donc pour des régimes turbulents ou transitoires. L'exemple le plus simple de mélangeur axial n'est autre que la turbine d'un bateau. La Figure 2.3 illustre différente turbine à écoulement axial.

Figure 2.3 (a) Turbine à écoulement axial : Turbine marine (b) Turbine à écoulement mixte : Turbine à pâles inclinées (PBT)

L'hydrodynamique engendrée par de tel agitateur reste relativement simple puisque ne présentent qu'une seule boucle de recirculation (Figure 2.6). Il est intéressant de noter que le sens de rotation va avoir des effets complètement différents. En effet, dans un sens ou dans l'autre, il y aura un pompage soit vers le haut soit vers le bas, changeant ainsi le sens de circulation. Ce type de mélangeur présente des caractéristiques intéressantes pour les mé-

langes polyphasiques comme pour le mélange de deux fluides, le mélange de particules dans un fluide ou encore la propagation de gaz dans un liquide [8]. Jafari et *al* [18] ont même montré que les agitateurs à écoulement axials sont les plus favorables pour les suspensions solides. Pour faire la transition avec la prochaine catégorie nous pouvons parler de l'agitateur à pâles inclinées (Pitched Blade Turbine) dont le flux généré va présenter des composantes principalement axiales mais aussi des composantes radiales.

Agitateur à écoulement radial

Un autre type de turbine générant des écoulements plus complexes sont les agitateurs à écoulement radial (Figure 2.4). Grâce à sa double boucle de recirculation (Figure 2.6), ces

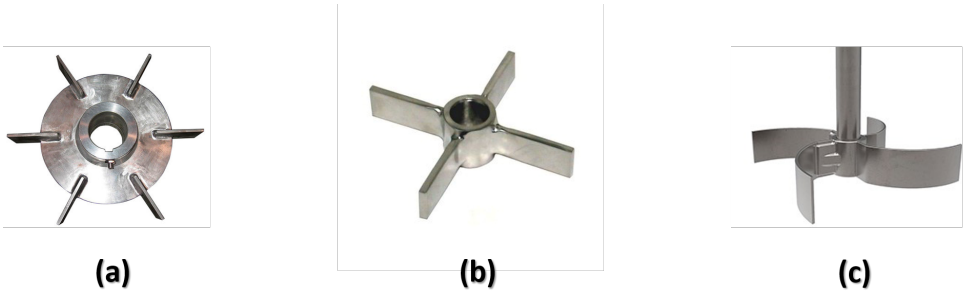

Figure 2.4 Différentes turbines à écoulement radial (a) Turbine Rushton (b) Open Flat Blade (c) Backswept open

types d'agitateurs présentent un caractère très intéressant lorsque l'on a besoin d'apporter beaucoup d'énergie à notre système avec des vitesses de rotation élevées. Leur domaine d'application est donc plutôt destiné aux régimes turbulents. De plus, avec ce type de mélangeur, la contrainte de cisaillement est bien plus importante que pour les agitateurs axiaux ; mais le pompage généré est bien inférieur. On les utilise donc plutôt pour des mélanges monophasiques, liquide-liquide ou encore gaz-liquide [8].

Agitateur à écoulement tangentiel

Enfin, on dénote un dernier type d'agitateur avec les mobiles à écoulement tangentiel (Figure 2.5). Ces type d'agitateurs ont souvent la propriété d'être raclants car ils tournent très proche du bord permettant ainsi d'éviter toute zone morte dans la cuve. Leur application se porte donc très bien à des milieux très visqueux [19]. Parmi les géométries les plus connues, nous pouvons citer les ancres ou les turbines maxblend. L'hydrodynamique générée par de tels

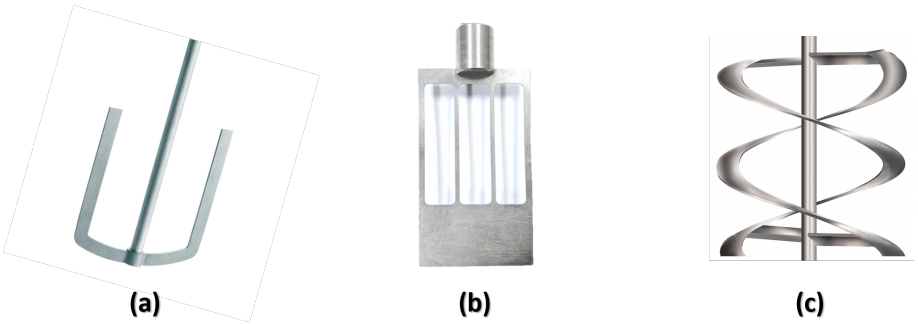

Figure 2.5 Différents agitateurs raclants (a) Ancre (b) MaxBlend Turbine (c) Double ruban hélicoïdal

agitateurs est simplement un écoulement tangentiel sur toute la hauteur de la cuve (Figure 2.6).

Dans cette catégorie des agitateurs raclants, nous pouvons également citer les rubans hélicoïdaux qui génèrent des flux beaucoup plus complexes, et non plus seulement tangentiels. Ainsi, en plus du comportement tangentiel, les flux générés ont une composante axiale (Figure 2.6). Ce type d'agitateur est considéré comme l'un des plus efficaces pour des suspensions solide-liquide en milieux visqueux [2].

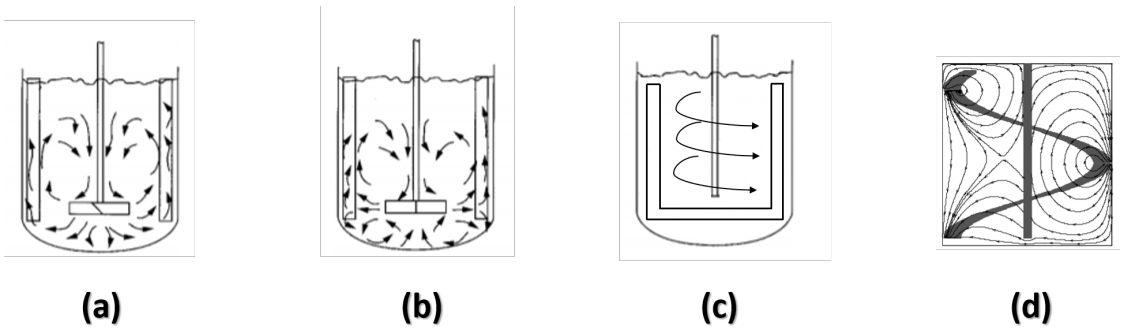

Figure 2.6 Écoulements fluides pour différents types de turbines (a) Axial (b) Radial (c) Tangentiel (d) Double Ruban Hélicoïdal -inspiré et extrait de [5, 6]

2.1.3 Impact des paramètres géométriques sur l'écoulement dans un mélangeur

Géométrie globale d'un mélangeur

Pour en finir avec la description des écoulements générés dans une cuve agitée, il s'agit maintenant de décrire l'impact de la géométrie globale d'un système de mélange. Ainsi, nous commençons ici par décrire, de façon précise, les différents paramètres de la géométrie. Bien évidemment, cela va dépendre des différents types de mélangeurs utilisés. Nous pouvons néanmoins retenir certains paramètres que l'on retrouve très communément, comme le dégagement au fond (C), le diamètre de cuve (T) et de l'agitateur (D), la hauteur de liquide (H) ou encore l'écart au bord (E). Nous retrouvons une illustration de ces paramètres dans le cas particulier d'un double ruban hélicoïdal à la Figure 2.7.

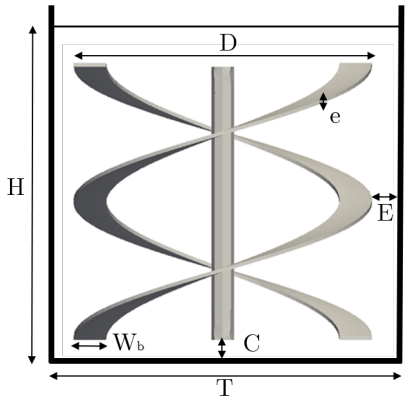

Figure 2.7 Illustration des différents paramètres géométriques pour un double ruban hélicoïdal - inspiré de [7]

Même si la forme générale de l'écoulement est principalement la conséquence du type d'agitateur employé, nous allons voir que ces différents paramètres géométriques peuvent eux-aussi avoir une grande influence.

Diamètre de l'agitateur

La taille d'un agitateur est un paramètre important. En effet, plus le diamètre est élevé, plus le volume balayé par l'agitateur est important et donc l'énergie conférée au fluide également. C'est ainsi que peuvent être générées des surconsommations de puissance [20]. De plus, le choix d'un bon diamètre est essentiel pour avoir le pompage désiré. Enfin, il a été observé que le choix même du diamètre pouvait avoir un impact sur le type d'écoulement généré. En effet, une turbine à écoulement axial, voit son écoulement devenir radial avec une augmentation

de son diamètre [21]. Ayranci et *al* [22] ont quant à eux, montré que le choix du diamètre doit être fonction du régime d'écoulement, notamment pour des applications au mélange solide-liquide.

Dégagement au fond

La position de l'agitateur par rapport au fond de la cuve est l'autre paramètre géométrique qui a une grande influence sur l'efficacité du mélange. Ce paramètre fut très largement étudié et plusieurs conclusions ont pu être faites. Par exemple, pour un agitateur trop près du fond, un écoulement peut devenir radial malgré l'utilisation d'un agitateur à écoulement axial [23] (Figure 2.8).

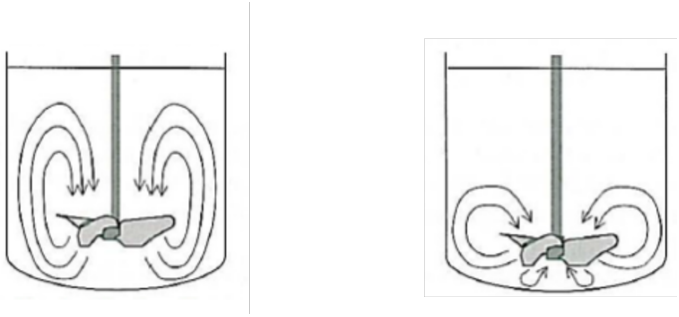

Figure 2.8 Profil d'écoulement influencé par le dégagement au fond - extrait de [5]

Montante et *al* [24, 25], ont quant à eux montré l'effet inverse. À savoir, un comportement axial pour une turbine à écoulement radial. Comme le montre le passage à une seule boucle de recirculation avec une turbine Rushton pour un dégagement au fond plus important. De plus, pour des applications au mélange solide-liquide, ce paramètre est essentiel. En effet, un dégagement au fond trop important rend la suspension de particules plus difficile. Ceci est expliqué par une réduction de l'énergie dissipée dans le lit de particules et une modification du profil d'écoulement [26–28]. Jafari et *al* [29] et Blais et *al* [30] ont, quant à eux, montré qu'il est possible de suspendre des particules avec un faible dégagement au fond mais le mélange obtenu ne sera pas homogène et la hauteur de suspension sera plus faible.

Forme du fond de la cuve

Le fond de la cuve joue également un rôle important sur l'écoulement. Même si peu d'études ont été menées sur l'influence de ce paramètre, on peut quand même noter quelques conclusions intéressantes. En effet, un fond plat est plus susceptible de mener à des zones mortes,

comparé à un fond elliptique ou conique [8, 31, 32]. Ainsi, pour des applications au mélange solide-liquide par exemple, il sera plus facile de suspendre les particules avec un fond arrondi plutôt qu'un fond plat ou conique [33].

Contre-pâles

Il est très fréquent, en mélange, d'utiliser des contre-pâles. Cependant, ceci n'est réellement utile qu'en régime turbulent. En effet, en régime laminaire, la présence de contre-pâles engendre des zones mortes ; ce que l'on veut absolument éviter [34]. C'est pourquoi, nous n'abordons pas plus en détails l'utilisation de contre pâles dans cette étude. Cependant, il est intéressant de noter qu'une cuve sans contre-pâles présente un caractère complètement symétrique ; ce qui est un aspect qui se révèlera très intéressant dans le cas de la présente étude.

2.1.4 Analyse énergétique d'un système de mélange

Nous voudrions clore cette introduction au mélange, en traitant des aspects énergétiques liés à ce procédé. Pour cela, il existe un nombre adimensionel qui permet de caractériser les agitateurs d'un point de vue énergétique, en prenant en compte le design et les propriétés du fluide [35] ; il s'agit du nombre de puissance :

$$Np = \frac{P}{\rho_f N^3 D^5} \tag{2.9}$$

Ce nombre sert à caractériser l'énergie transmise au fluide par l'agitateur. Il peut s'avérer très important quand il s'agit d'évaluer le rendement d'un mélangeur. En effet, on peut voir une dépendance de la puissance consommée avec le cube de la vitesse d'agitation, ainsi que son diamètre à la puissance 5. Ainsi, une mauvaise compréhension de la physique du mélange qui mènerait à un mauvais dimensionnement, pourrait entrainer des surconsommations d'énergie dramatiquement élevées [36]. Nous avons dit que ce nombre dépend de la géométrie et des propriétés physiques du fluide. Alors essayons d'aller un peu plus loin en réécrivant ce nombre à l'aide d'une équation de Buckingham dans le cas particulier d'un ruban [32] :

$$Np = \frac{P}{\rho_f N^3 D^5} = k \left(\frac{\rho_f N D^2}{\mu_f}\right)^a \left(\frac{N^2 D}{g}\right)^b \left(\frac{T}{D}\right)^c \left(\frac{C}{D}\right)^d \left(\frac{H}{D}\right)^e \left(\frac{Wb}{D}\right)^f ... \tag{2.10}$$

Dans le premier terme, on reconnait le nombre de Reynolds. Le second terme nous permet d'introduire un troisième nombre adimensionel important pour caractériser les opérations de mélange avec le nombre de Froude, lequel permet de comparer l'importance relative entre

l'énergie cinétique de centrifugation liée à la vitesse de rotation, et l'énergie potentielle de pesanteur. Ainsi pour une configuration géométrique particulière, on peut écrire :

$$Np = k'(Re)^a(Fr)^b \tag{2.11}$$

D'après Nagata et *al* [37], le nombre de Froude sera à prendre en considération lorsque des vortex importants se forment dans la cuve. Par exemple, dans le cas de cuve avec contre-pâles, ces vortex étant « cassés », l'influence du nombre de Froude est négligeable devant le nombre de Reynolds.

Nous pouvons donc voir que le nombre de puissance et le nombre de Reynolds sont étroitement liés. C'est pourquoi, il est toujours intéressant de tracer ce qu'on appelle une courbe de puissance ($Np\ VS\ Re$). Cette courbe est propre à chaque géométrie. On parle alors de la signature d'un mélangeur. À la Figure 2.9, nous retrouvons plusieurs courbes de puissance pour différents types d'agitateurs.

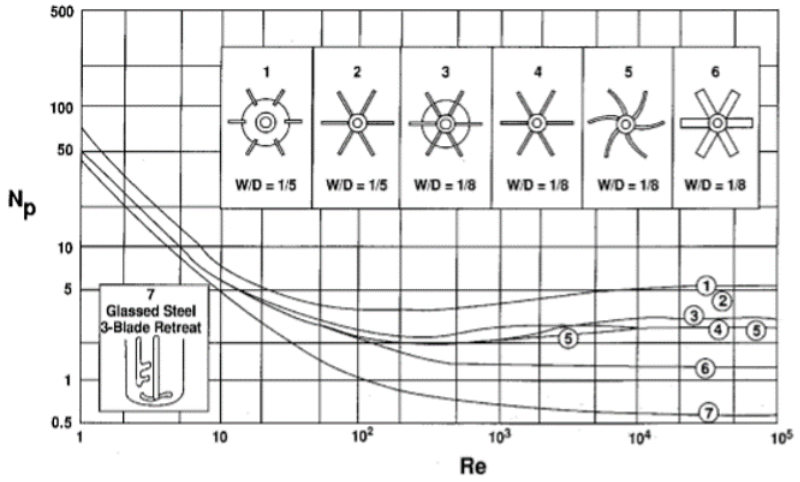

Figure 2.9 Courbes de puissance pour différents agitateurs - extrait de [8]

Comme déjà évoqué plus haut, le nombre de Reynolds permet de définir trois types de régimes ; ce que l'on retrouve sur ces courbes. En régime laminaire, on voit qu'il y une relation de proportionnalité entre Np et Re. On appellera K_P ce coefficient de proportionnalité. En régime transitoire, il n'y a pas de relation simple entre ces deux nombres. Et en régime turbulent, on peut voir que Np devient constant (K_T) et indépendant de Re. Ainsi, nous pouvons exprimer la puissance d'un mélangeur en fonction de son régime d'étude (Table 2.2)

Régime	Relation	Puissance
Laminaire	$NpRe = K_P$	$K_P \mu_f N^2 D^5$
Transitoire	$Np = f(Re)$	$Np \mu_f N^3 D^5$
Turbulent	$Np = K_T$	$K_T \mu_f N^3 D^5$

Tableau 2.2 Puissance générée par un agitateur en fonction du régime d'écoulement

Pour conclure cette section et introduire la suivante, revenons sur le nombre de Froude. Effectivement, celui ci est très intéressant lorsque l'on parle de mélange solide-liquide, car sa valeur donne des informations essentielles sur la capacité à suspendre des particules. Dans ce cadre diphasique, il est définit par la formule suivante :

$$N_{Fr} = \frac{N^2 D}{g} \frac{\rho_f}{\rho_p - \rho_f} \tag{2.12}$$

— $N_{Fr} < 1$: La gravité est plus importante que les forces inertielles de rotation. Ainsi suspendre les particules sera une opération difficile.

— $N_{Fr} \approx 1$: La gravité et les forces engendrées par la rotation de l'agitateur sont de valeurs comparables. Dans ce cas, il sera possible d'obtenir une suspension homogène de particules.

— $N_{Fr} > 5$: Les forces inertielles de rotation sont ici prédominantes. Il sera possible de suspendre les particules mais elles seront alors centrifugées sur les bords de la cuve et il sera alors plus difficile d'obtenir des mélanges homogènes.

2.2 Le mélange solide-liquide

Après avoir abordé les différents aspects généraux liés aux opérations de mélange, il s'agit maintenant de nous recentrer sur des applications plus spécifiques aux mélanges diphasiques de type solide-liquide.

2.2.1 Caractérisations des suspensions solides dans un liquide

En se basant sur la définition donnée par le « Handbook of industrial Mixing » [13], l'objectif premier, lorsque l'on fait une opération mélange solide-liquide, est de maximiser l'interaction entre les deux phases pour assurer le meilleur transfert de masse possible. Pour cela, en

partant d'un lit de particules complètement sédimenté au fond d'une cuve, toute la difficulté sera de suspendre toutes ces particules dans le fluide. Selon Zwietering [38], on considère qu'une particule est suspendue lorsque celle-ci reste moins de 2 secondes en contact avec le fond de la cuve. Mais même une fois suspendue, on peut définir plusieurs types de suspensions différentes, illustrées à la Figure 2.10.

— Suspension partielle : Une partie des particules demeure au fond de la cuve.

— Suspension complète : Toutes les particules sont suspendues mais sont réparties de façon inhomogène dans tout le volume de fluide.

— Suspension uniforme : Toutes les particules sont suspendues et sont réparties de façon complètement homogène dans tout le volume de fluide.

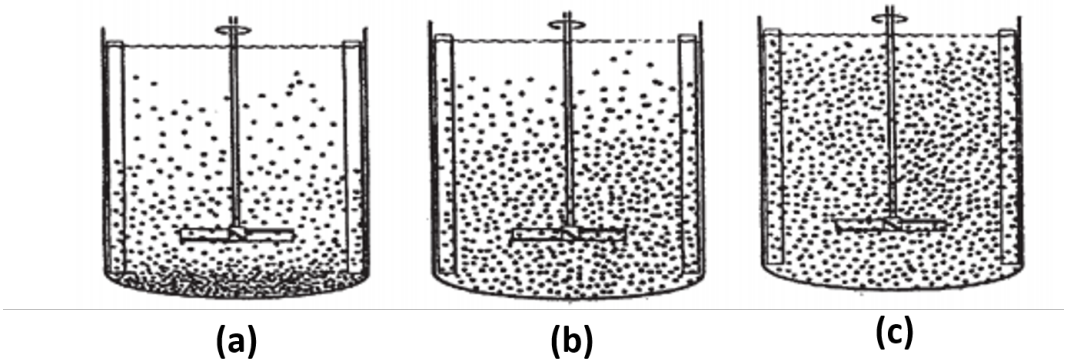

Figure 2.10 Les différents types de suspension. (a) Suspension partielle (b) Suspension complète (c) Suspension uniforme - extrait de [9]

Kneule définira en 1954, l'état de suspension complète comme l'état nécessaire et suffisant pour assurer un transfert de masse optimal entre les deux phases.

2.2.2 Vitesse minimale de suspension complète N_{js}

Comme nous venons de le voir, l'état de suspension complète est l'objectif que l'on cherche à atteindre lorsque l'on fait du mélange solide-liquide. C'est ainsi que nous introduisons le paramètre qui est sans doute le plus important lorsque l'on parle de mélange solide-liquide et qui hante tous les spécialistes depuis maintenant 60 ans : la vitesse minimale de suspension complète (N_{js}). C'est le paramètre de référence que l'on cherche à déterminer au mieux pour assurer un mélange des plus efficaces. Zwietering proposa en 1958, ce qui restera, de part son côté populaire, comme le $E = mc^2$ du mélange solide-liquide à savoir la première corrélation

empirique permettant d'estimer N_{js} [38] :

$$N_{js} = S\nu^{0.1}\left(\frac{(\rho_p - \rho_f g)}{\rho_f}\right)^{0.45} d_p^{0.2} X^{0.13} D^{-0.85} \tag{2.13}$$

Avec ν la viscosité cinématique, S un facteur dépendant de la géométrie, X la fraction massique de solide fois 100. Cette équation, quoique encore très largement utilisée aujourd'hui, présente de nombreuses limitations. Par exemple, le facteur de forme reste un paramètre relativement difficile à estimer, de par sa dépendance à de trop nombreux paramètres géométriques, comme la présence ou non de contre-pâles, le dégagement au fond ou encore la taille de la cuve... De plus, la corrélation de Zwietering connait de nombreuses limites pour des fluides visqueux, des fractions volumiques importantes ainsi que pour des particules à diamètres importants où N_{js} est surestimé [10, 39–41]. Ainsi, on peut dénoter des tentatives de correction de cette corrélation avec, par exemple, les corrélations de Nienow *et al* en 1968 [42], Baldi *et al* en 1978 [43], Armenante et *al* en 1998 [23], ou encore Ayranci et *al* en 2013 [44], Tamburini et *al* en 2014 [45], et finalement Grenville et *al*, en 2015, qui se sont intéressés au cas plus particulier de la turbine Rushton [46].

Cependant, ce qui ressort de toutes ces études, est qu'estimer la vitesse minimale de suspension reste une tache très compliquée, car dépendante de beaucoup de paramètres. Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à [10] qui, en s'appuyant sur de nombreuses études, donne un descriptif des impacts des différents paramètres, qu'ils soient géométriques ou physiques sur la vitesse minimale de suspensions. Ce descriptif montre l'ampleur de toute la difficulté et du travail restant.

2.2.3 Méthode de détermination expérimentale de N_{js}

Nous avons pu comprendre, qu'établir une corrélation pour calculer N_{js}, est un réel défi. Mais le déterminer expérimentalement, n'est pas une tâche plus aisée. Un très grand nombre de méthodes ont été développées ces 50 dernières années. Nous pouvons les séparer en 2 catégories distinctes.

Les méthodes non-intrusives

Commençons par les méthodes non-intrusives dont les plus simples sont les observations visuelles. Parmis ces méthodes, on note la méthode de mesure de la hauteur de suspension [47] ou encore l'observation du reflet d'un miroir positionné sous la cuve [38]. Cependant, elles restent limitées aux systèmes transparents et à faible concentration [48]. Comme méthode

plus précise, il y a l'analyse de la variation du nombre de puissance. En effet, une fois les particules suspendues, la densité apparente ne varie plus et le nombre de puissance atteint un palier. Ce qui permet de déduire N_{js} [49]. On peut également déterminer N_{js} en mesurant la variation d'intensité lumineuse d'un faisceau passant à travers la cuve lors de la mise en suspension des particules ; et en déduire la fraction suspendue à l'aide de loi optique comme celle de Beer-Lambert [50]. Il existe également d'autres méthodes plus complexes à mettre en oeuvre comme la RPT (*Radioactive particle tracking*) où une seule particule, rendue radioactive au préalable, est suivie avec des détecteurs de rayonnements placés à l'extérieur de la cuve. Ceci permet de déduire la répartition globale de toutes les particules à l'aide de l'hypothèse ergodique de Boltzmann [51].

Les méthodes intrusives

Pour les méthodes intrusives, qui sont généralement considérées comme plus sensibles, car perturbant grandement l'écoulement [52], il s'agit de mesurer des concentrations de particules à différents endroits de la cuve. On peut pour cela directement prélever des échantillons dans la cuve, à différents instants, et tracer l'évolution du taux de particules dans le temps [31,53]. D'autres méthodes sont basées sur des mesures physiques comme la conductivité, dans le cas où le fluide ou les particules présentent des caractères conducteurs. Pour cela, des sondes sont directement insérées dans le système [54].
Pour une revue complète et précise, nous référons le lecteur aux études de Mishra et *al* [55], Tamburini et *al* [56] ou encore de Kasat et *al* [57].

Cependant, nous souhaiterions développer, de façon plus précise, deux méthodes qui ont présenté des résultats très concluants et qui sont basées sur des mesures de pressions.

Détermination de N_{js} par mesure de pression

Commençons pas évoquer la méthode de pression de jauge (PGT) introduite par Brucato et Rizutti en 1997 [58] et qui repose sur des mesures de pressions en fond de cuve. L'ensemble de la technique repose sur une variation de la densité apparente du liquide avec la mise en suspension progressive des particules. En effet, au début de l'expérience, le lit de particules est uniquement soutenu par le fond de la cuve. Ainsi, le fluide ne ressent aucun effet des particules. Mais lors de la mise en suspension, c'est bien le fluide qui va supporter le poids des particules. Ce qui va engendrer une augmentation de la pression au fond de la cuve. Cependant, il faut faire attention au fait que la pression se décompose sous deux formes : la pression hydrostatique et la pression dynamique. Dans notre cas, c'est bien la pression hydrostatique qui nous intéresse et c'est bien elle qui va rester constante une fois toutes les

particules suspendues. Néanmoins, en raison des forces hydrodynamiques verticales générées lors d'une opération de mélange, la pression dynamique ne peut être négligée. C'est ainsi, qu'en 2002, Micale et *al* [40] apportent la version définitive à la méthode de pression de jauge en soustrayant à la pression totale mesurée, la pression dynamique. Cette pression dynamique est calculée avec la relation de Bernoulli qui nous montre une dépendance quadratique entre la pression et la vitesse du fluide :

$$P + \frac{1}{2}\rho_f u_f^2 + \rho_f g z = cst \tag{2.14}$$

La Figure 2.11 illustre bien cette évolution parabolique de la pression au delà d'un « saut », correspondant à la mise en suspension totale des particules. En soustrayant cette composante dynamique, on obtient alors une courbe de pression corrigée dont la déduction de N_{js} devient triviale.

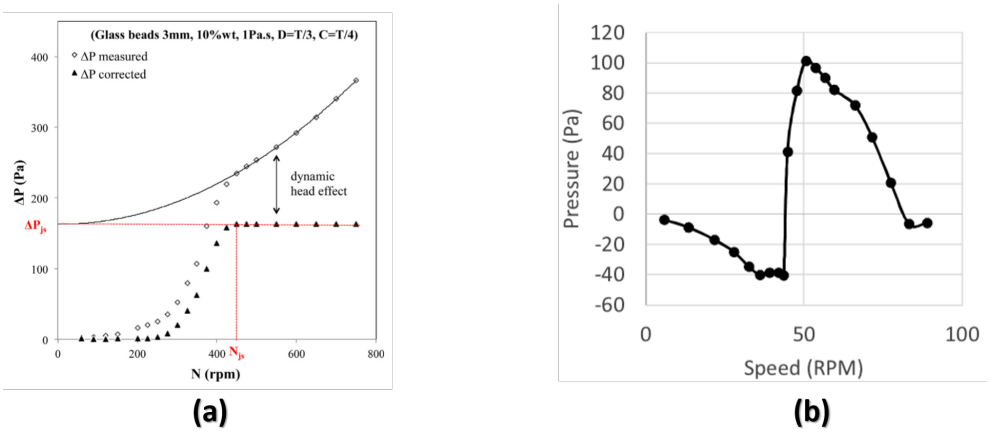

Figure 2.11 Illustration des profils de pression obtenus avec des agitateurs à écoulement axial et radial (a) et avec des agitateurs raclant (b) - extrait de [7, 10].

Cette méthode a fait ces preuves comme en témoignent les études expérimentales de Lassaigne et *al* [10] ainsi que celles de Tamburini et *al* [59]. De plus, ce qui est très intéressant avec cette méthode, c'est qu'elle est aussi applicable à des études numériques comme le montrent les travaux de Blais et *al* [3, 30, 60].

Cependant, si cette méthode a fait ses preuves pour des agitateurs à écoulement radial et axial avec des fluides visqueux, ce n'est pas le cas pour des études avec des agitateurs raclants. Car les profils de pression en fond de cuve sont très différents (2.11). C'est ce qui a été mis en évidence par Bertrand et *al* en 2018 [7] lesquels ont alors développé une méthode alternative appelée par les auteurs : « Méthode de différence de pression ». L'idée est de développer une

méthode qui s'affranchit d'une quelconque forme de la courbe de pression. Pour résumer, dans un premier temps, la pression en fond de cuve sans particules est mesurée et est soustraite à la pression totale mesurée avec les particules. Ceci toujours dans l'optique de ne garder que la composante hydrostatique. Cette première étape permet de définir un intervalle de vitesse dans lequel est compris N_{js}. Ensuite, une seconde expérience, uniquement pour les vitesses comprises dans cet intervalle, est réalisée. La méthode de sédimentation proposée est de stopper l'agitation, une fois les particules suspendues, puis de mesurer la pression en fond de cuve lors de la sédimentation de celle-ci. Ceci permet d'obtenir la pression hydrostatique pour toutes les vitesses de cet intervalle restreint et ainsi aboutir à la détermination de N_{js} de façon plus précise.

2.2.4 Rhéologie

Toujours dans l'idée de continuer notre investigation sur les opérations de mélange solide-liquide, il est nécessaire de s'intéresser à la rhéologie de tel système. Commençons par replacer la rhéologie dans son contexte. Pour cela, revenons à la mécanique des milieux continus considérée comme la science des déformations, qu'elle soit solide ou liquide. Celle-ci peut être séparée en différentes catégories illustrées à la Figure 2.12.

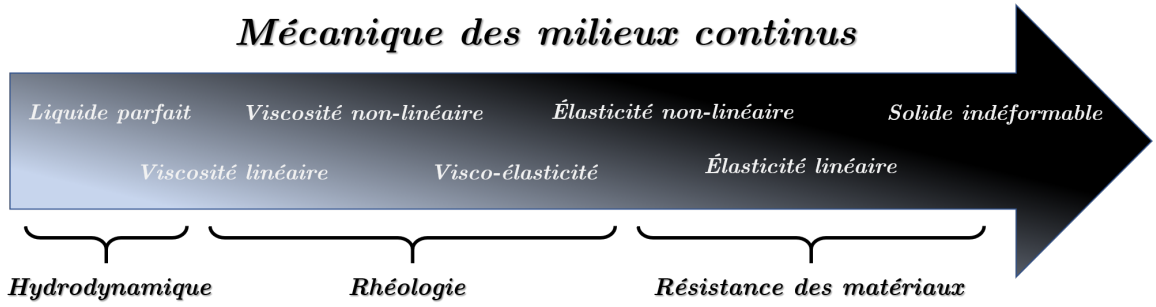

Figure 2.12 Catégorisation de la mécanique des milieux continus

Dans le cadre de ce projet, nous nous situons dans la deuxième catégorie ; à savoir celle des fluides avec une viscosité non-négligeable. Ce qui fait donc appelle à la rhéologie. Cependant, la particularité de cette étude est la présence de deux phases : liquide et solide. Il sera donc important de voir quelle est l'influence de ce couplage polyphasique sur le comportement rhéologique global du système.

Rhéologie des fluides

Avant toute chose, commençons par revenir sur les principes de bases de la rhéologie. Le principe de rhéologie connait son véritable essort avec Bingham en 1929, pour répondre à l'incapacité des théories de la mécanique des fluides existantes pour décrire le comportement de certains matériaux. Le mot rhéologie résume à lui seul son domaine d'application. En effet ce mot est l'assemblage des mots grec « rheô » qui signifie « couler » et du mot « logia » qui signifie « théorie ». Donc finalement la rhélogie n'est autre que la science des écoulements. Plus précisément, la rhéologie s'intéresse au comportement d'un fluide soumis à un champ de contraintes. Une contrainte peut être vue comme une force surfacique sur un élément fluide de surface dS et de normale $\mathbf{n}$:

$$d\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma} dS \mathbf{n} \tag{2.15}$$

Où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes que l'on peut décomposer en deux composantes isotropes et anisotropes :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\tau} \tag{2.16}$$

On reconnait alors le tenseur des contraintes déviatoriques $\boldsymbol{\tau}$ déjà introduit dans les équations de Navier-Stokes (Eq.2.7). Maintenant, le champ de contraintes définit, ce qui nous intéresse est d'évaluer la réponse du fluide face à cette contrainte. Pour cela, on introduit la notion de déformation. Par souci de clarté, nous limitons notre illustration au cas particulier d'un cisaillement à symétrie plane où un fluide est compris entre deux plaques : l'une fixe et l'autre mobile. (Figure 2.13). Nous utilisons les notations utilisées dans [61]. On peut alors définir

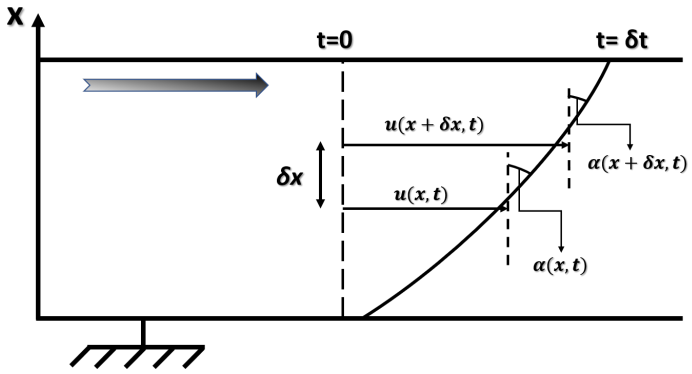

Figure 2.13 Illustration de la déformation de cisaillement pour un cas de symétrie plane

la déformation de cisaillement :

$$\epsilon(x,t) = \frac{d\mathbf{u}(x,t)}{dx} \tag{2.17}$$

Qui se traduit comme la variation spatiale du déplacement entre deux couches de fluides infiniment proches. Géométriquement, cela se traduit facilement par l'approximation :

$$\epsilon(x,t) = tan(\alpha(x,t)) \tag{2.18}$$

On peut également définir le taux de cisaillement :

$$\dot{\epsilon}(x,t) = \frac{d\epsilon}{dt} = \frac{d}{dt}\frac{d\mathbf{u}(x,t)}{dx} = \frac{d}{dx}\frac{d\mathbf{u}(x,t)}{dt} \tag{2.19}$$

Donc, finalement, de façon générale, le taux de cisaillement peut être vu comme un gradient de vitesse entre deux couches de fluide infiniment proches.

Cette notion maintenant introduite, il est temps de s'intéresser au concept de viscosité. Cette grandeur, très importante en rhéologie, est propre à chaque substance et dépend de plusieurs paramètres comme la température, la pression, la composition ou le taux de cisaillement. Ce dernier est très important dans la classification des différents fluides. En effet, dans le cas le plus simple où la viscosité ne dépend pas de la contrainte de cisaillement, on parle de fluide newtonien dont la loi rhéologique est donnée par :

$$\tau = \dot{\epsilon}(x,t)\mu(p,T) \tag{2.20}$$

Nous avons alors une relation purement linéaire entre taux de cisaillement et contrainte. Pour les fluides plus complexes, dit non-newtoniens, où la viscosité n'est pas indépendante du taux de cisaillement, on peut définir une loi de puissance connue sous le nom de loi d'Ostwald de Waele.

$$\tau = K\dot{\epsilon}^n \tag{2.21}$$

En fonction de la valeur de n, on distingue plusieurs types de fluides. Pour $n < 1$ on parlera de fluide rhéofluidifiant ; c'est à dire que la viscosité diminue avec le taux de cisaillement. Dans le cas contraire, si la viscosité augmente, on parlera de fluide rhéoépaississant. Dans ce cas $n > 1$. Enfin, il existe une autre classe de fluide appelée fluide à seuil de type Bingham ou fluide visco-plastique où l'écoulement ne se fait qu'a partir d'une contrainte « seuil ». Tous ces cas sont résumés sur la Figure 2.14.

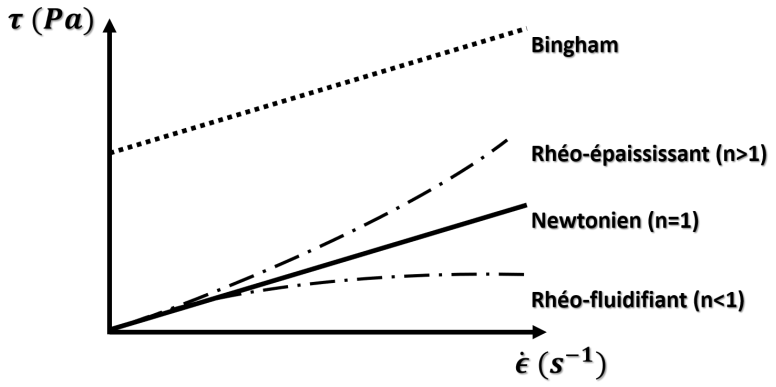

Figure 2.14 Rhéogramme pour différent types de fluides

A noter que dans le cas plus précis du mélange, le cisaillement généré dans le fluide est directement relié à la géométrie de l'agitateur ainsi qu'à sa vitesse de rotation.

Rhéologie des suspensions solide-liquide

Après s'être intéressé à la rhéologie des fluides, nous nous demandons maintenant qu'elle est l'influence des particules sur la rhéologie d'un système solide-liquide. En 1970, Batchelor [62] formula une expression modifiée du tenseur des contraintes avec l'ajout d'un terme dépendant de la fraction volumique :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\tau} - \mathbf{m} \tag{2.22}$$

Avec $\mathbf{m}$, le tenseur décrivant l'influence des particules sur la rhéologie du système. Il n'est pas rare qu'un fluide initialement newtonien présente un caractère non-newtonien avec l'ajout de particules [63]. En effet, lors d'un cisaillement simple, les particules peuvent opposer une résistance normale, conférant une élasticité au fluide. L'étude de l'impact de la fraction volumique ϵ_p sur la rhéologie d'un système diphasique n'est pas un sujet nouveau. En effet, Thomas et *al* [64] en 1965 ou encore Rutgers et *al* [65] en 1962 ont montré que pour des faibles fraction volumiques, l'approximation d'avoir une viscosité $\mu(\tau, p, T, \epsilon_p)$ constante reste valide et le fluide reste Newtonien. Ce qui n'est absolument pas le cas pour des fractions plus importantes comme en témoigne la figure 2.15.

Ainsi plusieurs corrélations ont pu être développées dans l'optique d'évaluer la dépendance

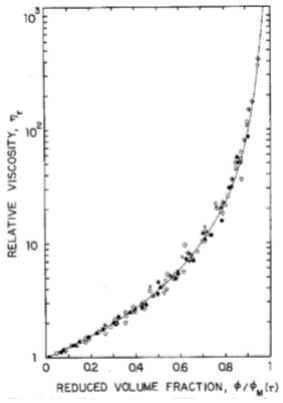

Figure 2.15 Viscosité réduite $\mu_r = \mu/\mu_0$, avec μ_0 la viscosité initiale du fluide, en fonction de la fraction volumique pour des particules de tailles comprises entre $0.1\mu m$ et $65\mu m$. Le trait plein représentant le modèle de Krieger-Dougherty - extrait de [11].

de la viscosité à la fraction volumique. La première est l'oeuvre d'Einstein en 1906.

$$\mu_r = 1 + 2.5\epsilon_p \tag{2.23}$$

Cependant, cette relation est limitée à des suspensions diluées. En effet, pour de plus fortes concentrations, les contacts entre les particules influencent de façon plus importante l'hydrodynamique. C'est pourquoi, Batchelor et Green introduisirent en 1972 une relation plus précise en utilisant un développement jusqu'à l'ordre 2 en χ_v [66].

$$\mu_r = 1 + 2.5\epsilon_p + 7.6\epsilon_p^2 \tag{2.24}$$

Mais ici encore, nous sommes limités à des fractions volumiques relativement faibles ($\epsilon_p < 0.1$) où les contacts se font par paire de deux particules. Pour des fractions volumiques plus importantes où les contacts se font à plus de deux particules, il est nécessaire d'avoir des termes d'ordres plus élevés. Cependant, ces calculs ne sont pas triviaux. C'est pourquoi, pour des fractions moins diluées, la plupart des modèles reposent sur des observations expérimentales ; comme c'est le cas de la relation développée par Krieger et Dougherty en 1959 [67], avec des résultats convaincants (Figure 2.15).

$$\mu_r = \left(1 - \frac{\epsilon_p}{\epsilon_p*}\right)^{-[\mu]_1 \epsilon_p*} \tag{2.25}$$

Avec $[\mu]_1$ la viscosité intrinsèque évaluée à 2.5 dans ce modèle, ϵ_p* la fraction volumique

d'assemblage maximale souvent prise, égale à 0.64 pour des particules sphériques [68].

2.2.5 Interaction solide-liquide

Après s'être intéressé de façon globale et macroscopique au procédé de mélange solide-liquide, nous concluons cette section, en nous intéressant à ce qui se passe à l'échelle microscopique entre les particules et le fluide environnant. La compréhension de ces phénomènes, à l'échelle microscopique, est essentielle pour quiconque voudrait comprendre la physique du mélange solide-liquide. Mais ceci présente de nombreux défis. En effet, si dans le cas particulier d'une particule lâchée dans un liquide au repos, son comportement va être relativement facile à déterminer, nous comprenons, que dans le cas d'une cuve agitée, ce n'est pas si simple. Effectivement, l'écoulement fluide n'atteint jamais un régime permanent et les particules influencent non seulement le comportement du fluide mais aussi celui des particules voisines... C'est pourquoi, dans cette partie, nous allons avancer par degrés de complexité progressifs pour bien saisir les différents aspects qui se cachent derrière les interactions fluide-solide dans une opération de mélange.

Particule sphérique dans un écoulement en régime permanent

Nous commençons ici, avec le cas basique d'une seule particule plongée dans un champ de vitesse uniforme. Son comportement est relativement simple, celle-ci va dans un premier temps accélérer pour finalement atteindre une vitesse « seuil » lorsque toutes les forces en présence se compenseront. Nous comprenons que cette vitesse « seuil » appelée vitesse de sédimentation, est un paramètre très intéressant lorsque l'on veut suspendre des particules. Un des premiers paramètres à prendre en compte lorsque l'on parle de sédimentation, est la gravité. On introduit ainsi le $4^{ème}$ nombre adimensionel de cette étude avec le nombre d'Archimède qui permet de comparer l'importance relative entre les forces visqueuses et la force de pesanteur :

$$Ar = \frac{d_p^3 g \rho_f (\rho_p - \rho_f)}{\mu_f^2} \tag{2.26}$$

En plus de la gravité, la vitesse de sédimentation va également être influencée par les forces de frottement fluide. A partir de là, on définit cette vitesse pour une particule dans un fluide newtonien au repos [69] :

$$V_t = \left(\frac{4 g d_p (\rho_p - \rho_f)}{3 C_d \rho_p} \right)^{1/2} \tag{2.27}$$

Dans cette expression, on voit l'apparition du coefficient de trainée C_D dont la valeur dépend de la géométrie du solide et du régime d'écoulement. Comme ici nous travaillons à l'échelle de la particule solide, nous définissons le régime d'écoulement avec le nombre de Reynolds particulaire dont l'expression est donnée par :

$$Re_p = \frac{\rho_f(|\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}|)d_p}{\mu_f} \tag{2.28}$$

Avec $\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}$ la vitesse relative entre le fluide et le solide. Le nombre de Reynolds ainsi définit, nous rappelons ici la très classique courbe représentant l'évolution du coefficient de trainée avec le régime d'écoulement (Figure 2.16).

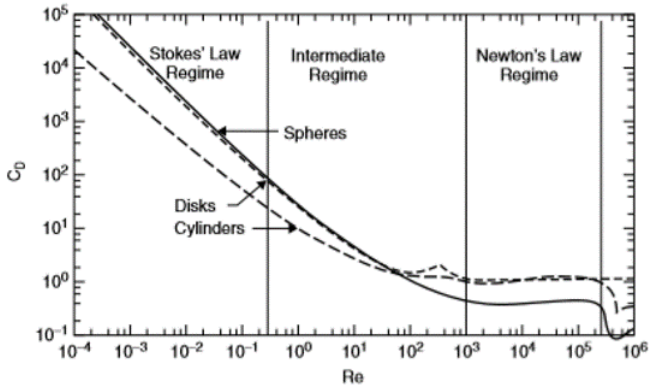

Figure 2.16 Évolution du coefficient de trainée avec le nombre de Reynolds pour l'écoulement autour d'une sphère - extrait de [2].

Cette courbe, à elle seule, rassemble énormément d'informations et de connaissances sur la mécanique des fluides. On distingue 3 zones, correspondant aux trois régimes d'écoulements bien connus. Pour le régime laminaire, nous avons un écoulement rampant autour de la sphère. Les lignes de courant suivent le contour de la sphère (Figure 2.17 (a)) Nous pouvons obtenir une expression analytique pour le coefficient de trainée, dans cette zone, avec la loi de Stokes [70] :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \tag{2.29}$$

Ensuite, nous rentrons dans le régime transitoire où la loi de Stokes trouve rapidement ses limites. En effet, C_D diminue moins vite que ne le prévoit cette loi. Les lignes de courant commencent à se décoller et il a la formation de tourbillons toriques de plus en plus gros en aval de la sphère jusqu'à des Reynolds de 450 environs (Figure 2.17 (b)). Au delà, les tour-

billons se détachent. Et l'écoulement n'est alors plus permanent, mais seulement permanent en moyenne (Figure 2.17 (c)). Dans cette zone de Reynolds, il n'est alors pas possible de calculer C_D de façon théorique. Cependant la formule d'Abraham [71] permet d'avoir une bonne approximation jusqu'à environ $Re = 1000$.

$$C_D = A\left(1 + \frac{a}{\sqrt{Re}}\right)^2 \tag{2.30}$$

Avec $Aa^2 = 24$ et $a = 9.06$. Une fois passé cette zone, C_D se stabilise et devient constant. L'écoulement derrière la sphère devient complètement irrégulier et il y a la formation d'un sillage (Figure 2.17 (d)). Si on avance encore sur la courbe, on va passer par le nombre de Reynolds critique aux alentours de 10^5. Pour ce nombre de Reynolds, il y a une chute brutale de C_D ; c'est la « *crise de trainée* ». Le point de décollement recule brusquement sur la sphère (Figure 2.17 (e)). En réalité, avant cette valeur, le décollement se fait dans une couche limite laminaire, alors qu'après, il s'effectue dans une couche limite turbulente.
Finalement, nous résumons les différentes vitesses de sédimentation pour les différents régimes super critique ($Re_p < Re_{critique}$) dans le Tableau 2.3.

Régime	Re_p	C_D	Vt
Laminaire	$Re_p < 0.3$	$\frac{24}{Re_p}$	$\frac{gd_p^2(\rho_p - \rho_f)}{18\mu_f}$
Transitoire	$0.3 < Re_p < 1000$	$A\left(1 + \frac{a}{\sqrt{Re}}\right)^2$	*Pas de relation consistante*
Turbulent	$1000 < Re_p < Re_{critique}$	0.445	$1.73\left(\frac{gd_p(\rho_p - \rho_f)}{\rho_f}\right)^{1/2}$

Tableau 2.3 Evolution du coefficient de trainée en fonction du nombre de Reynolds particulaire - adapté de [1, 2]

Au delà du nombre de Reynolds critique, on peut essayer de chercher une valeur théorique pour C_D, en considérant un fluide parfait en écoulement potentiel. Cela revient en réalité à négliger l'épaisseur de la couche limite, donc à n'avoir qu'un écoulement parallèle à la sphère. Il est alors facile de calculer ce champ de vitesse et d'en déduire le champ de pression avec la relation de Bernoulli. On intègre ensuite ce champ de pression sur la surface de la sphère et l'on obtient le résultat surprenant, connu sous le nom de paradoxe de d'Alembert, d'une résultante des forces de pression nulle. Cela est dû à l'hypothèse de négliger la viscosité à haut nombre de Reynolds. En effet, elle a toujours un effet et celui-ci se manifeste à travers les phénomènes de turbulence.

Le coefficient de trainée maintenant décrit, nous pouvons définir la force de trainée exercée

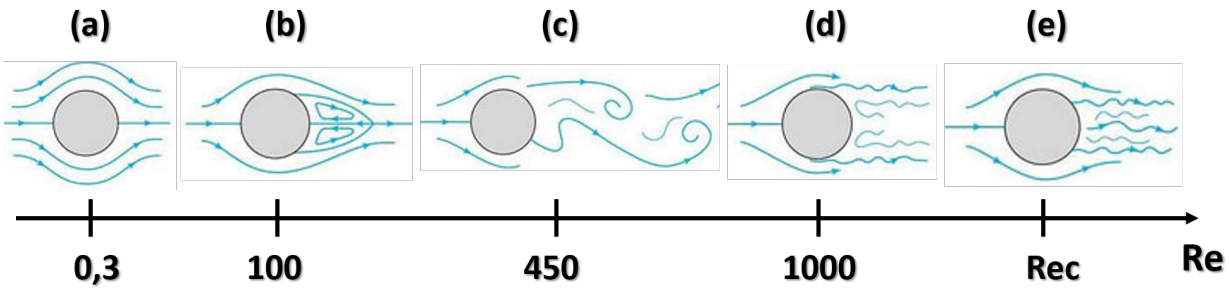

Figure 2.17 Évolution du profil d'écoulement autour d'une sphère - adaptée de [1]

.

par le fluide sur une particule isolée de façon générale avec la relation :

$$\boldsymbol{F_D} = \frac{1}{2}\rho_f \pi d_p^2 C_D(|\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}|)(\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}) \tag{2.31}$$

Avec $\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}$ la vitesse relative entre le fluide et le solide. Après avoir définit la force liant la particule solide et le fluide environnant, une question légitime est de se demander comment va réagir la particule. Va t-elle suivre l'écoulement ? S'en détacher ? Ou même ne pas être du tout influencée ? Pour répondre à ces questions, il existe un nombre adimensionnel : le nombre de Stokes qui sera le $5^{ème}$ et dernier nombre adimensionel introduit dans cette étude, conformément à ce énoncé plus haut. Il est définit à l'aide du temps de réponse de la particule $\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu}$ qui est le temps d'amortissement entre la vitesse du fluide et celle de la particule [72].

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} = \frac{\rho_p d_p^2 \, |\boldsymbol{u}_f|}{18\mu_f L} \tag{2.32}$$

Avec L une distance caractéristique de l'écoulement. Ainsi, pour de faible nombre de Stokes, $St << 1$, les particules suivent l'écoulement. Pour des valeurs plus élevées, $St > 1$, les particules peuvent suivre leur propre trajectoire et se détacher du fluide. Enfin, pour des cas extrêmes, $St \to \infty$, le fluide n'a aucune incidence sur le mouvement des particules.

Particule sphérique dans un écoulement en régime instationnaire

Après avoir vu le cas très simple de la sédimentation d'une particule dans un fluide au repos, essayons de nous rapprocher de la situation d'une cuve mécaniquement agitée en considérant maintenant un écoulement instationnaire. L'essentiel du travail, sur l'étude du mouvement

d'une particule dans un champ de vitesse non-uniforme, fut mené par Basset, Boussineq et Oseen. Travail résumé à travers l'équation éponyme [73] :

$$\begin{aligned} m\frac{d\boldsymbol{u_p}}{dt} =& m\mathbf{g} + 3\pi\mu_f d_p(\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}) + V_p(-\nabla P + \nabla\cdot\tau) \\ &+ \frac{\rho_f V_p}{2}\frac{d(\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p})}{dt} \\ &+ \frac{3}{2}d_p^2\sqrt{\pi\rho_f\mu_f}\left(\int_0^t \frac{\frac{d(\boldsymbol{u_f}-\boldsymbol{u_p})}{dt'}}{\sqrt{t-t'}}\,\mathrm{d}t' + \frac{(\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p})_{initial}}{\sqrt{t}}\right) \end{aligned} \tag{2.33}$$

Sur la première ligne, on note les classiques forces de gravité, de trainée, de contraintes visqueuses et de pression déjà évoquées plus haut pour des champs de vitesses uniformes. Pour tenir compte de la non-uniformité, il faut rajouter la force de masse virtuelle et la force de Basset. A noter que pour cette dernière, il s'agit de la forme modifiée par Reeks et McKee en 1984 [74] permettant ainsi de prendre en compte les conditions initiales.

Ce que l'on appelle masse virtuelle, est la masse de fluide déplacée autour de la particule lorsque celle-ci est en mouvement. Ainsi, en plus du volume de la sphère, il faut également tenir compte de ce volume de fluide supplémentaire qui augmente l'inertie globale de la particule. Dans le cas d'une sphère, ce volume est égal à la moitié de celui de la particule. Dûe à cette évolution de volume, la force de trainée globale doit être plus importante. C'est pourquoi on ajoute une force supplémentaire appelée : force de masse virtuelle.

La force de Basset retranscrit le retard de la couche limite à répondre à des nouvelles conditions limites engendrées par des variations de l'écoulement instationnaire. Ce qui à pour effet de ralentir le fluide. On comprend l'importance du rôle joué par la viscosité ici, ce qui explique qu'elle apparait dans son expression. De plus, on remarque une intégrale temporelle sur la durée de l'expérience prenant en compte la variation de vitesse relative entre le fluide et la particule au court du temps. Ce qui explique que l'on parle aussi « d'history force ».

Finalement, il reste une dernière classe de force que l'on n'a pas évoquée. En effet, pour être vraiment complet, il faut aussi tenir compte des forces de portance. On en distingue deux. La première, appelée force de Saffman, résulte du différentiel de pression entre le haut et le bas de la particule, lequel résultant d'un gradient de vitesse dans l'écoulement. Son expression fut donnée par Saffman en 1965 [75] :

$$\mathbf{F}_{Saffman} = C_S\rho_f\sqrt{\mu_f}d_p^2\boldsymbol{u_f}\sqrt{\dot{\epsilon}} \tag{2.34}$$

Avec C_S le coefficient de Saffman égale à 1.61 en régime laminaire.

La seconde est la plus connue, force de Magnus, qui génère une portance dûe à un différentiel

de pression engendré par la rotation même de la particule. Ce différentiel de pression fut longtemps justifié avec le théorème de Bernoulli en négligeant la viscosité du fluide. Mais nous avons pu voir que ceci est une erreur, (*cf* Paradoxe de d'Alembert). En réalité, c'est la conséquence d'un recollement plus tardif de la couche limite, là où la vitesse relative entre fluide et particule est la plus faible. L'expression développée par Rubinow et Keller en 1961 [76] est donnée par :

$$\mathbf{F}_{Magnus} = \frac{\pi}{8} d_p^3 \rho_f \left(\left(\frac{1}{2} \nabla \times \boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{\omega_p} \right) \times (\boldsymbol{u_f} - \boldsymbol{u_p}) \right) \tag{2.35}$$

Écoulement avec plusieurs particules

La dernière étape de cette section est bien évidemment la prise en compte du fait qu'un système de mélange contient un très grand nombre de particules. Nous allons ainsi repasser tout ce qui a été vu plus haut dans ce contexte. Premièrement, si l'on revient sur la vitesse de sédimentation, celle-ci devient difficile à déterminer. En effet, différents aspects sont à prendre en compte, comme le fait que les particules aux alentours, en retombant, génèrent un flux vers le haut [77], ou encore le fait que la viscosité et la densité apparente augmentent. Cependant Guiraud et *al* [78] ont montré que cette vitesse est toujours inférieure à la vitesse de sédimentation d'une particule dans un fluide newtonien au repos. Ainsi, il sera toujours possible de se placer dans un cas critique, en considérant la vitesse de sédimentation Vt (Eq.2.27). On relève tout de même dans la littérature une corrélation qui permet de prendre en compte la fraction volumique, mais celle-ci reste très limitée [79] :

$$V_{ts} = V_t (1 - \epsilon_p)^n \tag{2.36}$$

Avec n un coefficient dépendant du régime d'étude [2].

Ensuite, nous avions introduit la force de trainée. Cette force est grandement influencée par la présence de nombreuses particules surtout dans le cas où $\epsilon_p > 0.1$ [80]. Il est cependant difficile de dégager une corrélation simple et la majorité est basée sur des observations expérimentales. Ainsi, nous pouvons citer, à titre d'exemple, les corrélations de Ergun [81], Wen Yu [82], Di Felice [83] ou encore celle de Rong et *al* [84].

Enfin, il s'agit de se demander si toutes les forces évoquées plus haut, ont besoin d'être prises en compte lorsqu'il y a plusieurs particules solides. Dans le cas plus particulier du mélange solide-liquide, cette problématique fut largement étudiée. Ljungqvist et *al* [85] furent les premiers à conclure que la force de trainée était la principale source de dissipation dans le cas d'écoulement turbulent. Ensuite, si on regarde plus attentivement l'expression des

différentes forces ci dessus, on peut remarquer que dans le cas de rapport de densité entre le solide et le fluide important ($\frac{\rho_p}{\rho_f} > 2$), les effets des forces de portances, de Basset et de masse virtuelle, sont négligeables comparés à la force de trainée. C'est ce qui a été vérifié par Taterson et *al* en 1991 [86] et confirmé par des résultats plus récents, d'études de suspension solide [60, 87, 88]. Dans les autres cas où il n'y aurait pas de différences significatives entre les masses volumiques, il faudrait tenir compte de ces forces dépendamment des cas [55]. Cependant, d'après Khopkar et *al* [89], il semblerait que, quelque soit la situation, la force de Basset reste négligeable devant la force de trainée. On observe les mêmes conclusions pour les forces de portances et de masse virtuelle dans certaines études [90]. Cependant, on peut noter que pour les fluides accélérés, la masse ajoutée a une importance non négligeable [91]. Et si l'on s'appuie sur les travaux de Derksen et *al*, les forces de portance semblent être à prendre en compte au voisinage de l'agitateur [92]. En définitive, ce que l'on peut retenir ici, c'est que l'influence de chaque force d'interaction fluide-solide dans le cas particulier d'opération de mélange, n'est pas clair et reste encore un sujet d'étude actif.

2.3 Approches numériques pour l'étude de système diphasique de type solide-liquide

Dans toute la première partie de cette revue de la littérature, nous nous sommes focalisés sur la description générale d'une opération de mélange solide-liquide et des différents phénomènes physiques intervenants. L'objectif, désormais, est de recenser les différentes approches numériques existantes pour traiter de la problématique des écoulements solide-liquide, toujours dans le contexte des opérations de mélange.

Premièrement, lorsque l'on s'attaque à un problème multiphasique de type solide-liquide, la première question que l'on doit se poser est : quelle précision souhaitons nous obtenir pour la résolution de chaque phase ? Cependant, il faut bien avoir conscience, qu'en fonction de la taille de notre système, du nombre de particules, de la complexité du fluide, les coûts de calcul peuvent devenir dramatiquement élevés. A travers cette section, nous commencerons donc par définir les différentes échelles caractéristiques d'un système solide-liquide. Puis nous nous intéresserons aux différentes méthodes numériques existantes pour modéliser de tels systèmes polyphasiques.

2.3.1 Les différentes échelles d'un système diphasique de type solide-liquide

Commençons par définir les trois types d'échelles intervenant à savoir :

— L'échelle macroscopique qui correspond aux dimensions caractéristiques du système.

— L'échelle microscopique où l'on se situe à l'échelle de la particule, par exemple.

— L'échelle mésoscopique qui est une échelle intermédiaire. Cela peut, par exemple, correspondre à l'échelle d'une cellule du maillage fluide (lorsque celle-ci est plus grosse que les particules).

Ces échelles caractéristiques maintenant définies, nous comprenons bien que, dans le cas de système polyphasique, chaque phase peut être observée avec sa propre échelle caractéristique. C'est ce que nous allons étudier ici en nous appuyant sur la Figure 2.18 illustrant une cuve de mélange solide-liquide.

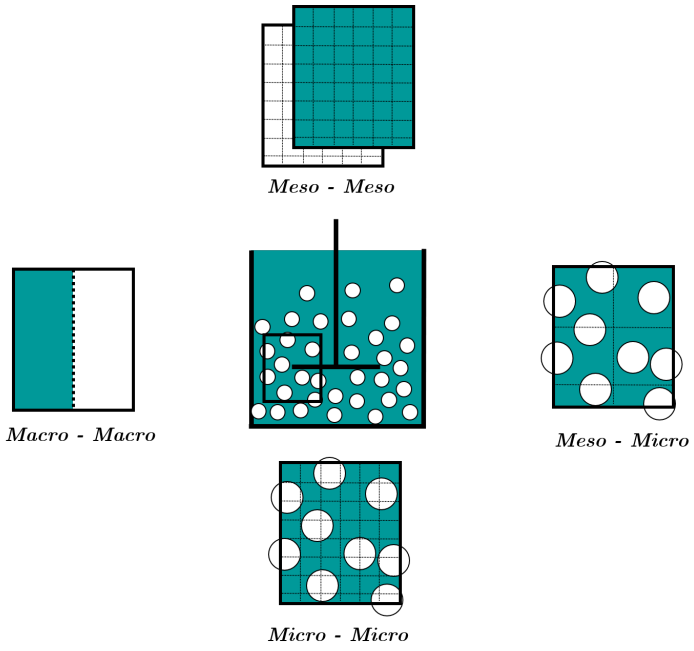

Figure 2.18 Représentation des différentes échelles intervenant dans un système de mélange solide-liquide - inspirée de [12].

Approche microscopique de type Euler - Lagrange

Dans cette approche, le fluide, comme les particules, est résolu à l'échelle microscopique. Pour ce qui est du fluide, la résolution est basée sur les équations de Navier-Stokes. Pour la phase solide, chaque particule est considérée individuellement et les forces d'interaction avec le fluide environnant sont directement calculées par une intégration des contraintes agissant sur celles-ci. Ainsi, ce qui fait une particularité de cette approche, c'est que l'on ne fait pas appel aux relations d'interaction solide-liquide évoquées à la section 2.2.5. Bien évidemment, on comprend que cette approche est très couteuse et elle ne sera utilisée que lorsqu'une

précision très importante est requise. Un exemple de méthode utilisant cette approche est la DNS-DEM (Direct numerical simulation - Discret Element Method) [93].

Approche mésoscopique de type Euler - Euler

Lorsque l'on parle d'approche mésoscopique, on fait référence aux modèles à deux fluides (TFM) où l'ensemble des particules sont considérées comme une deuxième phase continue. Le système est décomposé en cellules suffisamment petites pour suivre l'évolution des deux phases mais reste plus large que la taille des particules. Pour gérer l'interaction entre les deux phases, il est nécessaire de modifier les équations de Naviers-Stokes afin d'obtenir les équations de Naviers-Stokes moyennées volumiquement (VANS) ; lesquelles jouent un rôle particulièrement important dans les études diphasiques de type solide-liquide. Elles seront largement développées dans la suite de cette revue. La capacité de cette approche à bien retranscrire les mouvements du solide, sera fortement dépendante des lois empiriques utilisées pour décrire le couplage entre fluide et solide [94]. De part sa simplicité et ses coûts de calcul raisonnables, cette méthode est la plus employée par les logiciels commerciaux tels que *FLUENT* ou *CFX* [95, 96].

Approche macroscopique

Cette approche très grossière ne permet pas une description tri-dimensionnelle du mouvement des deux phases [12]. Elle permet uniquement d'obtenir des descriptions moyennées des différentes propriétés du fluide et des particules. Un exemple de méthode utilisant cette approche, est le modèle à deux phases (TPM). Cette méthode reste cependant très limitée pour des études de type solide-liquide et encore plus, lorsqu'il s'agit de système de mélange.

Approche micro-méso de type Euler - Lagrange

Nous finissons cette description avec une approche intermédiaire où le fluide est résolu à l'échelle mésoscopique et la phase solide à l'échelle microscopique. Ce qui implique que chaque particule est considérée individuellement. Un exemple de méthode numérique basée sur cette approche est la CFD-DEM. La résolution de la dynamique du fluide est basée sur les équations de Navier-Stokes moyennées volumiquement. Et, pour ce qui est de l'interaction entre les deux phases, on se base sur les relations empiriques déjà largement développées à la section 2.2.5 et que l'on utilise directement dans les équations fluides et solides de conservation de quantité de mouvement.

2.3.2 Approches Euler - Euler appliquées aux mélanges solide-liquide

Après avoir décrit les différentes approches envisageables pour aborder un problème d'interaction fluide solide, nous allons recentrer cette revue sur des applications plus spécifiques au mélange solide-liquide. On peut déjà commencer par noter que la très large majorité des études de mélange solide-liquide ont été menées avec des approches de type Euler-Euler et notamment avec le modèle à deux fluides. Ainsi, nous pouvons citer les travaux de Micale et *al* [97] où il est démontré qu'un tel modèle permet de retrouver la hauteur de suspension. Ensuite, il semble indispensable de ce concentrer sur les recherches de Tamburini et *al* qui ont fortement contribuées à l'analyse numérique des opérations de mélange solide-liquide [56, 59, 94, 98–100]. A travers ces différentes études, la méthode à deux fluides a montré son efficacité pour déterminer la fraction de particule suspendue. Cette méthode est également pertinente pour faire différentes analyses paramétriques ayant un impact sur la qualité de mélange, permettant même d'obtenir la conclusion qu'une suspension complète n'est pas forcément nécessaire pour assurer un bon transfert de masse entre les phases. Nous pouvons cependant noter que ce modèle n'est pas très robuste et fortement dépendant des modèles de force utilisés.

On peut noter d'autres méthodes utilisant une approche de type Euler-Euler. Ainsi, nous pouvons citer la méthode $SIMM$ (Shear-Induced-Migration Model) développée par Fradette et *al* [101]. Cette méthode repose sur l'analyse de la migration des particules des zones de fortes concentrations vers les zones de faibles concentrations, ainsi que des zones à haut taux de cisaillement vers les zones à faible taux de cisaillement. Cependant, ce modèle possède de nombreuses limitations notamment pour gérer l'interaction avec les géométries environnantes [55]. Russ et Bersonont ont, quant à eux, développé une nouvelle méthode appelée « Multi-Phase Mean Age » (MMA), pour prendre en compte la phase solide dans la CFD, sans augmenter de façon significative les temps de calculs [102]. Enfin, on peut noter des méthodes que l'on pourrait classifier d'intermédiaires basées sur des approches Euler-Euler, mais améliorées pour mieux prendre en compte des phénomènes d'interactions qui se produisent au sein de la phase solide. C'est le cas de la méthode $E - E/KTGF$ (Euler-Euler/ Kinetic Theory of Granular Flow) employée par Xie & Luo [103].

Détermination par des méthodes numériques de N_{js}

Comme on a pu le développer dans la première partie, la quantité qui est la plus intéressante dans une opération de mélange solide-liquide, est la vitesse minimale de suspension complète. On attend donc des modèles numériques, qu'ils puissent permettre d'estimer cette vitesse. Cependant, avec des modèles de type Euler-Euler, le caractère continu de la phase solide

complique grandement la détermination d'une telle grandeur. C'est ce qu'explique Tamburini dans [56], en développant des alternatives pouvant être utilisées avec des approches Euler-Euler. Ainsi, on relève « *la méthode des tangentes* » introduite par Hosseini et *al* [104] laquelle consiste à tracer l'évolution de la concentration de solide à 1mm au dessus du fond en fonction de la vitesse d'agitation et de tracer les tangentes aux points où la pente est la plus faible et la plus élevée. L'intersection de ces deux droites permettant de déterminer la valeur de N_{js}. Ensuite, nous pouvons citer « *la méthode de vitesse axiale des particules* » développée par Wang et *al* [105]. Ici, on considère que l'on atteint N_{js} lorsque la vitesse axiale moyenne de la phase solide dans les cellules situées au fond de la cuve devient positive. Ou encore, « *la méthode du nombre de puissance* » utilisée dans des approches expérimentales ; mais qui se transpose également très bien pour des analyses numériques. Enfin, on peut citer la méthode *USC* (« *Unsuspended Solid Criterion* »), imaginée par Tamburini et *al* [59]. L'idée de cette méthode est de comparer la fraction volumique dans une cellule avec la fraction volumique maximale (ϵ_p*). En effet, lors de la mise en suspension, le réarrangement des particules mène à des fractions volumiques plus faibles que $epsilon_p*$. Donc finalement si $epsilon_p \geq epsilon_p*$ les particules sont considérées comme non-suspendues. Selon Tamburini et *al*, cette dernière méthode semble la plus robuste pour approcher de façon acceptable N_{js}.

2.3.3 Approches Euler - Lagrange appliquées aux mélanges solide-liquide

Ce type d'approche reste encore aujourd'hui marginal dans l'étude des systèmes de mélange solide-liquide. Ceci est, en grande partie, expliqué par le fait qu'un système de mélange contient un très grand nombre de particules. Et comme l'approche lagrangienne suppose que chacune de ces particules soit considérée individuellement, cela mène à des coûts de calcul importants. Decker & Sommerfeld furent les premiers en 1996 à utiliser une telle approche dans le cas d'étude de système de mélange. Cependant, les particules étaient regroupées en parcelles limitant ainsi la précision des résultats [106]. C'est réellement avec l'introduction de la CFD-DEM, que cette approche est devenue intéressante pour l'étude des mélanges solides liquides. C'est Derksen en 2003 qui fut le premier à utiliser cette méthode [92]. Suivront ensuite les travaux de Misumi et *al* [107]. Cependant, ces modèles utilisent ce qu'on appelle la CFD-DEM rigide (qui sera introduite ci-après). Ce qui limite ces études à des concentrations diluées. En 2013, Shao et *al* [108] furent les premiers à utiliser la CFD-DEM souple ce qui mènera à des résultats très proches de ceux obtenus expérimentalement, permettant ainsi l'investigation de l'impact des différentes forces d'interaction solide-liquide dans les processus de mélange. Mais c'est réellement en 2016, avec les travaux de Blais et *al* [3, 30, 60, 109], que les résultats de CFD-DEM ,appliqués au mélange solide-liquide, les plus probants, furent obtenus. Ces travaux furent concentrés sur l'étude de la Pitch Blade Turbine (PBT) et des

résultats très précis de fractions suspendues ont pu être obtenus comme en témoigne la Figure 2.19.

Détermination par des méthodes numériques de N_{js}

On a pu voir que mesurer N_{js} avec des approches de type Euler-Euler, pouvait s'avérer être un vrai challenge. Mais, dans le cas d'approche Euler-Lagrange, le fait d'avoir la position de chaque particule facilite grandement les choses. Ainsi, nous retiendrons 3 méthodes qui ont fait leur preuve (cf Figure 2.19) dans le cadre des travaux de Blais et *al* [60] :

— « Pressure Gauge Technique » (PGT) : Cette méthode expérimentale, déjà évoquée plus haut, se transpose très bien numériquement avec une approche de type Euler-Lagrange. Comme en témoigne la figure 2.19 où les courbes de fraction suspendue ont été obtenues avec la PGT.

— « Lagrangian Suspended Fraction Analysis » (LSFA) : Cette technique s'attache à vouloir retranscrire le critère de Zwietering. C'est à dire, à considérer qu'une particule est suspendue lorsqu'elle reste en contact avec le fond de la cuve moins de 2 secondes. La méthode envisagée est alors de considérer une particule comme suspendue si celle-ci se sera déplacée, d'une certaine distance Δx_{js} ou Δz_{js}, dans une direction quelconque, pendant un temps Δt_{js}. Selon Blais et *al* les intervalles acceptables sont : $\Delta t_{js} \in [0.5, 3]$ et $\Delta z_{js} = k d_p$ avec $k \in [0.5, 5]$.

— « Decorrelated Fraction Analysis » (DFA) : Cette méthode repose sur l'analyse des trajectoires de chaque particule. L'idée est de déduire une corrélation entre la position d'une particule à un instant t_0 et un instant t postérieur. Pour cela, il s'agit de résoudre un problème aux valeurs propres à 3 équations i.e., les 3 dimensions du système. La plus grande valeur propre est alors normalisée. Si cette valeur décroit vers une constante qui n'est pas zéro, le système est donc considéré comme non-mélangé. En d'autres termes,on pourra considérer une particule comme suspendue, si et seulement si, cette particule a sa position, à l'instant t, complètement décorrélée de sa position à l'instant t_0 [110].

Au vu de cette revue, nous concluons que les résultats obtenus en CFD-DEM sont les plus intéressants. C'est pourquoi, dans la suite, nous recentrons l'étude sur la description de cette méthode.

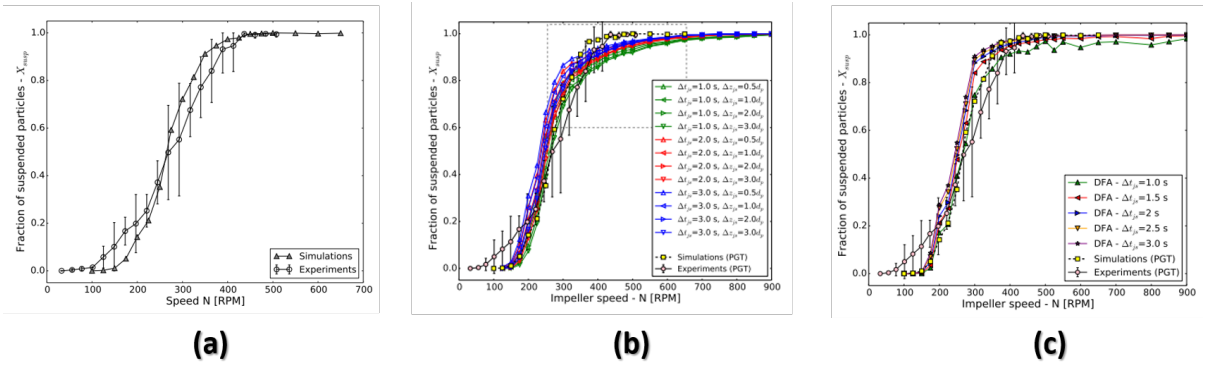

Figure 2.19 Comparaison des courbes de fractions suspendues obtenues expérimentalement et numériquement avec une approche CFD-DEMs associée à différentes méthodes de mesures : (a) PGT (B) LSFA (C) DFA - extrait de [3].

2.4 La CFD-DEM : méthode et enjeux

Dans l'appellation même de cette méthode numérique, on retrouve deux termes : CFD et DEM. Lesquels font référence aux approches numériques employées pour résoudre le comportement du fluide d'une part, et la dynamique des particules d'autre part. C'est pourquoi, à travers cette dernière section, nous nous attacherons à définir, au mieux, ces deux différentes approches, avant de s'intéresser à leur couplage.

2.4.1 Mécanique des fluides numérique (CFD)

Pour la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides, on dénote de nombreuses méthodes, telles que la méthode des différences finies, la méthode des éléments finis, la méthode de Boltzman sur réseaux ou encore la SPH « smoothed particle hydrodynamics »... Par souci de concision, nous nous limiterons à l'étude de la méthode des volumes finis ; celle la plus utilisée dans le cadre de la CFD-DEM aujourd'hui.

Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est l'une des plus matures lorsque l'on parle de CFD. Et c'est également une méthode qui se comprend très bien d'un point de vue physique, car c'est une méthode intrinsèquement conservative. C'est pourquoi, elle demeure encore aujourd'hui très populaire, malgré le fait que d'autres méthodes soient plus précises [111]. Le principe de la méthode repose sur la décomposition du domaine en plusieurs volumes de contrôles (VC) plus petits (Figure 2.20). Au noeuds de chacun de ces volumes, le plus souvent au centre

des VC, sont calculées les valeurs des variables du système. Ce calcul est basé sur l'équation d'advection diffusion que l'on intègre sur chaque volume de contrôle. Ainsi, après application du théorème de Green-Ostrogradski, on obtient la forme intégrale, en régime stationnaire, pour un scalaire passif Φ_i, sur un volume de contrôle donné Ω_i :

$$\underbrace{\int_{S_i} \rho\Phi_i \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} dS}_{Transport} = \underbrace{\int_{S_i} \Gamma \boldsymbol{grad}(\Phi_i) \cdot \boldsymbol{n} dS}_{Diffusion} + \underbrace{\int_{\Omega_i} q_{\Phi_i} d\Omega}_{Source} \tag{2.37}$$

Le terme de gauche représente les phénomènes de transport par convection. Le suivant représente les phénomènes de transport par diffusion et enfin le terme le plus à droite est un terme source.

Si l'on somme les équations pour tous les volumes de contrôles, on obtient une équation de conservation globale pour tout le système Ω. En effet, toutes les intégrales surfaciques vont s'annuler deux à deux, hormis celle sur le contour extérieur du système complet. Ce qui renvoie l'idée d'une méthode numérique intrinsèquement conservative.

Les intégrales surfaciques sur un volume de contrôle peuvent être décomposées comme la somme des flux à travers chacune de ses n surfaces. n dépendant du type de volume utilisé, tétraèdre, hexaèdre...

$$\int_{S_i} f dS = \sum_{k=1}^{n} \int_{S_k} f dS \tag{2.38}$$

Où f représente le terme des intégrales surfaciques de Eq.2.37. Il reste maintenant à calculer ces intégrales. Pour le faire numériquement, une des méthodes les plus efficaces, car simple et d'ordre 2, est la règle du point milieux (« midpoint rule »). Cette règle consiste à approximer l'intégrale, comme le produit de l'aire de la surface considérée avec la valeur de f au centre de celle-ci :

$$\int_{S_k} f dS = f_k S_k \tag{2.39}$$

Il existe d'autres approximations telle que la méthode des trapèzes ou encore des méthodes d'ordres plus élevées telle que la méthode de Simpson [111]. Cependant, nous comprenons bien que nous ne sommes pas au bout de nos efforts. En effet, il reste à déterminer la valeur de f_k. Ceci fera l'objet de la prochaine section où seront décrits différents schémas d'interpolations.

Mais avant, il nous reste à approximer l'intégrale volumique ; ce qui est bien plus aisée. En effet, pour une précision similaire à l'approximation des intégrales surfaciques (Ordre 2), nous

pouvons utiliser la méthode suivante pour un VC Ω_i :

$$\int_{\Omega_i} q_\Phi d\Omega = q_{\Phi_i}\Omega_i \tag{2.40}$$

Comme toutes les grandeurs sont calculées au centre des VC, q_{Φ_i} est alors connu et le calcul de l'intégrale volumique s'arrête ici.

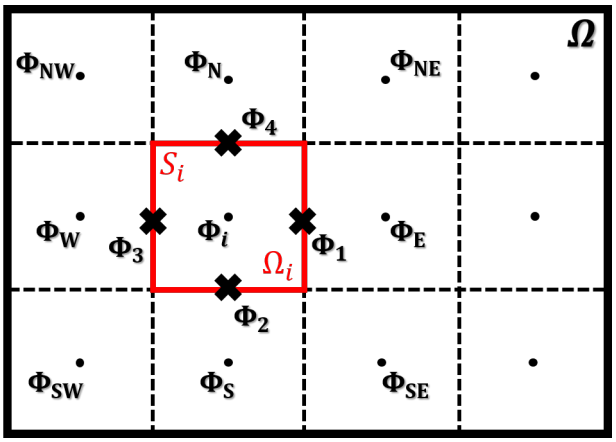

Figure 2.20 Illustration de la méthode des volumes finis en deux dimensions.

Schémas d'interpolation

Revenons à l'approximation des intégrales surfaciques où f_k représente les termes convectifs et diffusifs au centre des faces d'un même VC. Ce terme dépend donc de la quantité Φ_k ($k \in [1, 4]$ sur la Figure 2.20) et de son gradient lié à la surface S_k correspondante. Cependant Φ n'est connu qu'au centre des VC. C'est pourquoi, il est nécessaire d'utiliser des schémas d'interpolation pour approximer Φ_k sur la surface et en déduire f_k. De tels schémas doivent présenter 3 propriétés fondamentales d'après [112] :

— Conservativité : Le flux sortant par une face d'un certain volume de contrôle doit être égal au flux rentrant dans le volume de contrôle voisin à travers cette même surface.

— Borné : En absence de terme source ou de dissipation, la valeur de la quantité étudiée doit rester bornée entre les valeurs extrêmes des conditions initiales. Cette condition est nécessaire pour obtenir une convergence de la solution.

— Transport : La direction de propagation des différentes quantités étudiées doit être respectée par le schéma d'interpolation.

Parmi les schémas d'interpolation les plus connus, il y a le *schéma centré*, lequel consiste simplement à considérer Φ_k comme la moyenne des valeurs aux deux centroïdes voisins. Soit en s'appuyant sur la figure 2.20 :

$$\Phi_1 = \frac{\Phi_i + \Phi_E}{2} \tag{2.41}$$

Si ce schéma est bien conservatif, il ne borne cependant pas la solution dans le cas où le terme convectif est dominant. De plus, le sens du flux n'est pas du tout pris en compte ici ; c'est pourquoi son utilisation est limitée. Pour éviter ce problème de transport, l'un des schémas les plus utilisés est le schéma *upwind* qui consiste à considérer la valeur de Φ_k en fonction de la direction du flux soit avec les notations de la Figure2.20 :

$$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_i & si \quad \boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{n}_1 > 0 \\ \Phi_E & si \quad \boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{n}_1 < 0 \end{cases} \tag{2.42}$$

Ce schéma présente le grand avantage de répondre à tous les critères évoqués ci-dessus, mais malheureusement, il est peu précis car seulement d'ordre 1. Pour une meilleure précision, nous pouvons citer le schéma historique *QUICK* (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics) développé par Leonard en 1979 [113]. La valeur de Φ_k au face est obtenue par une interpolation quadratique utilisant deux noeuds d'un côté et un noeud de l'autre côté de la face considérée, dépendamment du sens du flux pour répondre au critère de transport. Les solutions obtenues, avec de tels schémas, sont toujours plus précises que les schémas évoqués ci-dessus, pour des tailles de grilles équivalentes. Cependant, le schéma *QUICK* est conditionnellement stable, de par le fait que l'on va utiliser des noeuds qui sont plus éloignés du centre d'intérêt. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur aux chapitres 5 et 7 de [112].

Stratégie de résolution pour un fluide incompressible

Jusque là, nous avons décrit le processus des volumes finis en prenant comme variable un scalaire Φ_i. Nous pouvons donc supposer que nous pouvons remplacer Φ_i par le vecteur vitesse v et dérouler le processus ci-dessus pour en déduire facilement le champ de vitesse. Cependant, le lecteur attentif se souviendra du début de cette revue de littérature traitant de la mécanique des fluides incompressibles (Section 2.1.1). En effet, en écrivant les équations de conservation de la quantité de mouvement dans les trois directions, on dénote plusieurs problématiques :

— Un terme convectif non-linéaire avec ρu^2

— Un terme de pression qui apparait dans les 3 équations

Or, dans le cas d'un fluide incompressible, la pression n'est absolument liée à aucune grandeur physique. Contrairement aux fluides compressibles où la pression est liée à la température et la densité. Il n'y a alors aucun moyen de pouvoir calculer de façon simple le champ de pression, ainsi que le champ de vitesse. Pour contourner le problème de cette non-linéarité et de ce couplage vitesse-pression, une des stratégies les plus courantes, est l'utilisation de solveurs basés sur un principe de prédiction-correction. Le plus simple est le schéma *SIMPLE* (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) introduit par Patankar et Spalding en 1972 [114]. Ce type de schéma, à la base de beaucoup d'autres, se décompose en plusieurs étapes au sein d'une même itération :

— On réutilise le champ de pression P^* du pas de temps précédent.

— **Prédiction** du champ de vitesse $\boldsymbol{u}^*$ à partir de P^*, à l'aide des équations de conservation de la quantité de mouvement discrétisées avec les schémas d'interpolations évoqués plus haut. Cependant, il n'y a pas de raison pour que ce champ de vitesse soit à divergence nulle.

— Résolution de l'équation de Poisson pour la pression (divergence de l'équation de momentum). Obtention de P'.

— **Correction** du champ de vitesse à l'aide de P'. À cette étape on s'assure d'avoir un champ de vitesse à divergence nulle.

Cependant, ce schéma présente des limitations pour des régimes instationnaires. Ce qui est amélioré par l'introduction d'une boucle dans l'étape de correction. Ce qui signifie que l'étape de correction est répétée autant de fois que voulue par l'utilisateur, au sein d'un même pas de temps. C'est l'idée de base de l'algorithme *PISO* (Pressure Implicit with Splitting of Operators) introduit par Issa en 1986 [115].

2.4.2 La méthode des élements discrets (DEM)

La méthode des éléments discrets est une méthode de modélisation numérique pour le suivi Lagrangien de systèmes granulaires. Ainsi, cette méthode, en se basant sur la résolution de la seconde équation de la dynamique de Newton, permet de connaitre la position et la vitesse de toutes les particules présentes dans un système. Et cela, à tout instant. La difficulté, lorsque l'on fait des études de dynamiques granulaires, est de gérer la collision entre les particules. Pour cela, on dénote deux types de DEM. Tout d'abord, il y a la DEM rigide (DEMh), où chaque particule est considérée comme un corps complètement rigide et où la collision est gérée de façon instantanée. Une analyse des propriétés physiques des particules, permet de

déduire les composantes cinématiques après la collision [116]. Cette forme de DEM n'est, cependant, adaptée qu'au contact entre deux particules seulement. Nous comprenons donc qu'elle ne peut pas être envisagée avec des applications de CFD-DEM avec des fractions volumiques importantes. C'est pourquoi, nous nous focaliserons sur la deuxième, appelée DEM souple (DEMs). Laquelle est la méthode historique de modélisation des matériaux granulaires introduite par Cundall et Strack en 1969 [117]. Ici, un overlap est autorisé entre les particules. Et, on en déduit le comportement post-collision à l'aide de différents modèles de forces, choisis selon l'application voulue [118, 119]. À partir de maintenant, nous écrirons simplement DEM, sous entendu le fait que nous nous placerons toujours dans le contexte de la DEM souple.

A noter que dans la présente étude, nous nous intéresserons uniquement aux particules sphériques. Ceci dit la méthode des éléments discrets a connu de nombreuses avancées, ces dernières années, concernant la modélisation de particules de formes quelconques [120, 121].

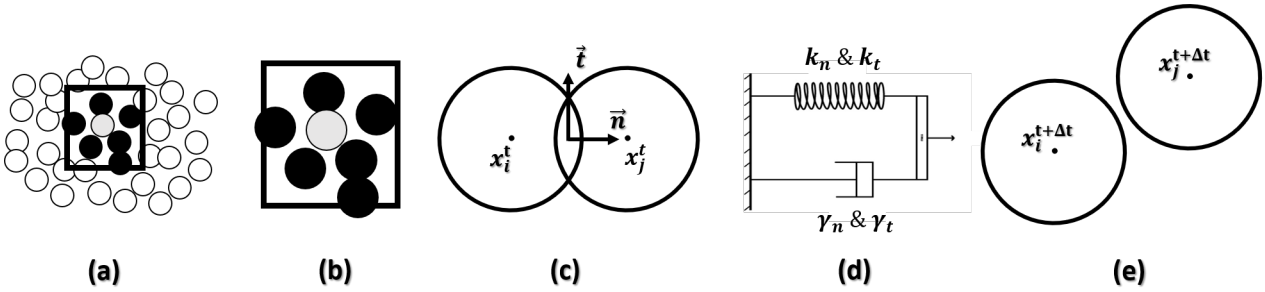

Figure 2.21 Illustration des différentes étapes d'un pas de temps DEM

Intéressons nous maintenant plus particulièrement au processus employé dans une simulation DEM. Un pas de temps de DEM se décompose en plusieurs étapes résumées à la Figure 2.21. Comme dit plus haut, chaque particule solide est considérée individuellement. Ainsi, pour détecter les éventuels contacts avec d'autres particules, nous limitons la recherche à ses plus proches voisines permettant ainsi d'accélérer les temps de calculs (Figure 2.21 (a) & (b)). Une fois la particule isolée avec ses voisines, on compare la distance relative entre celle-ci et la somme de leurs rayons, deux à deux. En cas de chevauchement, soit $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| < r_i + r_j$ on calcul une composante normale ($\boldsymbol{\delta}_{n,ij}$) et tangentielle ($\boldsymbol{\delta}_{t,ij}$) de ce chevauchement (Figure 2.21 (c)) :

$$\|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}\| = (r_i + r_j - d_{ij}) \tag{2.43}$$

$$\boldsymbol{\delta}_{t,ij} = \int_{t_i}^{t} \boldsymbol{v}_{t,ij} dt \tag{2.44}$$

Permettant ainsi de définir une force de contact décomposée en deux composantes ; une normale ($\mathbf{f}_{cn,ij}$) et une tangentielle ($\mathbf{f}_{ct,ij}$) :

$$\mathbf{f}_{c,ij} = \mathbf{f}_{cn,ij} + \mathbf{f}_{ct,ij} \tag{2.45}$$

Cette force est directement ajoutée au bilan de force sur la particule i, dont les équations de conservation de la quantité de mouvement et de moment s'écrivent [119] :

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{f}_{c,ij} + \sum_w \mathbf{f}_{c,iw} + \sum_k \mathbf{f}_{nc,ik} + \mathbf{f}_{g,i} \tag{2.46}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{M}_{c,ij} + \mathbf{M}_{r,ij} + \sum_w \mathbf{M}_{c,i\omega} + \mathbf{M}_{r,i\omega} \tag{2.47}$$

Avec m_i et I_i la masse et le moment d'inertie de la particule, $\mathbf{f}_{c,ij}$ la force de contact entre deux particules en collision, $\mathbf{f}_{c,iw}$ la force de contact entre la particule et un élément w de la géométrie du système, $\mathbf{f}_{nc,ij}$ les forces s'exerçant à distance entre deux particules comme les forces électro-statiques ou les forces de van der Waals, $\mathbf{f}_{g,i}$ les forces volumiques comme la force de gravité par exemple, $\mathbf{M}_{c,ij}$ le couple généré par le contact entre deux particules, $\mathbf{M}_{r,ij}$ le couple généré par la friction de roulement entre deux particules. A noter que l'on retrouve ces même couples dans le cas d'un contact avec un élément ω de la géométrie ($\mathbf{M}_{c,i\omega}$, $\mathbf{M}_{r,i\omega}$).

Finalement, toute la subtilité de la méthode, réside dans le choix de modélisation des forces de contacts normales et tangentielles (Figure 2.21 (d)).

Les différents modèles de forces

Pour ce qui est des forces de contacts normales, il existe plusieurs modèles. D'abord, celui du potentiel continu introduit par Aoki et *al* [122]. Mais celui-ci présente des limites physiques dans le cas de non-contacts entre les particules [123].
Après, nous pouvons citer le modèle historique de Cundall et Strack [117] qui est un modèle visco-élastique linéaire, plus simplement appelé modèle « *ressort-amortisseur* ».

$$\mathbf{f}_{c,ij} = -k_n \boldsymbol{\delta}_{n,ij} - \gamma_n \dot{\boldsymbol{\delta}}_{n,ij} \tag{2.48}$$

Avec k_n et γ_n les coefficients de rigidité et d'amortissement normaux qui sont directement liés aux propriétés physiques des particules comme le module d'Young, le coefficient de restitution, le coefficient de Poisson et le coefficient de Lamé. Cependant, ce modèle présente la faiblesse de considérer la dissipation dûe à la déformation plastique comme un amortissement dépendant de la vitesse alors que la plasticité est un phénomène purement reliée à la déformation [124]. C'est pourquoi, Walton and Braun [125] ont, quant à eux, proposé de modéliser l'amortissement avec un autre ressort non-chargé, présentant un autre coefficient de rigidité. Ce coefficient de rigidité pouvant même varier en fonction du moment de la collision (pénétration ou éloignement) [126].

Toutefois, une façon plus juste et rigoureuse est de considérer un modèle visco-élastique non-linéaire. Parmi les modèles les plus performants, nous pouvons citer le modèle introduit par Tsuji et *al* [127] :

$$\mathbf{f}_{c,ij} = -k_n \boldsymbol{\delta}_{n,ij}^{\frac{3}{2}} - \gamma_n |\boldsymbol{\delta}_{n,ij}^{\frac{1}{4}}| \dot{\boldsymbol{\delta}}_{n,ij} \tag{2.49}$$

Ce type de modèle se base sur la théorie de Hertz [128], pour la partie élastique. Laquelle caractérise les contraintes développées lors d'un contact entre deux surfaces courbes. Pour ce qui est de la caractérisation de la dissipation, le choix d'utiliser un amortisseur linéaire ou non, dépendra du cas d'application [129, 130].

Pour ce qui est des forces de contacts tangentielles, leur étude reste limitée et la quasi totalité des modèles sont basés sur la théorie de Midlin et Deresiewicz [131, 132] pour la partie élastique ; à laquelle on ajoute simplement un amortisseur tangentiel :

$$\mathbf{f}_{t,ij} = -k_t \boldsymbol{\delta}_{t,ij} - \gamma_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_{t,ij} \tag{2.50}$$

Avec k_t et γ_t les coefficients de rigidité et d'amortissement tangentiels, lesquels dépendent également des propriétés physiques des particules mais aussi du chevauchement normal.

Une fois le modèle de force choisi, pour finir le pas de temps de DEM, il ne reste plus qu'à intégrer les équations du mouvement pour en déduire les nouvelles composantes cinématiques de la particule considérée (Figure 2.21 (e)). Le processus que nous venons de décrire, doit bien évidemment être fait pour chaque particule. Ce qui met en lumière le fait que le temps de simulation DEM est étroitement lié au nombre de particules constituant le système. A noter également, que la valeur du pas de temps doit être choisie avec attention pour assurer la stabilité des simulations. En effet, comme nous l'avons vu, en DEM souple, nous autorisons un chevauchement entre les particules ; un pas de temps trop élevé impliquerait donc une inter-

pénétration des particules plus importantes et ainsi des forces de contacts dramatiquement élevées (comme lorsque l'on compresse un ressort). Le critère le plus souvent admis est de prendre une fraction α du temps de Rayleigh.

$$\Delta t_{DEM} = \alpha \Delta t_{Ra} = \alpha \frac{\pi}{2} d_p \sqrt{\frac{\rho_p}{G}} \left(\frac{1}{0.163\nu + 0.8766} \right) \tag{2.51}$$

Avec G le second coefficient de Lamé, ν le coefficient de Poisson et alpha un coefficient compris entre 0 et 1. Différentes valeurs ont été utilisées dans la littérature comme 0.5 [133], 0.4 [134] ou encore 0.1 [135]. En résumé, il faut choisir un pas de temps inférieur au temps qu'il faut à l'onde de choc générée, pour parcourir une distance égale à un diamètre de particule.

2.4.3 Schémas numériques pour la résolution d'EDO : Application à la méthode des éléments discrets

Nous pouvons relever un joli euphémisme, dans le paragraphe ci-dessus, avec le passage : « il ne reste plus qu'à intégrer les équations du mouvement ». Mais, nous savons très bien que cette opération n'est pas si simple qu'il n'y parait. C'est maintenant l'objet de la présente section. Comme nous avons pu le voir, la méthode des éléments discrets repose sur les équations différentielles ordinaires données par la seconde loi de Newton. Il est donc nécessaire, tout comme on l'a fait pour la résolution des EDP de la mécanique des fluides, de faire une rapide revue des différentes méthodes pour intégrer ce type d'équation. Nous pourrions nous attarder sur les très classiques schémas d'Euler implicite, explicite, ou Runge Kutta 2,3,4 ; ou encore les méthodes à pas multiples avec les schémas d'Adams-Moulton, ou encore d'Adams-Brashford [136]. Cependant, l'objectif n'est pas de répertorier tous les schémas de résolutions d'EDO existants. Mais bien de se concentrer plus particulièrement sur les méthodes d'intégrations utilisées dans la DEM. Il est aujourd'hui communément accepté, que la caractéristique la plus importante que doit présenter le schéma d'intégration d'une méthode de modélisation de dynamique granulaire, est la conservation de l'énergie. Et ceci est d'autant plus important si l'on considère des collisions purement élastiques, sans aucune dissipation (coefficient de restitution égale à un). Il existe une classe d'intégrateur, appelé schéma symplectique, qui assure cette propriété [137]. L'idée principale de ce type de schéma, est basée sur une mise à jour de la position, avant le calcul de la vitesse au sein du même pas de temps. Ainsi, tous les schémas évoqués plus haut comme les schémas d'Euler ou de Runge Kutta, peuvent être adaptés pour devenir des schémas symplectiques [138]. Mais, le schéma le plus utilisé dans le cas de la méthode des éléments discrets, est le schéma de Verlet vitesse [139]. Ce schéma d'ordre 2 en position et en vitesse, est celui utilisé dans de nombreux codes OpenSource de DEM, comme YADE [140], MERCURY [141] ou LIGGGHTS [142]. La particularité de ce

schéma repose sur une mise à jour de la vitesse au demi pas de temps, avant de calculer la position finale laquelle permettra ensuite d'en déduire la vitesse (Eq.2.52).

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_{n+1/2} = \boldsymbol{v}_n + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_n) \\ \boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{x}_n + h\boldsymbol{v}_{n+1/2} \\ \boldsymbol{v}_{n+1} = \boldsymbol{v}_{n+1/2} + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_{n+1}) \end{cases} \tag{2.52}$$

avec $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{a}$ les vecteurs position, vitesse et accélération et h le pas de temps numérique.

2.4.4 CFD-DEM pour des applications solide-liquide

Tous ces termes maintenant définis, nous pouvons enfin nous concentrer sur la méthode de couplage de la mécanique des fluides et de la dynamique granulaire : la CFD-DEM. Cette méthode numérique est relativement récente et son essor peut être relié à l'amélioration des capacités de calculs des nouveaux ordinateurs. En effet, la CFD-DEM est basée sur une approche Euler-Lagrange où le fluide est considéré de façon continu contrairement à la phase solide où les particules sont considérées individuellement. Ainsi, la CFD-DEM permet d'obtenir les champs de vitesse, de pression, de température, de concentration du fluide mais également, la position et la vitesse de chaque particule, de même que l'intensité des forces d'interactions solide-solide et solide-fluide à chaque instant de la simulation. Ce qui en fait une méthode très puissante et précise pour les analyses de systèmes polyphasiques tels que les systèmes de mélange solide-liquide.

Commençons par classifier la CFD-DEM en deux catégories distinctes. La CFD-DEM résolue où la taille d'une cellule fluide est plus petite que la taille d'une particule. Et la CFD-DEM non-résolue où plusieurs particules peuvent occuper la même cellule fluide. Nous comprenons aisément que la CFD-DEM résolue voit son domaine d'application limitée lorsque la fraction de particules est importante. Ainsi, pour des applications aux systèmes de mélange solide-liquide, il n'y a d'autre choix que d'opter pour une approche non-résolue. C'est pourquoi, dans toute la suite nous nous placerons uniquement dans le cadre de la CFD-DEM non-résolue.

Les équations de Navier-Stokes moyennées volumiquement (VANS)

Il parait évident que la présence d'entités solides dans une phase continue vient quelque peu perturber l'écoulement. C'est pourquoi, les équations de Navier-Stokes « classiques » qui sont à la base de la CFD, doivent être quelque peu adaptées. C'est ainsi que nous introduisons les équations de Navier-Stokes moyennées volumiquement (VANS). On retrouve de nombreuses formulations de ces équations dans la littérature [73,143–147], en fonction de la stratégie em-

ployée pour moyenner. Cependant, malgré le fait que ces équations soient largement utilisées, l'auteur regrette qu'il n'y ait pas à sa connaissance de démonstration propre et complète de ces équations, dans la littérature. Ces équations se résument à la formulation suivante pour une phase considérée i :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_i \rho_i) + \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i \boldsymbol{u}_i) = 0 \tag{2.53}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_i \rho_i \boldsymbol{u}_i) + \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i \boldsymbol{u}_i \otimes \boldsymbol{u}_i) = -\epsilon_i \nabla p + \epsilon_i \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \epsilon_i \boldsymbol{F}_g \tag{2.54}$$

Avec $\boldsymbol{F}_g$ les forces volumiques. Toutefois, ceci reste une forme générale. Et pour répondre à différentes stratégies de résolution, ces équations peuvent être modifiées. En CFD-DEM, on retient deux formes A et B de ces équations [148, 149], qui sont celles implémentées dans le code open-source *CFDEM* [150], le code de CFD-DEM le plus populaire actuellement [12]. A noter que ces deux formes présentent la même expression pour l'équation de conservation de la masse. En revanche, les formulations de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, diffèrent. En effet, dans la forme B, on ne multiplie pas directement le gradient de pression par ϵ_f. Ce qui permet d'obtenir une équation pour la pression, similaire à celle obtenue avec les équations de Navier-Stokes « classiques ». Alors que pour la forme A, on multiplie directement le gradient de pression par la fraction volumique. Ces deux formulations sont complètement équivalentes, d'un point de vue mathématique, mais présentent chacune des avantages et des inconvénients, notamment vis à vis de la stabilité [151]. De plus, plusieurs expériences numériques ont été menées avec ces différentes formulations, menant à des résultats comparables [152].

Stratégie de couplage

Après avoir vu la base théorique sur laquelle repose la CFD-DEM, l'étape suivante est de se demander comment coupler les deux phases. Pour cela, les bonnes questions à se poser sont : Quel type de transfert s'effectue entre les phases ? Quel est l'impact de la concentration de particules sur le transfert ? À quelle échelle les phénomènes physiques sont bien capturés par chaque phase ? En fonction des réponses à ces questions, différentes stratégies de couplage pourront être envisagées.

— *One-way coupling* : Le fluide a un impact non négligeable sur le mouvement des particules alors que le mouvement des particules n'influence pas l'écoulement autour d'elles. Ainsi, les équations fluides pourront être résolues sans prendre en compte de termes de couplages. Applicable pour de faibles concentrations de particules.

— *Two-way coupling* : Les phases ressentent chacune l'effet de l'autre. Ce qui oblige la prise en compte dans les équations de chaque phase d'un terme de couplage.

— *Three-way coupling* : Les perturbations intrinsèques au fluide comme celle générée par la turbulence, peuvent avoir un impact sur le mouvement des particules. C'est ce que le *Three-way coupling* s'attache à prendre en compte.

— *Four-way coupling* : Ce dernier mode de couplage permet une prise en compte très précise des interactions fluide-solide. En effet, en plus des phénomènes physique évoqués ci-dessus, ce mode de couplage permet de tenir compte de l'influence de la collision des particules, sur le mouvement du fluide environnant. Dans le cas de solutions non-diluées la prise en compte de ces contacts est un élément essentiel.

En résumé, nous pouvons formuler les équations de la CFD-DEM avec une stratégie de *Four-way coupling* de la façon suivante :

— *CFD - Forme A* :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_f \rho_f \boldsymbol{u}_f) + \nabla \cdot (\epsilon_f \rho_f \boldsymbol{u}_f \otimes \boldsymbol{u}_f) = -\epsilon_f \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \epsilon_f \boldsymbol{F}_g - \frac{1}{\Delta V} \sum_i^{n_p} (\boldsymbol{f}_{pf,i} - \boldsymbol{f}_{\nabla p,i} - \boldsymbol{f}_{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},i}) \tag{2.55}$$

$$Avec \quad \boldsymbol{f}_{pf,i} = \boldsymbol{f}_{drag,i} + \boldsymbol{f}_{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},i} + \boldsymbol{f}_{\nabla p,i} + \sum \boldsymbol{f}_{additional,i} \tag{2.56}$$

— *DEM* :

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{f}_{c,ij} + \sum_w \mathbf{f}_{c,iw} + \sum_k \mathbf{f}_{nc,ik} + \mathbf{f}_{g,i} + \boldsymbol{f}_{pf,i} \tag{2.57}$$

Avec $\boldsymbol{f}_{pf,i}$ la force du fluide sur chaque particule i, $\boldsymbol{f}_{additional,i}$ les forces de Saffman, de masse virtuelle, de Basset, de Magnus exercées sur chaque particule et n_p le nombre de particules.

Enfin, il est intéressant de se questionner sur les pas de temps utilisés. En effet, nous avons pu voir que la DEM requiert des pas de temps très faibles pour assurer la stabilité des simulations. Les équations CFD, n'ont quant à elles, pas besoin d'être résolues avec de si faibles pas de temps. C'est pourquoi, pour augmenter la performance des simulations, il sera préférable d'utiliser des pas de temps différents pour les calculs CFD et DEM. Le pas de temps de couplage étant généralement égal à celui utilisé pour la CFD. Ainsi, pour un pas de temps CFD, il est réalisé N pas de temps DEM. Pour plus de précisions sur les critères de stabilité liés aux choix des différents pas de temps, nous renvoyons le lecteur à [3].

Méthodes de définition de la fraction volumique

Il reste une zone d'ombre sur cette méthode. En effet, depuis maintenant plusieurs paragraphes, nous parlons de « fraction volumique » sans vraiment s'attarder dessus. En effet, si le concept de fraction volumique est relativement facile à appréhender, il est important de se demander comment ce concept est traité numériquement. La méthode la plus simple est de ne regarder que la position du centroïde de chaque particule et de considérer que tout le volume de la particule est dans la cellule fluide où se situe ce centroïde. On parlera alors d'approche centrée. Mais nous comprenons que, plus le maillage est fin, plus il y aura de grosse discontinuité de la fraction volumique engendrant une perte du caractère conservatif. Ce qui est très important d'un point de vue physique. C'est pourquoi, plusieurs autres méthodes on été proposées, comme la méthode à deux grilles [153] où une grille supplémentaire est spécialement utilisée pour la définition de la fraction volumique. Mais cette méthode ne mène pas à des résultats bien meilleurs pour les coûts de calcul de plus que la complexité d'implémentation demandée. Une revue de ces différentes méthodes avec leurs avantages et inconvénients est donnée par [154]. Nous retiendrons cependant une de ces méthodes car elle est relativement simple à mettre en place et présente de bons résultats ; il s'agit de l'approche divisée [3]. La particule est divisée en 27 régions de même volume. Le calcul de la fraction volumique est alors basé sur la position du centre de chacune de ces régions sur la grille fluide. Cela permet d'assurer une certaine conservativité de la masse, tout en venant améliorer la continuité de la fraction volumique ainsi que du terme d'interaction $\boldsymbol{f}_{pf,i}$ entre les deux phases.

2.4.5 Conditions limites en mouvements

A ce point, il reste un dernier aspect de la modélisation numérique d'opération de mélange solide-liquide que nous n'avons pas abordé. Si celui-ci n'est pas propre à la CFD-DEM, il est cependant très important pour ne pas avoir des coûts de calcul dramatiquement élevés. Coûts déjà importants, avec cette méthode de couplage. Jusqu'ici, nous avons vu comment modéliser le fluide, les particules solides et comment gérer l'interaction entre les deux. Mais, ce ne sont pas les seuls éléments que l'on retrouve dans une cuve. Si nous revenons à la section 2.1.3 qui traite de la géométrie, il y a un élément prédominant, non-évoqué encore : l'agitateur. La modélisation de cette géométrie en rotation est tout sauf une chose facile. A chaque pas de temps, l'agitateur se déplace. Ce qui implique que nous devons remailler tout le domaine pour prendre en compte cette nouvelle position. Nous comprenons qu'une telle opération est beaucoup trop chronophage pour être viable et ce, d'autant plus si la géométrie est complexe. C'est pourquoi plusieurs méthodes ont pu être développées pour contourner cette problématique.

Méthode du maillage glissant

C'est la méthode la plus utilisée dans de nombreux logiciels commerciaux tel que *FLUENT* ou encore *CFX* [95, 96]. Le domaine est décomposé en deux sous-domaines : un avec un maillage statique et un autre avec un maillage en rotation contenant l'agitateur. Les équations fluide sont alors résolues séparément dans les deux sous-domaines. La complexité de cette méthode réside dans le fait, qu'à l'interface entre les maillages nous perdons la conformité de celui-ci. C'est à dire que les faces d'un sous domaine, ne correspondent pas forcément avec les faces de l'autre sous-domaine. Pour faire face à cette problématique et toujours assurer la conservation de la masse, le couplage entre les deux sous-domaines est effectué à l'aide d'interpolations [155, 156].

Méthode des conditions immergées

L'idée, avec la méthode des conditions immergées, est d'introduire un terme de forçage directement dans les équations de Navier-Stokes, pour les cellules fluides où l'agitateur est présent. Pour une description mathématique rigoureuse de cette méthode, nous renvoyons le lecteur à [157,158]. Cependant, cette approche présente de nombreux challenges. Le premier est tout d'abord la détection de ces cellules non-immergées. Cela impose d'avoir un maillage très fin autour de cette zone pour assurer une bonne précision sur la position du mélangeur. De plus, si nous venons à modifier les équations de Navier-Stokes, cela implique d'avoir des solveurs adaptés. Blais et *al* se sont attachés à développer un solveur *PISO-IB* (Pressure Implicit with Splitting of Operators-Immersed Boundaries) adapté à la CFD-DEM [109] avec les résultats probants déjà évoqués ci-dessus (*cf* Figure 2.19). Une autre approche similaire, évitant cette problématique est l'approche discrète où les équations de Navier-Stokes sont résolues sans terme de forçage. Et, c'est seulement après le calcul que le flux global est modifié en considérant des conditions limites de non-glissement pour les cellules en mouvements [159].

Après avoir décrit ces deux premières méthodes, l'auteur voudrait que l'on s'attarde sur la Figure 2.22. Cette figure met en évidence plusieurs problématiques importantes que sont le volume balayé par l'agitateur, la distance avec la cuve (E) et l'épaisseur caractéristique (e). Ceci sont des facteurs très importants pour la discussion sur les conditions limites pour des corps en mouvement. En effet, dans le cas du maillage glissant, le coût de calcul sera fortement dépendant de la surface de l'interface entre les deux maillages. De plus, avoir un agitateur raclant compliquera la délimitation des domaines. Pour la méthode des conditions immergée, nous avons besoin, comme nous l'avons déjà évoqué, d'avoir un maillage raffiné dans la zone de l'agitateur. Dans le cas de géométries avec des dimensions caractéristiques faibles, e.g. l'épaisseur d'un ruban, le raffinement nécessaire serait dramatiquement élevé

menant à un nombre de cellules très important et ainsi des coûts de calculs multipliés ou même des résultats complètement imprécis. A travers cette description, nous pouvons voir les limites de l'utilisation de ces deux méthodes.

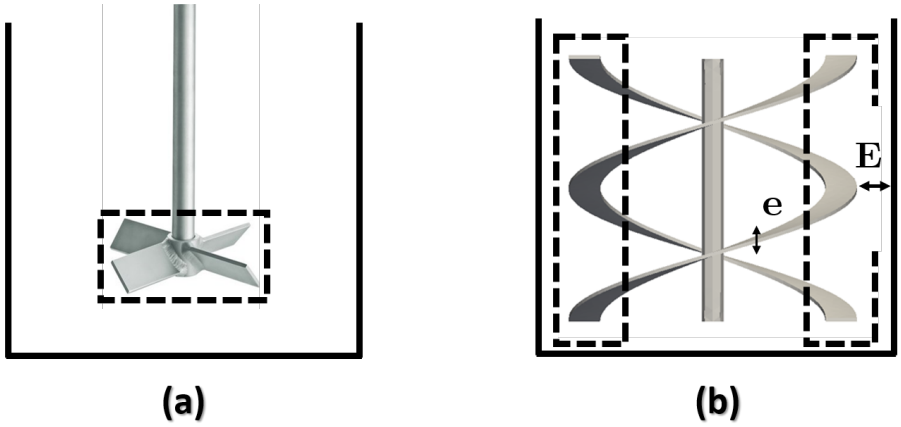

Figure 2.22 Illustration des principales différences entre des géométries que l'on peut considérer comme relativement simples et complexes (a) Turbine à pâle inclinée (b) Double ruban hélicoïdal

Méthode du référentiel tournant

Nous avons volontairement omis cette dernière méthode [160], pourtant très classique ; qui permet de contourner les problèmes évoqués ci-dessus. En effet, la problématique étant d'avoir une géométrie en rotation, l'idée est de complètement changer de point de vue, en faisant toute l'étude dans le référentiel en rotation lié à l'agitateur. Cependant, cette méthode présente aussi ses propres difficultés. En effet, un référentiel tournant est non-Galiléen. Ce qui implique de prendre en compte les forces de Coriolis et centrifuges.

$$\boldsymbol{F}_{coriolis} = -2m\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{u} \tag{2.58}$$

$$\boldsymbol{F}_{centrifugal} = -m\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{q}) \tag{2.59}$$

Avec $\boldsymbol{q}$ le vecteur position. Cette approche est très classique en CFD et est très souvent utilisée pour modéliser les opérations de mélange solide-liquide, avec des approches de type Euler-Euler [88, 104, 161–163]. Cependant, pour une approche de type Euler-Lagrange, cela impliquerait d'effectuer les calculs de dynamique granulaire dans un référentiel en rotation également. À la connaissance de l'auteur, seuls les travaux de Shirsath et *al* traitent de cette problématique, mais pour des vitesses relativement faibles, et sans couplage avec un fluide

liquide [164–166].

Finalement, nous souhaiterions conclure cette revue de littérature, comme nous l'avions commencer. En effet, nous avions débuté en listant les différents paramètres intervenant dans une étude de mélange solide-liquide. Et nous avons utilisé la théorie de $\Pi - Buckingham$ pour définir le nombre de nombres adimensionels. Mais, le lecteur attentif aura noté que dans le cas de la méthode en référentiel tournant évoquée ci-dessus, nous faisons intervenir un nouveau paramètre avec la vitesse de rotation du référentiel. Ainsi, toujours selon la thérorie de $\Pi - Buckingham$, nous devons définir un nouveau nombre adimensionel. C'est pourquoi, nous introduisons le nombre de Rossby qui permet de comparer l'importance relative entre forces inertielles et les forces dûes à la rotation du référentiel [72] :

$$R_0 = \frac{u_f}{2\Omega L sin(\phi)} \tag{2.60}$$

Avec u_f la vitesse du fluide dans le référentiel tournant, L une distance caractéristique du système, Ω la vitesse angulaire du référentiel et ϕ un angle caractéristique. Par exemple, en géophysique, ce serait la latitude. Quand $R_o > 1$, la rotation n'a pas d'impact sur le système. Alors que quand $R_o << 1$, l'effet de la force de Coriolis n'est pas négligeable.

2.5 Synthèse et objectifs de recherche

Au vue de cette revue de la littérature, nous pouvons comprendre que l'étude du mélange solide-liquide connait un vrai départ en 1958 sous l'impulsion de Zwietering et la publication de la première corrélation empirique pour la détermination de la vitesse minimale de suspension. Depuis, on peut voir que les études sur ce sujet se sont multipliées. Cependant, on peut regretter que, malgré les avancées dans la compréhension des phénomènes physiques mis en jeux, le développement des ressources informatiques ainsi que de nouvelles méthodes expérimentales, la corrélation de Zwietering soit encore au centre du débat ; alors que son imprécision fut prouvée à plusieurs reprises. De plus, même si des centaines d'études expérimentales et numériques ont été menées ces dernière années, cette revue de la littérature met en lumière que la grande majorité reste tournée vers les mêmes problématiques. À savoir l'étude de fluide non-visqueux avec des mélangeurs à géométries simples comme la PBT ou la turbine Rushton. Ceci est d'autant plus regrettable, qu'aujourd'hui de nombreux procédés industriels utilisent des fluides visqueux ainsi que des fractions volumiques de solide importantes. De plus, c'est précisément pour ce genre de conditions que la corrélation de Zwietering connait ses principales limites [39, 46].

C'est, avec cette idée en tête, que depuis quelques années maintenant, l'Unité de Recherche

en Procédé d'Écoulement Industriel (URPEI), mène ces activités de recherche dans le domaine du mélange solide-liquide. Ainsi, nous pouvons citer les travaux de Lassaigne et *al* [10] où le mélange solide-liquide à faible nombre de Reynolds a été étudié de façon expérimental avec des mélangeurs à géométrie simple comme la PBT. Ensuite, les travaux de Blais et *al* [3, 30, 60, 109] se sont intéressés au développement d'un nouveau modèle numérique pour modéliser les opérations de mélanges solide-liquide en milieux visqueux avec une approche Euler-Lagrange utilisant la méthode des conditions immergées. Les différents résultats numériques et expérimentaux ont ainsi pu être comparés avec des conclusions très convaincantes. A noter que, si de si bon résultats ont pu être obtenus c'est en grande parti dû au choix d'utiliser une approche Euler-Lagrange. Ce qui a permis de décrire la dynamique granulaire de façon très précise, tout en conservant des coûts de calcul raisonnables avec une approche plus grossière du fluide. Ces résultats sont absolument novateurs, car jusqu'à alors, la très large majorité des travaux numériques utilisait des modèles à deux fluides comme en témoignent les nombreux papiers de Tamburini et *al* sur le sujet [56, 59, 94, 98–100]. Pour finir, nous pouvons retenir les travaux plus récents de Bertrand et *al* [7] qui, toujours en milieux visqueux, ont investigué de manière expérimentale le mélange-solide liquide avec des géométries plus complexes, telles que le double ruban hélicoïdal.

C'est donc de façon naturelle que se dégage l'objectif principal de ce projet de recherche. À savoir :

« Développer un modèle Euler-Lagrange, basé sur la CFD-DEM, permettant l'étude du mélange solide-liquide en milieux visqueux sans limitation sur la géométrie de l'agitateur. »

Pour s'affranchir de la problématique de la rotation du mélangeur qui limite ainsi les géométries étudiables, ce qui ressort de la revue de littérature, est le développement de ce modèle numérique dans un référentiel tournant. Cette approche complètement novatrice de la CFD-DEM implique de répondre à plusieurs sous-objectifs intermédiaires que nous définissons comme :

— Adapter un code DEM pour une résolution en référentiel non-inertiel.

— Développer un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel.

— Étudier un système de mélange solide-liquide en milieux visqueux avec une géométrie plus complexe comme le double ruban hélicoïdal.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION

L'objet de ce chapitre est de décrire la méthodologie employée pour répondre aux différents objectifs décris ci-dessus. Pour cela, nous introduirons les outils numériques qui seront employés tout au long de cette étude et nous décrirons comment l'utilisation de ces outils s'inscrit dans notre démarche de développement d'un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel.

3.1 Description des logiciels utilisés

Pour commencer, il est important de noter que l'ensemble de ce projet de maitrise repose sur l'utilisation de 3 bibliothèques « Open Source » que sont : *Open∇FOAM* pour la mécanique des fluides, *LIGGGHTS* pour la dynamique granulaire et enfin *CFDEM* qui est un logiciel permettant de coupler les deux précédents pour faire des études multiphasiques. Il semble donc important de décrire ces 3 plateformes, avant de commencer à décrire de façon plus précise le travail à effectuer.

3.1.1 CFD : Open∇FOAM

Open∇FOAM, acronyme de Open Field Operation And Manipulation, est un logiciel entièrement libre distribué depuis 2004 par la société britannique OpenCFD et utilisant le système d'exploitation linux. Programmé en C ++, ce logiciel permet la modélisation de systèmes multi-physiques tout en étant principalement dévoué à la résolution de problèmes complexes de mécanique des fluides. Ainsi, cette plateforme permet la résolution de « problèmes fluides » couplés à, de la turbulence, du transfert de chaleur, de l'acoustique ou encore de l'électromagnétisme. La résolution des équations est basée sur une approche "volume fini", formulée au centre des cellules de la géométrie discrétisée. De plus, Open∇FOAM est doté de son propre mailleur, lequel génère des maillages structurés mais le logiciel fonctionne également très bien avec des maillages non-structurés. A noter que des fonctions spécifiques d'Open∇FOAM peuvent être directement utilisées pour communiquer avec le logiciel de maillage libre *GMSH*, qui sera utilisé dans cette étude pour générer des maillages complexes. On peut également spécifier le fait que le calcul haute performance est rendu possible, grâce à l'utilisation de la librairie MPI, laquelle permet de paralléliser les calculs en distribuant la mémoire. Enfin, le logiciel est doté de plusieurs solveurs, que ce soit pour des régimes stationnaires en utilisant l'algorithme *SIMPLE* ou pour des régimes transitoires, en s'appuyant sur les algorithmes *PISO* et *PIMPLE*. A noter, que le logiciel est déjà doté d'un solveur (*SRFSimpleFoam*) per-

mettant la résolution de problème en régime stationnaire dans des référentiels en rotation i.e., avec la prise en compte des forces de Coriolis et centrifuge dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

3.1.2 DEM : LIGGGHTS

LIGGGHTS, acronyme de LAMMPS Improved for General Geometry and Granular Heat Transfer Simulations est un logiciel libre codé en C ++, reposant sur la bibliothèque de dynamique moléculaire LAMMPS (Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator). Ce logiciel permet le simulation de problèmes de dynamique granulaire utilisant la méthode des éléments discrets (DEM) et basé sur le schéma de « Verlet vitesse » pour l'intégration des équations du mouvement. Comparé au code de dynamique moléculaire initial, LIGGGHTS permet d'importer des géométries extérieures, de les mettre en mouvement, d'avoir plusieurs choix pour les forces de contact, d'étudier le transfert de chaleur, d'étudier des répartitions non-uniforme de particules et permet même, depuis peu, la simulation de particules non-sphériques. Contrairement à Open∇FOAM, ce code est simple à appréhender et un utilisateur, peu familier avec de tels environnements, pourra facilement créer de nouvelles fonctions permettant de répondre à ses besoins. Enfin, ici encore, le calcul haute performance est rendu possible par l'utilisation de la même librairie MPI, permettant une parallélisation des calculs.

3.1.3 CFD-DEM : CFDEM

La plateforme CFD-DEM, créé en 2013, est dédiée à l'étude de problèmes biphasiques de type solide-fluide. Pour cela, elle se base sur la librairie *cfdemCloud* qui gère la communication entre les deux logiciels évoqués précédemment. Le processus de communication est décrit à la Figure 3.1. On remarque que, pour une itération CFD-DEM, il y a N itérations DEM et une CFD. Ceci est expliqué par le fait que la DEM nécessite des pas de temps relativement faibles, comparativement à la CFD, pour assurer une bonne stabilité de la dynamique granulaire.

3.2 Organisation du mémoire

Pour répondre à l'objectif fixé, cette étude se décompose en deux grandes parties. La première est largement dédiée à l'étude de la faisabilité de réaliser une étude de dynamique granulaire en référentiel tournant. Et cela, avec tout ce que la prise en compte des forces inertiels de Coriolis et centrifuges impliquent ; notamment sur l'intégration des équations du mouvements. Puis, dans un second temps, nous nous intéressons au couplage de ce nouveau modèle DEM

avec la mécanique des fluides numérique. Et nous décrivons les différentes étapes qui ont permis de développer le modèle final. Enfin, fort de ce nouvel outil, nous étudions un système de mélange avec un agitateurs à géométrie complexe.

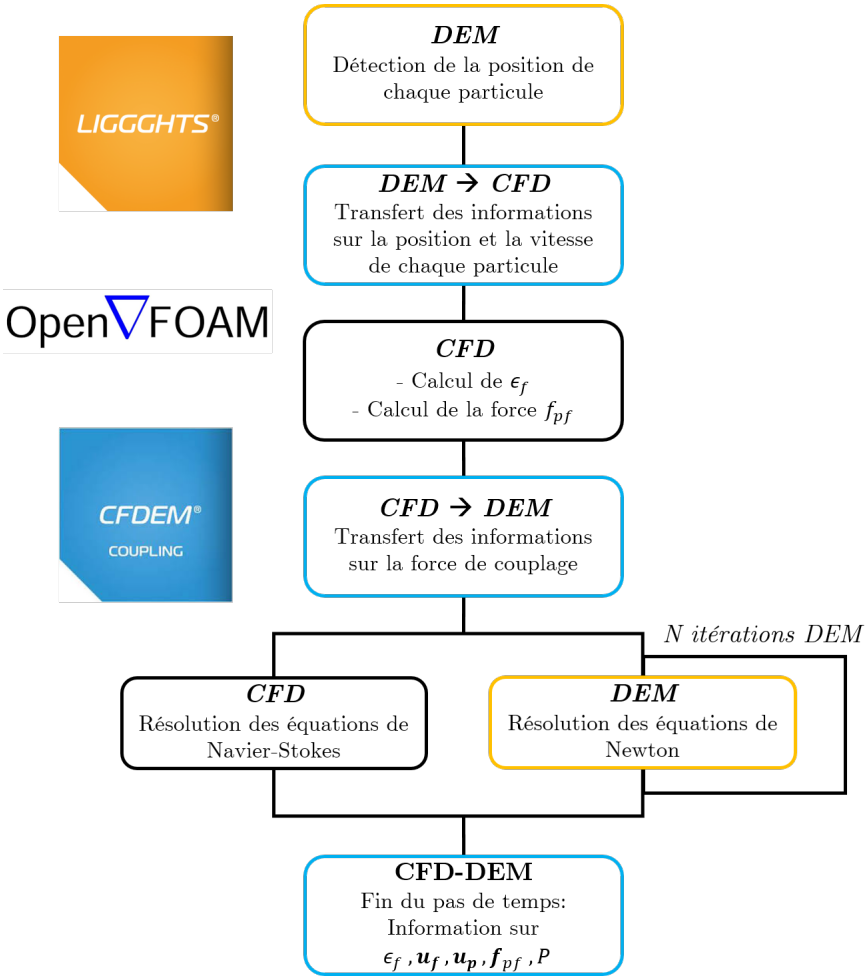

Figure 3.1 Décompositon des différentes étapes d'un pas de temps CFD-DEM avec la plateforme *CFDEM*

En définitive, le présent mémoire suit une organisation relativement incrémentale et logique, de par le fait, que nous partons d'un modèle simple de DEM, auquel on rajoute progressivement différents éléments pour obtenir un modèle CFD-DEM en référentiel non-inertiel robuste. A noter, qu'à chacune de ces étapes une grande attention est portée à la vérification et la validation du modèle, comme en témoigne l'organigramme 3.2 qui résume toutes les étapes de ce projet.

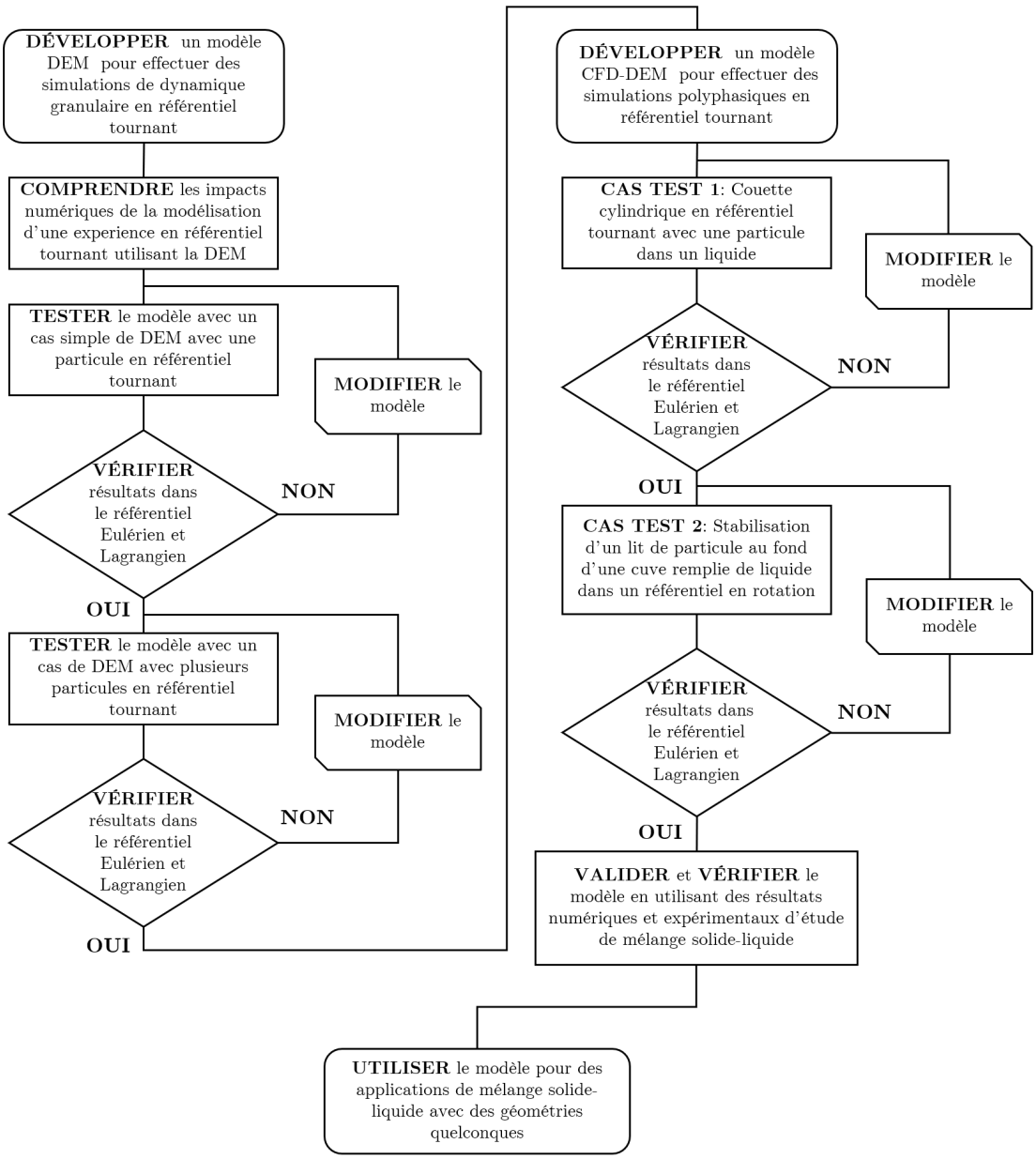

Figure 3.2 Organisation du présent mémoire

CHAPITRE 4 ARTICLE 1 : SIMULATION OF GRANULAR FLOW IN A ROTATING FRAME OF REFERENCE USING THE DISCRETE ELEMENT METHOD

Bastien Delacroix, Anya Bouarab, Louis Fradette, François Bertrand, Bruno Blais

Submitted to Powder Technology Journal, November 6, 2019

4.1 Abstract

Over the years, the Discrete Element Method (DEM) has attracted significant attention for its capacity to simulate granular flows because it captures physical phenomena that cannot be observed using continuum methods. However, the simulation of granular systems with DEM is computationally demanding, especially in the case of systems in rotation. One solution is to perform simulations in a non-inertial rotating frame of reference, which requires the addition of fictitious velocity-dependent forces such as the Coriolis force. We assessed the numerical feasibility and accuracy of such DEM simulations. We showed that the global order and energy conservation properties of classical symplectic integration schemes are lost when dealing with velocity-dependent forces. Nevertheless, our study of a dense particle flow within a rotating hourglass showed that the relevant properties of such flow are accurately reproduced in a non-inertial frame and that computational performance is improved.

4.2 Introduction

Granular flows occur in many pharmaceutical, biomechanical and food processes, and the solids motion is critical to the final quality of the products. The study of granular dynamics requires knowledge of a large number of particle properties, including density, size, size distribution, shape and rigidity. Moreover, experimental investigations can be difficult to set up and analyze [167]. Numerical modeling, which is complementary to experimental investigations, can facilitate the study of these systems.

While continuum methods have traditionally been preferred for study of granular flows, more recently there has been increased interest in Lagrangian approaches such as the Discrete Element Method (DEM). While DEM has proven accurate in a wide variety of applications, it is limited by its computational cost, which depends on the number of particles and the complexity of the geometry. In pure granular flow studies, reasonable computational times can be achieved with up to 10^8 particles [119]. However, this is not the case for multiphase

solid-fluid studies, for which the efficiency is even more limited, especially when the geometry is in motion (e.g., rotating) as is commonly encountered in industrial mixing, segregation and drying applications [3].

To avoid the problem of a rotating geometry, the simulation can be carried out in the rotating frame linked to the geometry that is in rotation. The physics behind studies of non-inertial frames has been known for a long time and is commonly used in computational fluid dynamics with numerical methods such as the single reference frame (SRF) and multiple reference frame (MRF) [109, 168]. However, this approach has not been extended to granular flows, and only two DEM studies have been performed in rotational frames. To the authors' knowledge, only Shirsath *et al* have dealt with this issue for the improvement of the computational performance of a rotating chute simulation, in particular when the granular flow is coupled with a fluid [165, 166]. Performing DEM in such a frame is challenging. Because of the non-inertial properties of these frames, inertial forces, i.e., centrifugal and Coriolis forces, have to be taken into account. The Coriolis force is peculiar because it depends on the velocity of the particles. In the present paper, we show that inertial forces pose a number of challenges for the numerical integration of the corresponding equation of motion.

For DEM simulations, symplectic integrators are often used, due to their energy conserving nature. The velocity Verlet integration scheme is one of the most commonly used schemes in the context of DEM and is currently implemented in many DEM open source codes such as YADE [140], MERCURY [141] and LAMMPS, as well as LIGGGHTS [142], which was used in the present study.

It is important to note that velocity-dependent forces are not only relevant for non-inertial frames of reference. Increasing attention is now paid to the coupling between granular flows and magnetic fields [169–171], and the Lorentz force is a velocity-dependent force like the Coriolis force [172]. This underlines the fact that while velocity dependent forces are of great interest, few studies have focused specifically on their impact on numerical integration schemes [173, 174] and none have been done with specific applications to DEM.

The main goal of this work is to apply the Discrete Element Method in the context of a rotating geometry. In this paper we test the feasability of performing DEM simulations in a non-inertial frame and shed light on the impact of a velocity-dependent force such as the Coriolis force, on the accuracy and symplectic properties of a classical DEM integration scheme.

This paper is divided into three parts. The first (sections 2 and 3) provides a brief introduction to DEM and the physics of rotating frames. The second (sections 4, 5, 6 and 7) presents a theorical framework for the impacts of velocity-dependent forces on a symplectic integration

scheme using simple problems. The third (sections 8 and 9) discusses the feasibility of using DEM in a non-inertial frame based on several schemes. It also discusses the impact of using rotating frames on computational performance.

4.3 Discrete Element Method

DEM is a Lagrangian approach for modeling granular flows where each particle is considered as a discrete entity. The method integrates Newton's second law of motion to calculate the velocity and position of each particle at every time step of the simulation.

The method specifically deals with collisions, which are detected by comparing the distance of two particles to the sum of their radii. If two particles overlap, a simple spring and dashpot model is used to compute a contact force that is decomposed into elastic and dissipative components. Each of these components is divided into a tangential and a normal term (Figure 4.1).

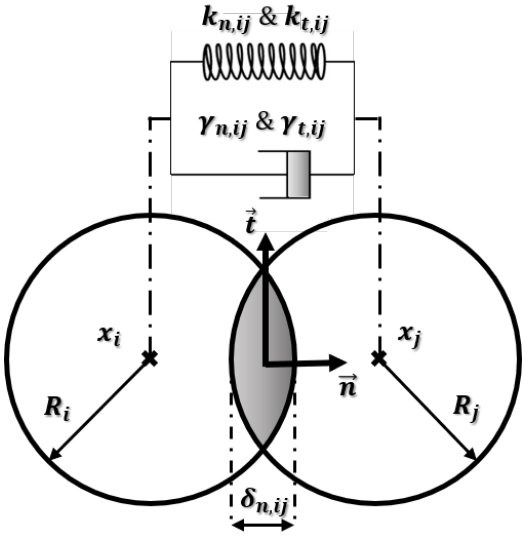

Figure 4.1 Illustration of the principle of the Discrete Element Method

Based on Newton's second law of motion, the governing equations for the translational ($\boldsymbol{v}_i$) and rotational ($\boldsymbol{\omega}_{p,i}$) motions of particle i can be written as [119, 142, 175]:

$$m_i \frac{\boldsymbol{u}_i}{dt} = \sum_j \boldsymbol{f}_{c,ij} + \sum_k \boldsymbol{f}_{lr,ik} + \boldsymbol{f}_{g,i} \tag{4.1}$$

$$I_i \frac{\boldsymbol{\omega}_{p,i}}{dt} = \sum_j (\boldsymbol{M}_{t,ij} + \boldsymbol{M}_{r,ij}) \tag{4.2}$$

where m_i is the mass of particle i, I_i the moment of inertia of particle i, $\boldsymbol{f}_{c,ij}$ the contact forces between particles i and j, $\boldsymbol{f}_{lr,ik}$ the non-contact (long-range) forces between particles i and k, $\boldsymbol{f}_{g,i}$ the gravitational force ($\boldsymbol{f}_{g,i} = m_i\boldsymbol{g}$), and $\boldsymbol{M}_{t,ij}$ and $\boldsymbol{M}_{r,ij}$ the tangential and rolling friction torques acting on particle i due to its contact with particle j. In the present work, non-contact forces, such as electrostatic or Van Der Waals forces were not taken into account due to the size and nature of the particles.

The contact forces between two particles were split into normal ($\boldsymbol{f}_{cn,ij}$) and tangential ($\boldsymbol{f}_{ct,ij}$) [118] components:

$$\boldsymbol{f}_{c,ij} = \boldsymbol{f}_{cn,ij} + \boldsymbol{f}_{ct,ij} = -k_{n,ij}\boldsymbol{\delta}_{n,ij} - \gamma_{n,ij}\dot{\boldsymbol{\delta}}_{n,ij} - k_{t,ij}\boldsymbol{\delta}_{t,ij} - \gamma_{t,ij}\dot{\boldsymbol{\delta}}_{t,ij} \tag{4.3}$$

where $k_{n,ij}$ and $k_{t,ij}$ are the normal and tangential stiffness coefficients, $\gamma_{n,ij}$ and $\gamma_{t,ij}$ the normal and tangential damping coefficients, $\boldsymbol{\delta}_{n,ij}$ and $\boldsymbol{\delta}_{t,ij}$ the normal and tangential overlaps, and $\dot{\boldsymbol{\delta}}_{n,ij}$ and $\dot{\boldsymbol{\delta}}_{t,ij}$ their derivatives with respect to time.

In the present work, we used a model proposed by Tsuji *et al* [127] based on the Hertz theory [128] for the normal forces. We used the Mindlin model [176] for the tangential force. These models were combined to link the stiffness and damping coefficients to Young's modulus of the material (Y), the Poisson ratio (ν), and the coefficient of restitution (e_r), using the equations given in Table 4.1. The tangential overlap $\boldsymbol{\delta}_{t,ij}$ was truncated using Coulomb's law to ensure that $\boldsymbol{f}_{ct,ij} \leq -\mu_{s,ij} \mid (\boldsymbol{f}_{cn,ij}) \mid \frac{\boldsymbol{\delta}_{t,ij}}{|(\boldsymbol{\delta}_{t,ij})|}$.

4.4 Non-inertial Frame of Reference

In a rotational frame of reference, Newton's equations of motion cannot be applied in their classical form since Coriolis ($\boldsymbol{F}_{coriolis}$) and centrifugal ($\boldsymbol{F}_{centrifugal}$) forces must be taken into account. The expression for these forces are:

$$\boldsymbol{F}_{coriolis} = -2m\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{v} \tag{4.4}$$

$$\boldsymbol{F}_{centrifugal} = -m\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{q}) \tag{4.5}$$

where $\boldsymbol{\Omega}$ is the rotation vector of the frame of reference, and $\boldsymbol{q}$ and $\boldsymbol{v}$ are the position (from the projection point on the axis of rotation: $\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\Omega} = 0$) and velocity vectors, respectively.
For larger particles, Coriolis torque must also be taken into account to ensure conservation of the angular momentum:

$$T_{coriolis} = -I(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\omega}) \tag{4.6}$$

Parameter	Equation
Normal stiffness	$k_{n,ij} = \frac{4}{3} Y^*_{ij} \sqrt{R^*_{ij} \delta_{n,ij}}$
Tangential stiffness	$k_{t,ij} = 8 G^*_{ij} \sqrt{R^*_{ij} \delta_{n,ij}}$
Normal damping	$\gamma_{n,ij} = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \frac{\ln(e_r)}{\sqrt{\ln^2(e_r)+\pi^2}} \sqrt{\frac{2}{3} k_n m^*_{ij}}$
Tangential damping	$\gamma_{t,ij} = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \frac{\ln(e_r)}{\sqrt{\ln^2(e_r)+\pi^2}} \sqrt{k_t m^*_{ij}}$
Coulomb friction force	$\boldsymbol{f}_{ct,ij} \leq -\mu_{s,ij} \mid (\boldsymbol{f}_{cn,ij}) \mid \frac{\boldsymbol{\delta}_{t,ij}}{\mid (\boldsymbol{\delta}_{t,ij}) \mid}$
Torque by tangential force	$\boldsymbol{M}_{t,ij} = \boldsymbol{r}_i \times (\boldsymbol{f}_{ct,ij})$
Rolling friction torque	$\boldsymbol{M}_{r,ij} = -\mu_{r,ij} \mid (\boldsymbol{f}_{cn,ij}) \mid \frac{\boldsymbol{\omega}_{p,ij}}{\mid (\boldsymbol{\omega}_{p,ij}) \mid} R^*_{ij}$
Equivalent mass	$\frac{1}{m^*_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$
Equivalent radius	$\frac{1}{R^*_{ij}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}$
Equivalent Young's modulus	$\frac{1}{Y^*_{ij}} = \frac{(1-\nu_i^2)}{Y_i} + \frac{(1-\nu_j^2)}{Y_j}$
Equivalent shear modulus	$\frac{1}{G^*_{ij}} = \frac{2(2+\nu_i)(1-\nu_i)}{Y_i} + \frac{2(2+\nu_j)(1-\nu_j)}{Y_j}$
Sliding friction coefficient	$\mu_{s,ij}$
Rolling friction coefficient	$\mu_{r,ij}$
Distance to contact point for particle i	$\boldsymbol{r}_i$
Radius of particle i	R_i

Table 4.1 Equations for the DEM model adapted from [3]

where $I = \frac{2}{5}mr^2$ is the inertial momentum of a solid sphere, r the radius, and ω the angular velocity. Due to the size of the particles in the present study ($d_p < 1cm$), we did not take the impact of this torque into account.

To evaluate the impact of the Coriolis and centrifugal forces compared to other inertial forces, we used the Rossby number, which is a dimensionless number typically used in geophysical studies. In granular dynamics, the Rossby number is defined as [177]:

$$R_0 = \frac{u_p}{2\Omega L sin(\phi)} \tag{4.7}$$

where u_p is the characteristic particle flow velocity in the rotational frame of reference, L a characteristic length of the system, Ω the frame velocity, and ϕ a caracteristic angle of the position of the particle. In geophysics, for instance, this would be the latitude. When $R_o > 1$, the rotation has no significant impact on the system whereas $R_o << 1$ implies that the Coriolis force is considerable.

Lastly, simulations in a non-inertial frame of reference require a correct imposition of the initial velocity. As such, the velocity of the frame must be substracted from the initial Eulerian velocity to give the right initial condition in this non-inertial frame:

$$\boldsymbol{v}_{t=0,Lagrangian} = \boldsymbol{v}_{t=0,Eulerian} - \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{q} \tag{4.8}$$

4.5 Symplectic Integration Scheme

In granular dynamics simulations, a class of integration schemes, the so-called symplectic schemes, are used to ensure the global conservation of energy in the absence of a dissipation mechanism (e.g. inelastic collisions). Numerous integration schemes are symplectic, including the Euler symplectic, Runge-Kutta symplectic and Verlet schemes [178]. The core idea behind these schemes is to update the position before computing the velocity within the same time step. One of the most common schemes used in granular dynamics, and particularly in the case of DEM, is the velocity Verlet scheme.

The velocity Verlet scheme [139] is based on updating the velocity at the half time step before updating the position. Then, using this new position, the velocity is evaluated at the end of the time step. Its formulation, for the resolution of $\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x})$, is given by :

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_{n+1/2} = \boldsymbol{v}_n + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_n) \\ \boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{x}_n + h\boldsymbol{v}_{n+1/2} \\ \boldsymbol{v}_{n+1} = \boldsymbol{v}_{n+1/2} + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_{n+1}) \end{cases} \tag{4.9}$$

with $\boldsymbol{a}$ the acceleration vector.
This is a second order scheme for position and velocity [173].

A symplectic integrator can also be characterized by the fact that the area (or volume) of a region of the phase space $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$, where $\boldsymbol{q}$ and $\boldsymbol{p}$ are the position and the momentum vectors, is conserved after a finite integration time. In other words, a symplectic integration scheme respects the property of the Liouville-Poincaré invariant (Figure 4.2). More details on this can be found in the chapter 9 of [179].

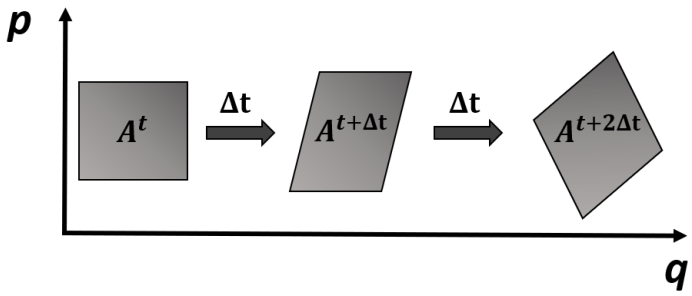

Figure 4.2 Illustration of the Liouville-Poincaré invariant: $A^t = A^{t+\Delta t} = A^{t+2\Delta t}$

We now recall the required condition for an integration scheme to respect this property. The evolution of an element of volume in the phase space after an infinetisimal time step δt is given by:

$$\boldsymbol{q}(t+\delta t) = \boldsymbol{q}(t) + \delta t \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \mathcal{O}(\delta t^2) \tag{4.10}$$

$$\boldsymbol{p}(t+\delta t) = \boldsymbol{p}(t) + \delta t \frac{\partial \boldsymbol{p}}{\partial t} + \mathcal{O}(\delta t^2) \tag{4.11}$$

According to Hamilton's equations [179]:

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{q}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}} \end{cases} \tag{4.12}$$

it then follows that:

$$\boldsymbol{q}(t+\delta t) = \boldsymbol{q}(t) + \delta t \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} + \mathcal{O}(\delta t^2) \tag{4.13}$$

$$\boldsymbol{p}(t+\delta t) = \boldsymbol{p}(t) - \delta t \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}} + \mathcal{O}(\delta t^2) \tag{4.14}$$

The relation between the initial volume and the volume after an infinitesimal time step δt is given by the determinant of the Jacobian $\left(\frac{\partial(q_1,p_1)}{\partial(q_0,p_0)}\right)$:

$$\left\| \frac{\partial(q_1,p_1)}{\partial(q_0,p_0)} \right\| = \left\| Det \begin{pmatrix} 1+\delta t \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{q}\partial \boldsymbol{p}} & -\delta t \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{q}^2} \\ \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{p}^2} & 1-\delta t \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{q}\partial \boldsymbol{p}} \end{pmatrix} \right\| = 1 + \mathcal{O}(\delta t)^2 \tag{4.15}$$

Lastly, with $\delta t \to 0$ we can conclude that the Liouville-Poincaré theorem is respected if the determinant of the Jacobian matrix associated with the change of coordinates after a finite time in the phase space is equal to 1.

Now, if we apply the velocity Verlet integration scheme for two close values of the position and the velocity (x_0, v_0) and $(x_0 + \delta x_0, v_0 + \delta v_0)$, we obtain respectively for the first step of (4.9):

$$\boldsymbol{v}_{1/2} = \boldsymbol{v}_0 + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_0) \tag{4.16}$$

$$\boldsymbol{v}_{1/2} + \delta \boldsymbol{v}_{1/2} = \boldsymbol{v}_0 + \delta \boldsymbol{v}_0 + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_0 + \delta \boldsymbol{x}_0) \tag{4.17}$$

with a limited development around $\delta \boldsymbol{x}_0$ and $\delta \boldsymbol{v}_0$:

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_0 + \delta \boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_0) + \delta \mathbf{x}_0 \boldsymbol{a}'(\boldsymbol{x}_0) + \mathcal{O}(\delta \boldsymbol{x}_0)^2 \tag{4.18}$$

then, if we replace (4.18) in (4.16) and substract (4.16) from (4.17), we obtain:

$$\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_0 \\ \delta \boldsymbol{v}_{1/2} \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_0 \\ \delta \boldsymbol{v}_0 \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{h}{2}\boldsymbol{a}'(\boldsymbol{x}_0) & 1 \end{pmatrix} \tag{4.19}$$

If we use the same method for the second and third steps:

$$\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{v}_{1/2} \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_0 \\ \delta \boldsymbol{v}_{1/2} \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & h \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.20}$$

$$\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{v}_1 \end{pmatrix} = A_3 \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{v}_{1/2} \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{h}{2}\boldsymbol{a}'(\boldsymbol{x}_1) & 1 \end{pmatrix} \tag{4.21}$$

Lastly, the velocity Verlet integration scheme can be written as the matrix product of these three operations:

$$\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{v}_1 \end{pmatrix} = A_3 A_2 A_1 \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_0 \\ \delta \boldsymbol{v}_0 \end{pmatrix} \quad \text{with} \tag{4.22}$$

$$Det(A_3 A_2 A_1) = Det(A_3) Det(A_2) Det(A_1) = 1 \tag{4.23}$$

This shows that, the velocity Verlet integration scheme is a symplectic integrator.

4.6 Application to the Harmonic Oscillator

To illustrate the properties of a symplectic integrator, it is useful to begin with the simple example of the harmonic oscillator in one dimension (a spring of stiffness k) whose equation of motion is given by:

$$\frac{dv(x)}{dt} + w^2 x = 0 \qquad \text{with} \qquad w = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{4.24}$$

$$\text{i.e.} \qquad a(x) + w^2 x = 0 \tag{4.25}$$

where v and x reprensent the velocity and the position of the mass m at the end of the spring. From equation (4.22) of Section 4, we can write for one time step of the velocity Verlet integration scheme:

$$\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{v}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{h}{2}\omega^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & h \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{h}{2}\omega^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_0 \\ \delta \boldsymbol{v}_0 \end{pmatrix} \tag{4.26}$$

$$J = A_3 A_2 A_1 \quad \text{and} \quad Det(J) = 1 \tag{4.27}$$

This shows that, for the case of a harmonic oscillator, the velocity Verlet scheme is indeed symplectic. We can now look at the energy of the system. It can be shown that the eigenvalues of the matrix J, λ_1 and λ_2 are given by:

$$\lambda_{1,2} = 1 - \frac{h^2 w^2}{2} \pm iwh\sqrt{1 - \frac{h^2 w^2}{4}} = r\exp(\pm i\theta) \tag{4.28}$$

$$\text{where} \qquad r = 1 \quad \text{and} \quad \theta = tan^{-1}\left(\frac{hw\sqrt{1 - \frac{h^2w^2}{4}}}{1 - \frac{h^2w^2}{2}}\right) \tag{4.29}$$

and the associated eigenvectors can be expressed by:

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} \frac{i}{w}\left(\sqrt{1 - \frac{h^2w^2}{4}}\right)^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{i}{w}\left(\sqrt{1 - \frac{h^2w^2}{4}}\right)^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.30}$$

From a simple recurrence, we can then write the relation between the n^{th} time step and the initial condition:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_n \\ \boldsymbol{v}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ \boldsymbol{v}_0 \end{pmatrix} \tag{4.31}$$

which is equivalent to:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_n \\ \boldsymbol{v}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos(n\theta) & \frac{-1}{w\sqrt{1-\frac{h^2w^2}{2}}} sin(n\theta) \\ w\sqrt{1 - \frac{h^2w^2}{2}} sin(n\theta) & cos(n\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ \boldsymbol{v}_0 \end{pmatrix} \tag{4.32}$$

With $t = nh$, and in the particular case of $v_0 = 0$:

$$x(t) = x_0 cos(\frac{\theta t}{h}) \qquad v(t) = x_0\omega \frac{sin(\frac{\theta t}{h})}{\sqrt{1 - \frac{h^2w^2}{4}}} \tag{4.33}$$

with this result, we can now calculate the energy of the system. It can be shown from the development of the argument of the eigenvalues at the 3^{rd} order that the energy at the 2^{nd} order is given by:

$$\theta = wh + \frac{w^3h^3}{24} + \mathcal{O}(h^4) \tag{4.34}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \tag{4.35}$$

$$\text{i.e.} \quad E = \frac{1}{2}mx_0^2\omega^2\left(1 + \frac{h^2w^2}{4}sin^2\left(\frac{\theta t}{h}\right)\right) + \mathcal{O}(h^3) \tag{4.36}$$

As expected, in the case of a harmonic oscillator with a symplectic numerical integration scheme, the energy is bounded ($\frac{2E}{mx_0^2w^2} \in [1, 1 + \frac{h^2w^2}{4}]$) as shown by the periodic form of its expression (4.36).

We can make a similar development with another method such as the explicit Euler scheme, for example, and obtain:

$$J = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -\omega^2 h & 1 \end{pmatrix} \tag{4.37}$$

$$\lambda_{1,2} = 1 \pm iwh = r\exp(\pm i\theta) \tag{4.38}$$

$$\text{where} \qquad r = \sqrt{1 + h^2\omega^2} = 1 + \frac{h^2\omega^2}{2} + \mathcal{O}(h^3) \tag{4.39}$$

$$\text{and} \qquad \theta = tan^{-1}(h\omega) = h\omega + \mathcal{O}(h^3) \tag{4.40}$$

$$E = \frac{1}{2}mx_0^2\omega^2 exp(ht) + \mathcal{O}(h^2) \tag{4.41}$$

This shows that for a traditional non-symplectic explicit Euler scheme, the energy grows exponentially. Similarly, it could be shown that the second-order Runge-Kutta (RK2) and fourth-order Runge-Kutta (RK4) schemes are non-symplectic and do not conserve energy. We can then conclude that, with a symplectic scheme, the energy is bounded, which is not the case for a non-symplectic scheme. This is illustrated in Figure 4.3, where different integration schemes, namely the symplectic velocity Verlet and non-symplectic explicit Euler and RK2 and RK4 schemes, were used for the harmonic oscillator system.

It is interesting to report the global order of these different integration schemes. These orders are highlighted by the error between the numerical and analytical solutions, $x(t) = x_0 cos(wt)$ after a finite time (Figure 4.4). The results obtained are those expected theoritically. In

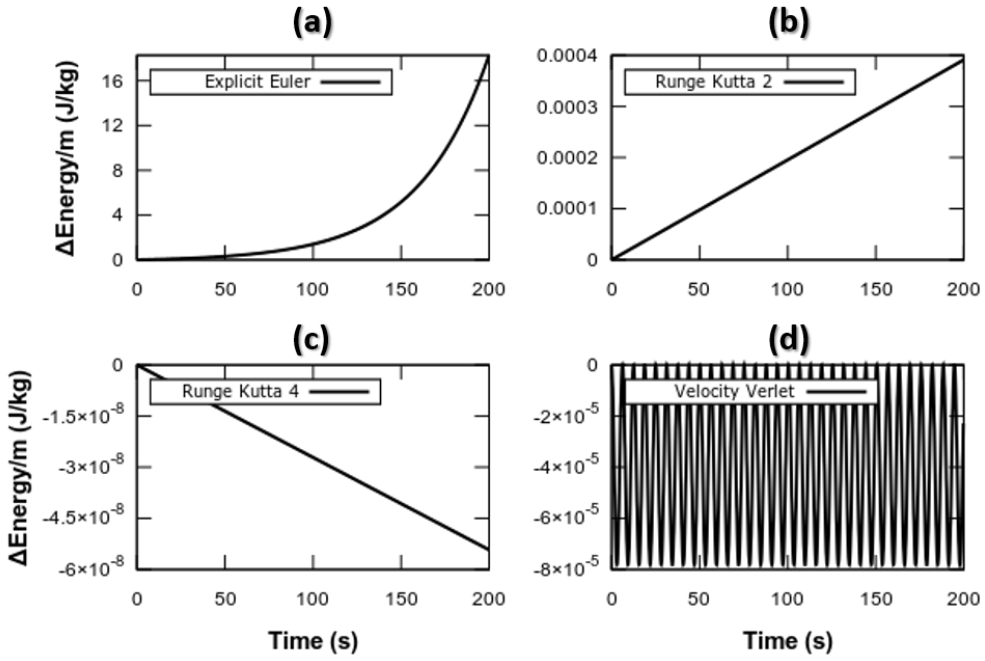

Figure 4.3 Illustration of the symplectic property of an integration scheme. Deviation of the numerical energy from the theorical energy ($\Delta Energy = E_{th} - E_{num}$) for a constant time step $\delta t = 0.1$ with $w = 0.5$ - (a) Euler explicit scheme, (b) Runge-Kutta 2 scheme, (c) Runge-Kutta 4 scheme, (d) velocity Verlet scheme

particular, the velocity Verlet scheme is second-order.

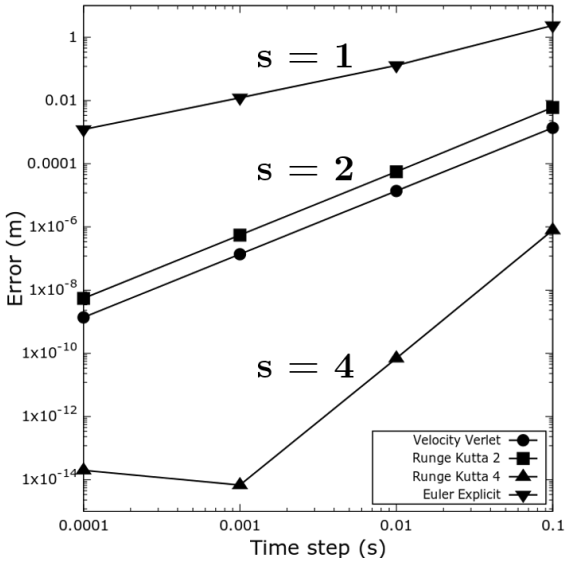

Figure 4.4 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for the harmonic oscillator: order 4 for RK4, order 2 for RK2 and velocity Verlet, and order 1 for Euler explicit, which is highlighted by the slope "**s**". We can see that for the RK4 scheme we have reached machine precision for $\Delta t = 0.001$.

4.7 The Coriolis Force

We have thus far shown that a symplectic integrator is required to bound the energy of a system. However, if we consider the velocity Verlet scheme more carefully (4.9), we assumed that the acceleration, which is related to the forces felt by the particles, is only a function of the position. Therefore, it is unclear what occurs for the case of velocity-dependent forces. This question is essential for performing DEM simulations in a rotating frame because the Coriolis force is a velocity-dependent force.

In the case of a velocity-dependent force, the velocity Verlet scheme is the following:

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_{n+1/2} = \boldsymbol{v}_n + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{v}_{n-1/2}) \\ \boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{x}_n + h\boldsymbol{v}_{n+1/2} \\ \text{Update acceleration} : \boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_{n+1}, \boldsymbol{v}_{n+1/2}) \\ \boldsymbol{v}_{n+1} = \boldsymbol{v}_{n+1/2} + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_{n+1}, \boldsymbol{v}_{n+1/2}) \end{cases} \tag{4.42}$$

Figure 4.5 Classical velocity Verlet scheme with a velocity-dependent force

We can immediately see that we evaluate the acceleration with a velocity and a position calculated at different instants.

To evaluate the consequences of this, we considered a damped oscillator. We recall the equation of motion for a linear spring of stiffness k and a damper 2λ:

$$\frac{dv}{dt} + 2\lambda v + \omega^2 x = 0 \qquad \text{with} \qquad w = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{4.43}$$

First, we determined whether the velocity-dependent force has an impact on the global order of the scheme. In order to do so, we compared the numerical solution for the position with the analytical solution $x(t) = exp(-\lambda t)(x_0 cos(\omega_1 t) + \frac{\lambda x_0}{\omega_1} sin(\omega_1 t))$, with $\omega_1 = \sqrt{\omega^2 - \lambda^2}$, for the same integration schemes as before (Figure 4.6). This example illustrates a first impact

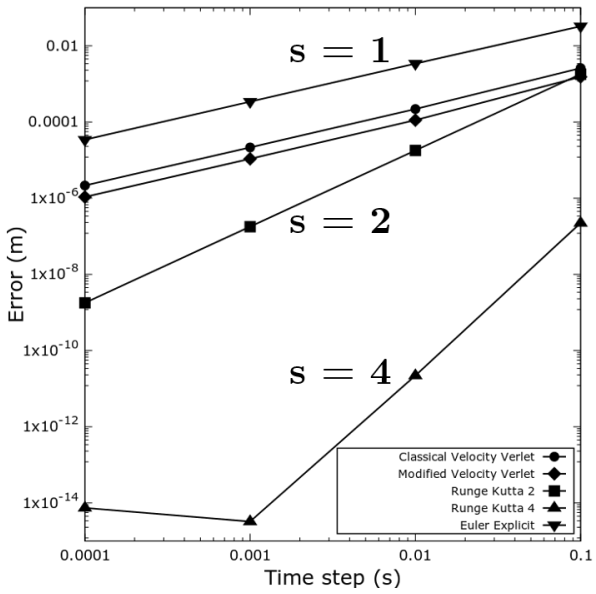

Figure 4.6 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for the damped oscillator: order 4 for RK4, order 2 for RK2, order 1 for Euler explicit and unlike the theory, order 1 for velocity Verlet, which are highlighted by the slope "**s**".

of a velocity-dependent force on the velocity Verlet scheme: it degrades from second to first order. We can see that this was not the case for the other integration schemes because the acceleration was not evaluated with a velocity and a position calculated at different instants. In the classical velocity Verlet scheme, the forces are calculated between the second and the

third steps. However, if we examine (4.42), adding a new calculation of the forces before the beginning of the time step could be a solution to have the acceleration which depend on x_n, v_n instead of $x_n, v_{n-1/2}$. The result is shown on Figure 4.6 with the "*Modified Velocity Verlet*" scheme, and we can see that there was an attenuation of the error, although it remains $\mathcal{O}(h)$. Since the order of the scheme was unaffected by this modification, the classical velocity Verlet scheme was used subsequently in this work.

We recall that the main reason for using the velocity Verlet scheme in DEM simulation is that it is symplectic and thus conserves energy. The natural next step was to determine whether velocity-dependent forces have an impact on this important characteristic. This point will be investigated in the next section.

4.8 DEM Test Case

The simulations described in this section and the following ones were performed with the LIGGGHTS open source DEM software. To construct a test case in a non-inertial rotating frame of reference, we considered a particle in the Eulerian frame without any forces acting on it. The particle was thus fixed in the Eulerian frame. The equation of motion of the same particle in the Lagrangian frame is given by:

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}_{eul}}{dt^2} = 2m\boldsymbol{\Omega} \times \frac{d\boldsymbol{r}_{eul}}{dt} - m\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{eul}) \tag{4.44}$$

$$\text{or} \quad m\frac{d\boldsymbol{v}_{eul}}{dt} = 2m\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{v}_{eul} - m\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{eul}) \tag{4.45}$$

where $\boldsymbol{v}_{eul}$ and $\boldsymbol{r}_{eul}$ are the velocity and the position in the Eulerian frame. The idea behind this test case was to challenge the symplectic characteristic of the scheme. We thus started with a study of the energy in the non-inertial rotating frame of reference.

The velocities in the two different frames were linked straightforwardly using:

$$\boldsymbol{v}_{eul} = \boldsymbol{v}_{lag} + \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag} \tag{4.46}$$

where $\boldsymbol{v}_{lag}$ and $\boldsymbol{r}_{lag}$ are the velocity and the position in the Lagrangian frame.

First, the Lagrangian in the rotational frame is defined as:

$$L_{lag} = \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}_{lag}^2 + m\boldsymbol{v}_{lag}(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag}) + \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag})^2 \tag{4.47}$$

With the Legendre transformation $H_{lag} = \boldsymbol{p}_{lag}\boldsymbol{v}_{lag} - L_{lag}$, where $\boldsymbol{p}_{lag}$ is the generalized impulsion in the rotational frame, we then deduced the Hamiltonian of this particle in the rotational frame of reference:

$$\boldsymbol{p}_{lag} = \frac{\partial L_{lag}}{\partial \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{lag}}} = m\boldsymbol{v}_{lag} + m(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag}) \tag{4.48}$$

$$H_{lag} = \frac{(\boldsymbol{p}_{lag} - m(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag}))^2}{2m} - \frac{m}{2}(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}_{lag})^2 \tag{4.49}$$

The first term of this Hamiltonian represents the kinetic energy of the system and the second term represents the centrifugal potential. We can now deduce the evolution of the energy:

$$\dot{H}_{lag} = \frac{\partial H_{lag}}{\partial t} + \frac{\partial H_{lag}}{\partial r_{lag}}\frac{\partial r_{lag}}{\partial t} + \frac{\partial H_{lag}}{\partial p_{lag}}\frac{\partial p_{lag}}{\partial t} \tag{4.50}$$

or, from Hamilton's equation (4.12):

$$\dot{H}_{lag} = \frac{\partial H_{lag}}{\partial t} + \frac{\partial H_{lag}}{\partial r_{lag}}\frac{\partial H_{lag}}{\partial p_{lag}} - \frac{\partial H_{lag}}{\partial p_{lag}}\frac{\partial H_{lag}}{\partial r_{lag}} = 0 \tag{4.51}$$

As expected, the energy of the particle is conserved in the Lagrangian frame of reference.

In order to test our integration scheme, we studied the trajectory of the particle in the Lagrangian frame of reference with different time steps. Since the particle is static in the Eulerian frame, due to the rotation of the frame, the trajectory expected in the Lagragian frame is a circle with a radius that depends on the initial position.

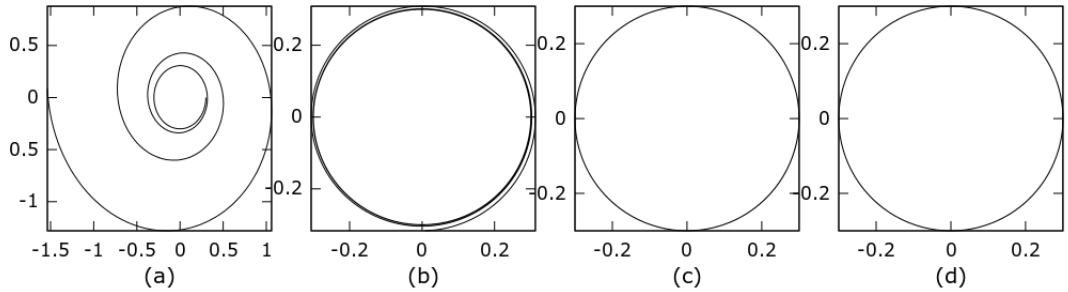

Figure 4.7 Trajectory of a particle in the $x-y$ plane in a rotational frame without any forces except Coriolis and centrifugal forces. (a) $dt = 0.01$, (b) $dt = 0.0001$, (c) $dt = 1\text{e}{-5}$, (d) $dt = 1\text{e}{-6}$

Figure 4.7 shows a time step-dependent deviation of the particle from the theorical circular trajectory. Thus, the energy is not conserved, unlike our previous results. Moreover, Figure

4.8 leads to the same conclusion as before: a velocity-dependent force leads to a degradation of the global order of convergence of the velocity Verlet scheme.

We concluded that in addition to the degradation of the global order of convergence of the scheme (Fig.4.8), a velocity-dependent force leads to a loss of the symplectic nature of the velocity Verlet scheme (Fig.4.7).

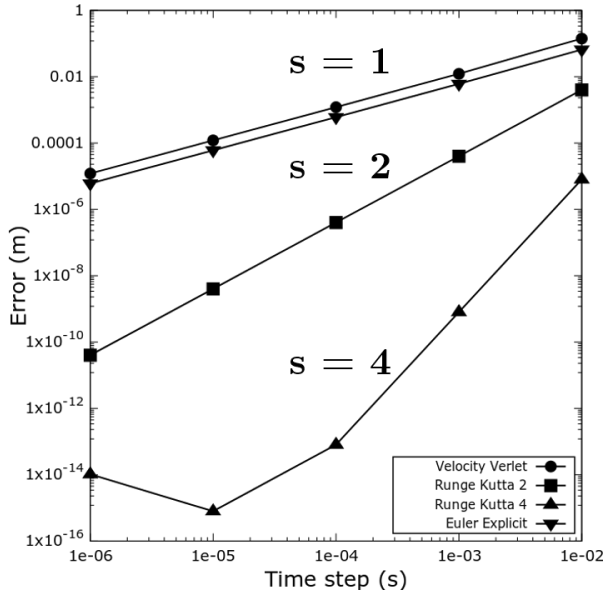

Figure 4.8 Illustration of the global order of convergence of different integration schemes for a particle in a non-inertial rotating frame of reference: order 4 for RK4, order 2 for RK2, order 1 for explicit Euler, and order 1 for velocity Verlet which are indicated by the slope "**s**".

4.9 Verification with Damping Forces

The various impacts described in the previous section raise the question as to whether it was still justified to use the velocity Verlet scheme in the case of velocity-dependent forces. Indeed, the impacts of the loss of energy conservation on the stability of DEM simulations were marked for pure elastic cases in a rotating frame of reference. However, as in real cases, dissipative forces tend to stabilize DEM simulations, we evaluated the possibility of performing DEM simulations in a rotational frame of reference for practical purposes using the velocity Verlet scheme implemented in LIGGGHTS.

4.9.1 Verification with one particle

For the first test case, we put one particle on a disk and compared the trajectory of the particle in the two different frames of reference: the Eulerian frame where the disk was in rotation and the Lagrangian frame where the disk was fixed. In the Lagrangian frame, we added Coriolis and centrifugal forces (4.4) and (4.5) to the DEM equations.

We began with an analytical study of the trajectory of the particle in the Lagrangian frame.

Based on the expression of the Hamiltonian for a particle in the rotational frame (4.50) and the Hamilton's equation (4.12), the equations of the movement of a particle in this frame are:

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{lag}}} = \frac{\boldsymbol{p_{lag}}}{m} - \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r_{lag}} \\ \dot{\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{lag}}} = -\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{p_{lag}} \end{cases} \tag{4.52}$$

Using a matrix notation for the position equation and using $\boldsymbol{\Omega} = (0 \quad 0 \quad \Omega_z)$, we obtain:

$$\dot{\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{lag}}} = -A\boldsymbol{r_{lag}} + \frac{\boldsymbol{p_{lag}}}{m} \qquad with \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z & 0 \\ \Omega_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.53}$$

where A is a matrix that represents a rotation in a plane perpendicular to the z axis i.e., in the $x - y$ plane.

Due to the form of (4.53), the use of homogeneous coordinates rather than Cartesian coordinates was justified. We thus add a fictitious third coordinate to our system in two dimensions. It then follows that:

$$\begin{pmatrix} \dot{r_{lag}}_x \\ \dot{r_{lag}}_y \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 1 & 0 & p_{lag,x} \\ 0 & 1 & p_{lag,y} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_z & 0 \\ -\Omega_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_x \\ r_y \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.54}$$

or, more simply:

$$\begin{pmatrix} \dot{r}_{lag,x} \\ \dot{r}_{lag,y} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_z & p_{lag,x} \\ -\Omega_z & 0 & p_{lag,y} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{lag,x} \\ r_{lag,y} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.55}$$

With this equation of motion, we deduce that the trajectory in the rotational frame of this

particle on a disk is a combination of a translation and a rotation in the opposite direction of the frame. We thus expected to obtain a spiral in this frame.

As expected, we obtain the right trajectory with the numerical simulation using the LIGGGHTS software (Figure 4.9). We then compared the different trajectories in the two different frames on these two figures and we observed exact agreement between the two simulations. Based on this conclusive result, we then performed a more complex experiment with more particles.

4.9.2 Verification with N particles

We simulated the motion of many particles in a rotating hourglass in the two different frames of reference: in the Eulerian frame, in which case the hourglass rotated and in the Lagrangian frame, in which case the hourglass was fixed and Coriolis and centrifugal forces were added for each particle. All the physical parameters used for these simulations are presented in Table 4.2.

The main difference between this case and the previous one, with only one particle, is that the rotation is perpendicular to gravity. We thus considered the rotation of this force accordingly in the Lagrangian frame of reference. Figure 4.10 shows an illustration of the motion of the particle in both frames of reference at different instants. As can be seen, there is exact agreement as regards the motion of these particles in the two frames.

Property	**Symbol**	**Value**
Young's modulus	Y	50 MPa
Coefficient of restitution	e_r	0.3
Poisson's ratio	ν	0.3
Coefficient of friction	μ_s	0.52
Rolling friction	μ_r	0.3
DEM time step	Δt_{DEM}	$1 \times 10^{-6} s$
Range of diameters	d_p	0.3-0.6mm
Density	ρ_p	2653 kg/m^3
Number of particle	N	160 000

Table 4.2 Parameters for the hourglass simulation based on a previous study that investigated the behaviour of fine particles [4]

Next, we compared the evolution in time of the mass of particles at the bottom of the

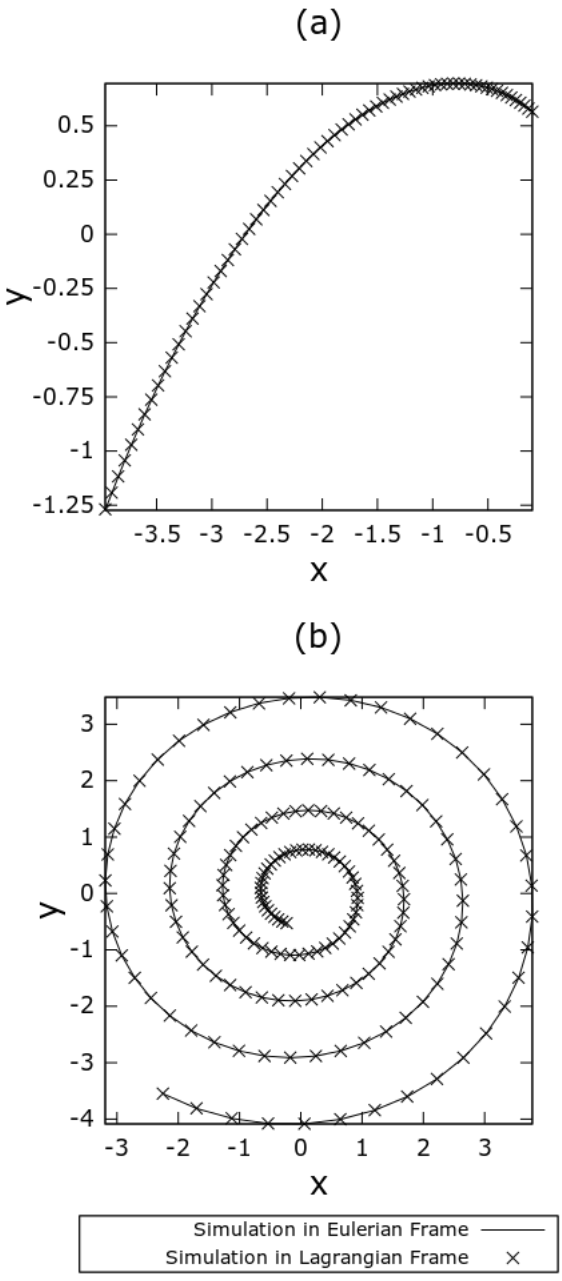

Figure 4.9 Trajectory of the particle in the two different frames of reference for a frame velocity of $20 rad/s$: (a) in the Eulerian frame and (b) in the Lagrangian frame

hourglass for two different frame velocities. These two velocities were chosen based on the difference in the Rossby number (see (4.7)), which implied that the Coriolis and centrifugal forces have different impacts. Indeed, at 30 rpm, the particles were in motion during the rotation of the hourglass ($R_o = 0.5$) unlike at 120 rpm ($R_o = 0$), where particles remained stuck to the wall of the hourglass due to the greater impact of the non-inertial forces. For the larger frame velocity, there was no-slip between the wall and the particles during the rotation of the hourglass. This is shown in Figures 4.10 and 4.11, which illustrate the motion of the particles and where we can see that we still have a similar behaviour of the particles at 120 rpm. Moreover, Figures 4.12 and 4.13 show that the evolution of the mass at the bottom of the hourglass is exactly the same for simulations performed in Eulerian and Lagrangian frame of reference.

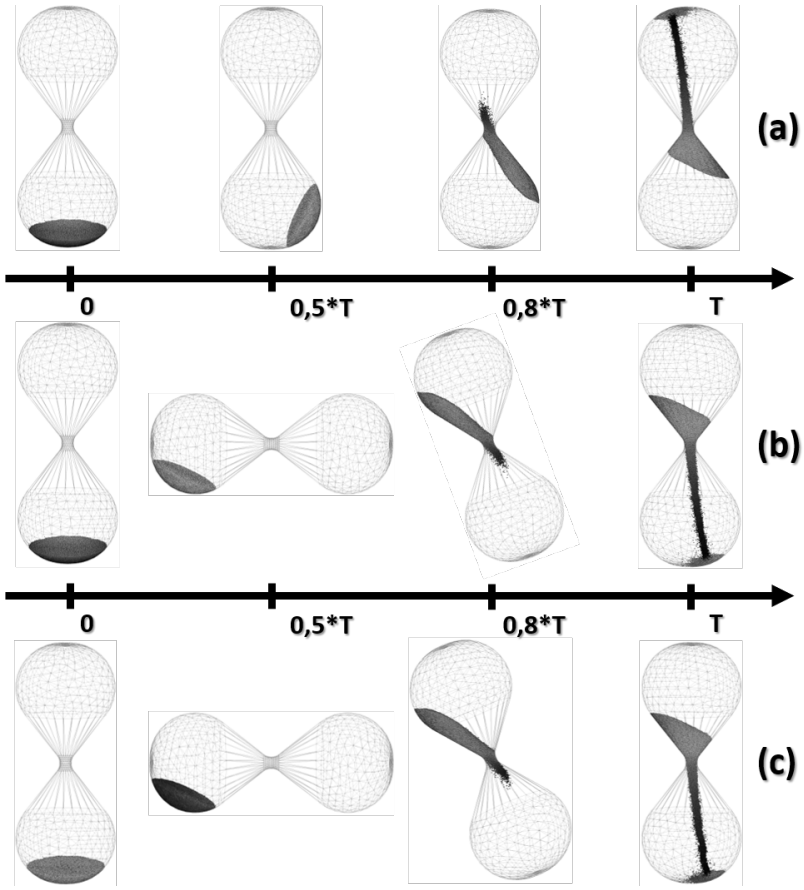

Figure 4.10 Motion of the particles during the revolution, of period $2T$, of an hourglass (30 RPM) - (a) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Lagrangian frame (b) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Eulerian frame (c) Simulated in the Eulerian frame and illustrated in the Eulerian frame

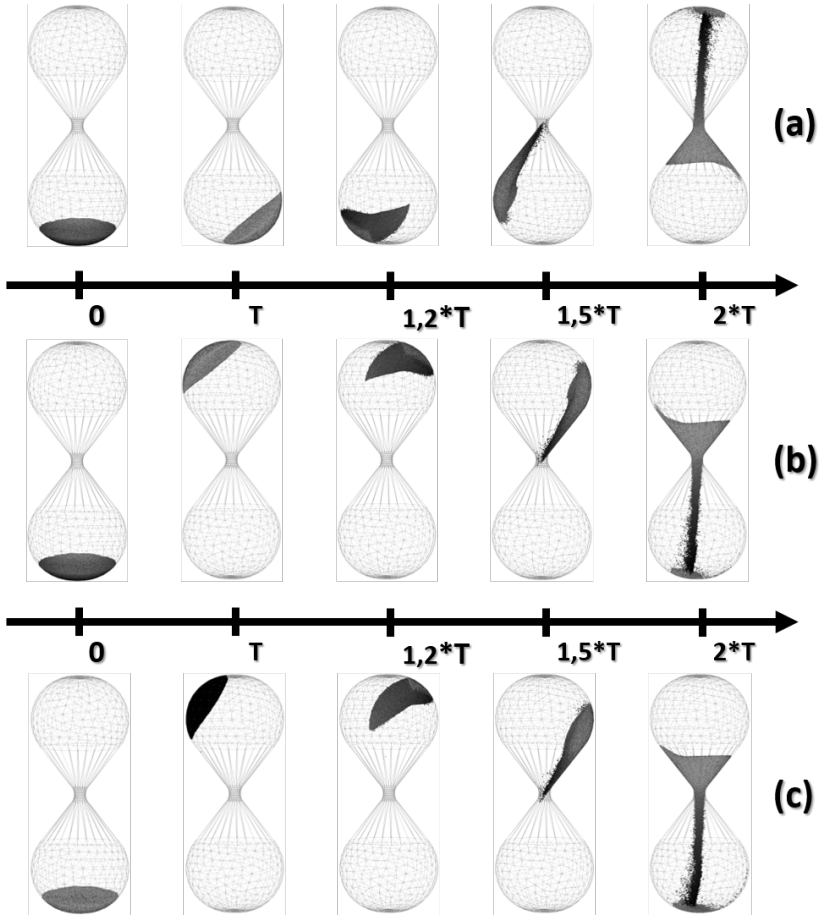

Figure 4.11 Motion of the particles during the revolution, of period $2T$, of an hourglass (120 RPM) - (a) Simulated in the Lagrangian frame and illustrated in the Lagrangian frame (b) Simulated inthe Lagrangian frame and illustrated in the Eulerian frame (c) Simulated in the Eulerian frame and illustrated in the Eulerian frame

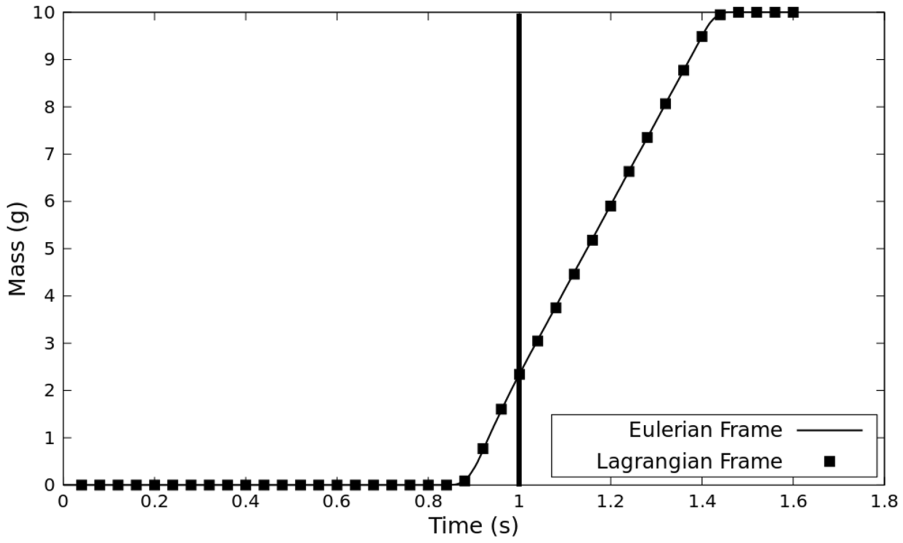

Figure 4.12 Comparison of the mass of particles at the bottom of the hourglass in the two different frames of reference at a frame velocity of 30 rpm ($R_o = 0.5$). The vertical bar shows the end of the rotation phase (t=T).

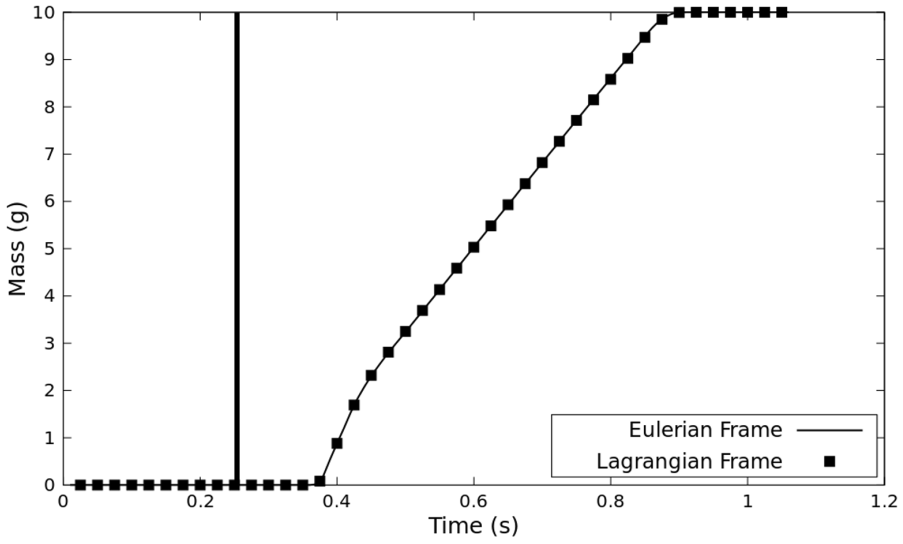

Figure 4.13 Comparison of the mass of particles at the bottom of the hourglass in the two different frames of reference at a frame velocity of 120 rpm ($R_o = 0$). The vertical bar shows the end of the rotation phase (t=T).

4.10 Computational Performance Study

Finally, for the sake of completion, we investigated the impact on computational performance of conducting simulations in a rotating frame or reference. We performed the hourglass simulation in the two different frames, with different numbers of CPU. The cores were distributed symmetrically in the x-y plane, and the z axis was not partitioned, as illustrated in Figure 4.14.

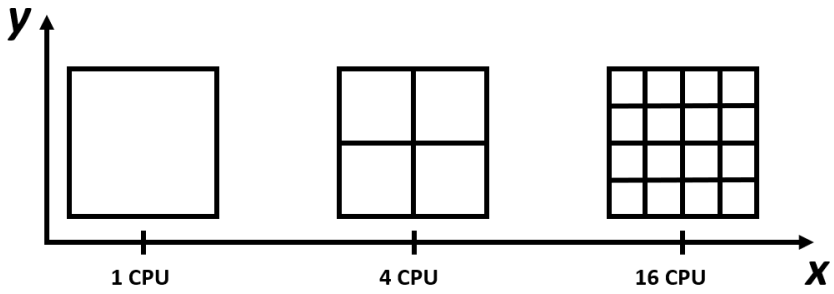

Figure 4.14 Distribution of the CPU in the x-y direction. Only one CPU was used in the z direction.

With this study, we concluded that increasing the number of CPU results in a 25% improvement in computational performance when conducting the simulations in the rotating frame compared to traditional DEM simulations.

4.11 Conclusion

The main objective of this study was to model granular flows in rotating frame of reference using the discrete element method. Through our various investigations we showed, in this work, that a velocity-dependent such as Coriolis force leads to a degradation of the global order of the velocity Verlet integration scheme and, more importantly, to a loss of the symplectic characteristic of the scheme. In the case of DEM, it is commonly accepted that a physical model requires global energy conservation, which is generally why all DEM open source software use the symplectic velocity Verlet Scheme. This worked revealed that, in the case of non-dissipative velocity-dependent forces such as Coriolis and Lorentz forces, the use of the velocity Verlet scheme is debatable.

In a non-inertial frame, with the initial velocity Verlet scheme implemented in LIGGGHTS, our results showed that the loss of the symplectic characteristic of the velocity Verlet scheme

for DEM in a rotating frame is not problematic because the dissipative forces stabilize the entire system. We obtained similar results in the Eulerian and Lagrangian frames for the test cases investigated.

In summary, we showed in this work that it is possible to perform DEM with velocity-dependent forces although the use of the classic velocity Verlet scheme may be inappropriate if the velocity-dependent forces are strong. In this case, a better solution would be to use higher-order non-symplectic schemes such as a second or fourth order Runge-Kutta scheme with adequatly small enough time steps.

4.12 Acknowledgements

The financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) is gratefully acknowledged. Computations were made on supercomputers Cedar and Graham managed by Calcul Québec. In particular, the authors would like to acknowledge the efficient support received from Calcul Québec systems analysts.

CHAPITRE 5 DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE CFD-DEM EN RÉFÉRENTIEL NON-INERTIEL POUR DES APPLICATIONS AUX OPÉRATIONS DE MÉLANGE SOLIDE-LIQUIDE

L'organisation de ce chapitre s'est voulu le plus fidèle au chemin logique et chronologique suivi au cours de ce projet de Maitrise. Dans un premier temps, nous décrivons les paramètres généraux, qui sont utilisés de façon commune à tous les cas étudiés. Puis, nous étudions différents « cas test » qui nous ont permis de développer, vérifier et valider le modèle numérique. Enfin, nous présentons des résultats obtenus avec ce nouveau modèle.

Nous informons le lecteur, qu'au cours de cette étude, plusieurs solveurs CFD et CFD-DEM ont été développés/adaptés pour répondre aux différents défis rencontrés. Aucun détails sur ces différents solveurs ne sera donné dans cette section. Pour plus d'informations sur ces éléments, nous renvoyons le lecteur à l'annexe A.

5.1 Équations de la CFD-DEM

Avant toute chose, commençons par décrire le modèle mathématique sur lequel repose toute cette étude CFD-DEM en référentiel tournant.

5.1.1 Équations régissant la dynamique des particules

Pour ce qui est des équations de la DEM, nous conservons exactement les même équations que celles évoquées au Chapitre 4, Tableau 4.1. Le seul petit changement est dans la formulation des équations de Newton où nous faisons intervenir un terme de couplage entre la phase solide et la phase liquide ($\boldsymbol{f}_{pf,i}$).

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{f}_{c,ij} + \boldsymbol{f}_{pf,i} + \boldsymbol{f}_{g,i} + \boldsymbol{F}_{Coriolis} + \boldsymbol{F}_{Centrifuge} \tag{5.1}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{M}_{c,ij} + \mathbf{M}_{r,ij} \tag{5.2}$$

A noter que ici encore, nous ne prenons pas en compte les effets du couple de Coriolis dans l'équation sur les moments, car nous travaillons avec des particules de faibles diamètres. De plus, nous négligeons les forces de non-contacts, comme les forces électrostatiques ou les forces

de Van Der Waals devant les forces hydrodynamiques.

5.1.2 Équations régissant la dynamique des fluides

Pour la résolution des différents paramètres du fluide, nous utilisons la *forme A* des équations de Navier-Stokes moyennées incompressibles dont la formulation est donnée ci-dessous :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_f) + \nabla \cdot (\epsilon_f \boldsymbol{u}_f) = 0 \tag{5.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_f \rho_f \boldsymbol{u}_f) + \nabla \cdot (\epsilon_f \rho_f \boldsymbol{u}_f \otimes \boldsymbol{u}_f) = -\epsilon_f \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \epsilon_f \boldsymbol{F}_g - \boldsymbol{F}_{pf} + \epsilon_f(\boldsymbol{F}_{Coriolis} + \boldsymbol{F}_{Centrifuge}) \tag{5.4}$$

Le tenseur des contraintes étant défini comme :

$$\tau = \epsilon_f \mu \left((\nabla u) + (\nabla u)^t - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \boldsymbol{u})\boldsymbol{I} \right) \tag{5.5}$$

Et la force d'interaction entre le fluide et les particules étant définis comme :

$$\boldsymbol{F}_{pf} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i}^{n_p} (\boldsymbol{f}_{pf,i} - \boldsymbol{f}_{\nabla p,i} - \boldsymbol{f}_{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},i}) \tag{5.6}$$

$$Avec \quad \boldsymbol{f}_{pf,i} = \boldsymbol{f}_{d,i} + \boldsymbol{f}_{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},i} + \boldsymbol{f}_{\nabla p,i} + \boldsymbol{f}_{Ar,i} + \sum \boldsymbol{f}_{additional,i} \tag{5.7}$$

avec ΔV le volume de la cellule fluide considérée, $\boldsymbol{f}_{pf,i}$ la sommme des forces exercée sur une particule par le fluide, lesquelles se décomposent en la force de trainée $\boldsymbol{f}_{d,i}$, la force de contrainte visqueuse $\boldsymbol{f}_{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},i}$, la force de gradient de pression $\boldsymbol{f}_{\nabla p,i}$, la poussée d'Archimède $\boldsymbol{f}_{Ar,i}$, et des forces additionnelles $\boldsymbol{f}_{additional,i}$ que sont la force de Basset, les forces de portance (Magnus et Saffman) et la force de masse virtuelle.

5.2 Mise en place d'une expérience de CFD-DEM en référentiel tournant

La particularité de ce travail réside dans le fait que toute l'étude, CFD comme DEM, se fait dans un référentiel en rotation. Ceci implique donc plusieurs étapes préliminaires à la mise en place d'une telle expérience. L'objet de cette section est de décrire ces différentes étapes qui seront reproduites dans tous les cas décris dans la suite de ce chapitre. Nous résumons ces différentes étapes à la Figure 5.1 en prenant l'exemple d'une cuve avec une PBT. Sur

cette figure on distingue trois types d'étapes :

— Étapes préliminaires CFD :

1. Maillage de la cuve.
2. Insertion de l'agitateur et raffinement du maillage autour de ce nouvel élément.
3. Condition initiale sur le fluide : Rotation à la vitesse opposée de celle du référentiel.

— Étapes préliminaires DEM :

1. Insertion des particules dans la cuve.
2. Insertion de l'agitateur et stabilisation du lit de particule.
3. Condition initiale sur les particules et la cuve : Rotation à la vitesse opposée de celle du référentiel.

— Étapes préliminaires CFD-DEM :

1. On regroupe les deux parties évoquées ci-dessus et on applique les conditions limites :
   * Bord et fond de la cuve : Rotation à la vitesse opposée de celle du référentiel.
   * Haut de la cuve : Condition de glissement.
   * Agitateur : Condition de non-glissement.
2. On décompose le domaine pour effectuer un calcul parallèle e.g., calcul à 4 processeurs sur la Figure 5.1.

A noter que les étapes CFD d'une part, et DEM d'autre part, peuvent être effectuées en parallèle.

Ces différents paramètres généraux maintenant introduis, nous pouvons commencer le processus de développement de ce nouveau modèle CFD-DEM en référentiel tournant, en décrivant les différents cas test utilisés.

5.3 Cas test 1 : Le couette cylindrique

Nous commençons ici avec un premier cas simple pour tester la possibilité de faire des études CFD-DEM en référentiel tournant. Pour cela, nous nous basons sur le cas, bien connu [15], du couette cylindrique en utilisant une seule particule. Ce cas est particulièrement intéressant car il présente une symétrie de rotation permettant ainsi une modélisation dans les deux référentiel. L'idée est de comparer la trajectoire de cette particule dans le référentiel du laboratoire et dans le référentiel tournant, lorsque le fluide est en rotation dû à un mouvement des parois du couette. La Figure 5.2 illustre les différents points de vue en fonction des deux

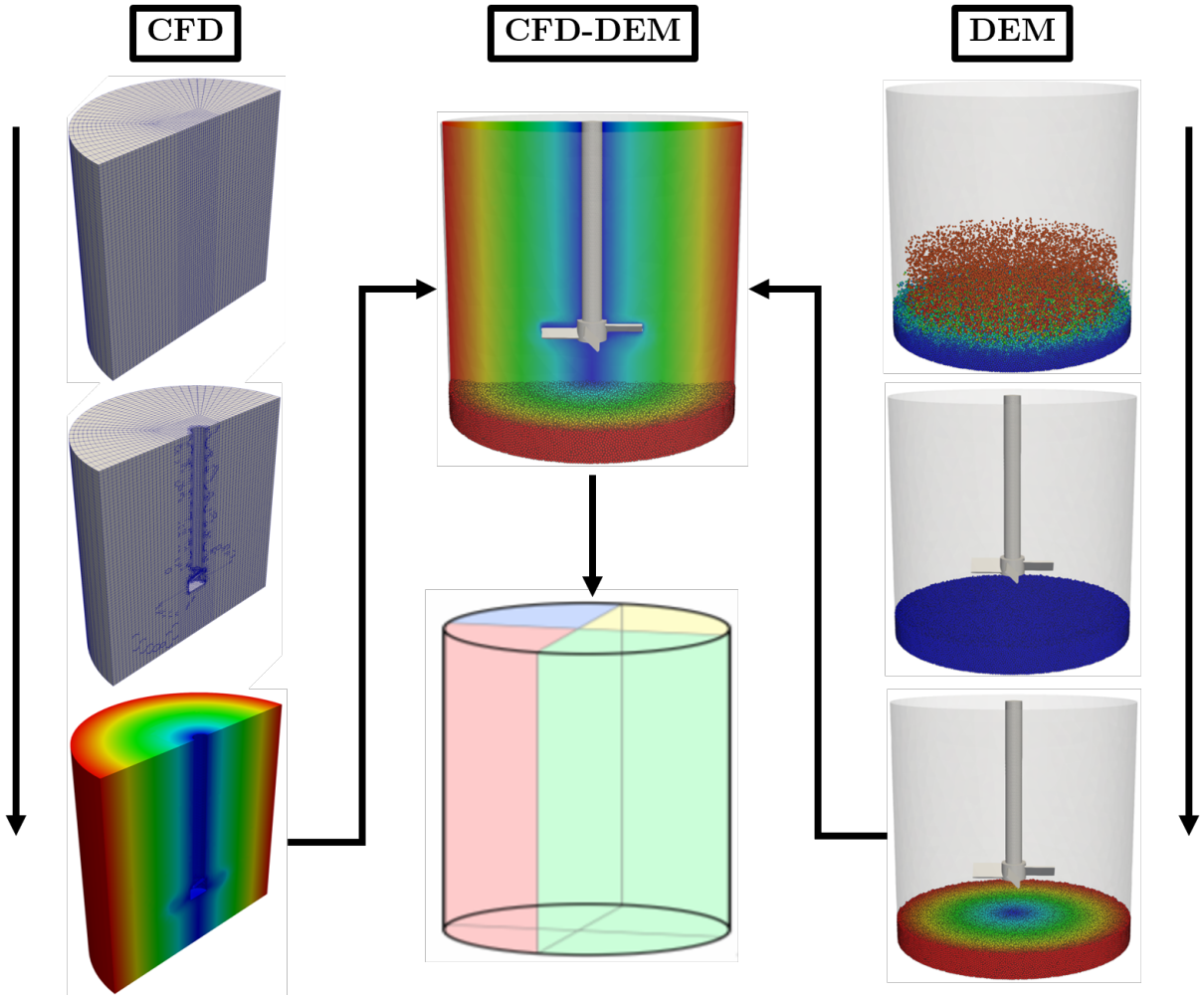

Figure 5.1 Illustration des différentes étapes préliminaires d'une expérience de CFD-DEM en référentiel tournant

référentiels d'observation : dans le référentiel Eulérien (c-à-d du laboratoire), c'est la paroi intérieure qui est en rotation, alors que la paroi extérieur est fixe ; et dans le référentiel Lagrangien (c-à-d en rotation), c'est l'inverse.

De plus, tous les paramètres CFD, DEM, de couplage et géométriques utilisés, dans cette expérience sont décris au Tableau 5.1.

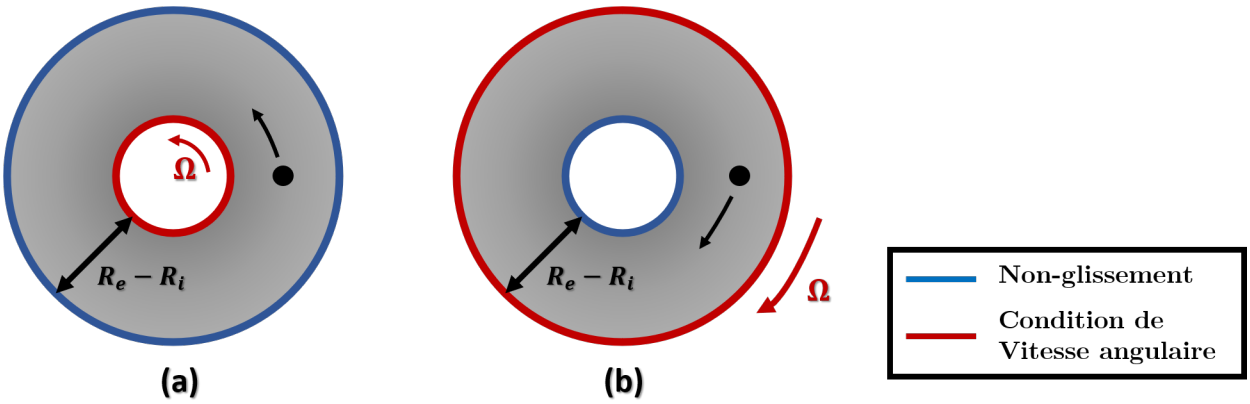

Figure 5.2 Illustration des conditions limites imposées dans le référentiel Eulérien (a) et Lagrangien (b) pour le cas du couette cylindrique

5.3.1 Description du modèle CFD-DEM

Le système maintenant bien décrit de façon générale, intéressons nous plus particulièrement au modèle numérique.

Modèle de force

Pour ce premier cas test, nous ne considérons que les forces de gradient de pression, de contraintes visqueuses et de trainée dans les équations CFD. Les expressions sont données dans le Tableau 5.2 [118]. Pour la DEM, nous ne tenons pas compte de la gravité pour que la particule reste toujours dans le fluide et ne tombe pas au fond du cylindre, pour ce cas particulier du couette cylindrique.

Stratégie de couplage

Pour la stratégie de couplage entre les phases, nous utilisons ici ce qui se fait de plus commun dans la littérature. C'est à dire un couplage implicite. Pour cela, nous utilisons la vitesse relative entre le fluide et le solide $\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f$, où $\boldsymbol{u}_p$ est la vitesse moyenne des particules dans

Paramètre	Symbole	Valeur
Module de Young	Y	50 MPa
Coefficient de restitution	e_r	0.3
Coefficient de Poisson	ν	0.25
Coefficient de friction	μ_s	0.3
Coefficient de friction de roulement	μ_r	0.1
Pas de temps DEM	Δt_{DEM}	$1 \times 10^{-5} s$
Pas de temps CFD	Δt_{CFD}	$1 \times 10^{-4} s$
Temps de couplage	Δt_c	$1 \times 10^{-4} s$
Diamètre	d_p	$5mm$
Densité des particules	ρ_p	4000 kg/m^3
Nombre de particules	N	1
Densité du fluide	ρ_f	1350 kg/m^3
Viscosité dynamique du fluide	μ_f	1 $Pa.s$
Rayon intérieur	R_i	5 cm
Rayon extérieur	R_e	8 cm
Hauteur	h	5 cm
Position initiale de la particule	x_0 y_0 z_0	6.5 0 2.5
Vitesse de rotation	Ω	20 rad/s
Maillage	$n_x \times n_y \times n_z$	$10 \times 10 \times 1$

Tableau 5.1 Paramètres de simulation CFD-DEM pour le cas du couette cylindrique

Force	Équation
Pression	$-\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla p$
Contrainte visqueuse	$-\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla \cdot \tau$
Trainée - Modèle de Stokes	$6\pi\mu\rho_f r_i(\boldsymbol{u}_f - \boldsymbol{u}_p)$

Tableau 5.2 Modèle de forces CFD-DEM utilisées dans le cas du couette cylindrique

une cellule fluide, que nous multiplions par un coefficient K_{pf}, lequel permet de mettre à l'échelle la force d'interaction. Ainsi dans les équations VANS (5.4) $\boldsymbol{F}_{pf}$ est remplacé par $K_{pf}(\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f)$ avec :

$$K_{pf} = \frac{|\boldsymbol{F}_{pf}|}{|\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f|} \tag{5.8}$$

La Figure 5.3 illustre la force exercée par la particule sur le fluide en représentant le scalaire K_{pf}.

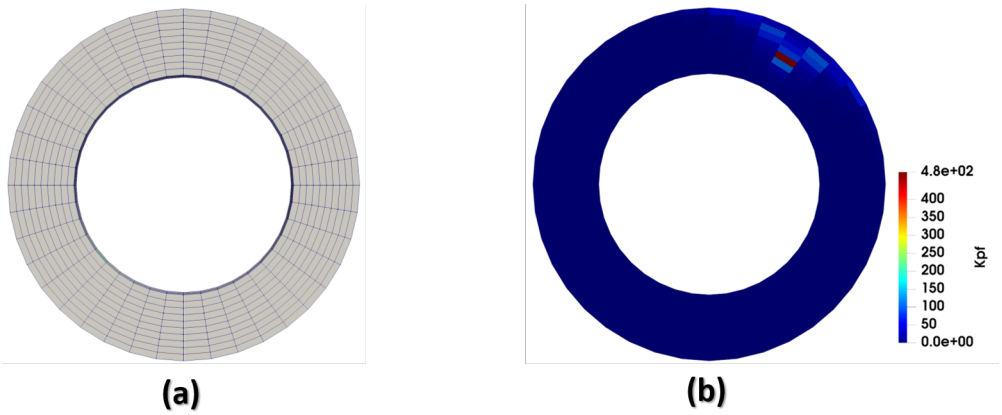

Figure 5.3 Simulation d'une particule dans un écoulement de type couette cylindrique - (a) Maillage employé (b) Illustration de la force exercée par la particule sur le fluide (K_{pf})

Modèle de viscosité

Dans ce premier cas test simple où nous considérons simplement une seule particule, nous ne tenons pas compte de la fraction volumique pour le calcul de la viscosité, et nous considérons un modèle Newtonien classique avec une viscosité dynamique constante de $1Pa.s$.

Calcul de la fraction volumique

Dans le cas étudié, nous avons une seule particule. Donc lorsque celle-ci va se déplacer d'une cellule à l'autre (en considérant la particule uniquement du point de vue de son centroïde), cela va créer de fortes discontinuités de la fraction volumique. Ceci va accélérer localement le fluide pour assurer la conservation de la masse. Cette accélération locale perturbe grandement le mouvement de la particule et vient fortement nuire à notre expérience numérique. C'est pourquoi, il est plus commun d'utiliser l'approche *divided* où la particule est décomposée en 27 sous-volumes égaux et dont la position de chacun des centroïdes de ces sous-volumes

est utilisée pour déterminer ϵ_f. Ceci permet d'assurer une meilleure continuité de la fraction volumique dans le système.

5.3.2 Résultats et discussion

Tout comme on l'a fait dans le chapitre 4 nous allons visualiser les trajectoires de la particule dans le référentiel Eulérien d'une part, et dans le référentiel Lagrangien d'autre part. Ensuite, nous effectuons une rotation des coordonnées, pour pouvoir comparer les trajectoires obtenues. Ainsi, nous obtenons la Figure 5.4 qui met en évidence que le comportement de la particule solide est le même selon que l'on ait fait l'étude CFD-DEM dans le référentiel du laboratoire ou dans le référentiel tournant associé.

En résumé, nous venons de montrer qu'il est possible de réaliser une étude de CFD-DEM en référentiel tournant avec un modèle très simple à une seule particule.

5.4 Cas test 2 : Cuve sans mélangeur

Après avoir étudié le comportement d'une seule particule, l'étape suivante est de regarder la stabilité d'une expérience de CFD-DEM en référentiel tournant avec plusieurs particules. Pour cela, le cas test imaginé est une cuve chargée de particules sans agitateur. Ainsi, dans le référentiel Eulérien, les particules sont statiques. L'idée est donc de faire le changement de référentiel c-à-d, faire les étapes décrites à la section 5.2, et de s'assurer que le lit de particules reste stabilisé au fond et tourne sans aucun mouvement axial, mouvement attendu au vu de la configuration dans le référentiel Eulérien. Tous les paramètres CFD, DEM, de couplage et géométriques utilisés dans cette expérience sont décris au Tableau 5.3. A noter que les équations utilisées ici sont exactement les mêmes que dans le cas précédent et que le modèle de forces, pour l'interaction entre les phases, est le même avec la force de gradient de pression, la force de contrainte visqueuse et le modèle de Stokes pour la trainée.

5.4.1 Description du modèle CFD-DEM

Comparé au cas test précédent, nous apportons deux ajustements majeurs :

Modèle de viscosité

Tout d'abord, il semble important de prendre en compte la présence des particules dans le calcul de viscosité. Einstein et Batchelor ont prouvé que la variation de viscosité en présence de particules était dû aux perturbations qu'elles génèrent au sein du fluide. Ce qui à pour

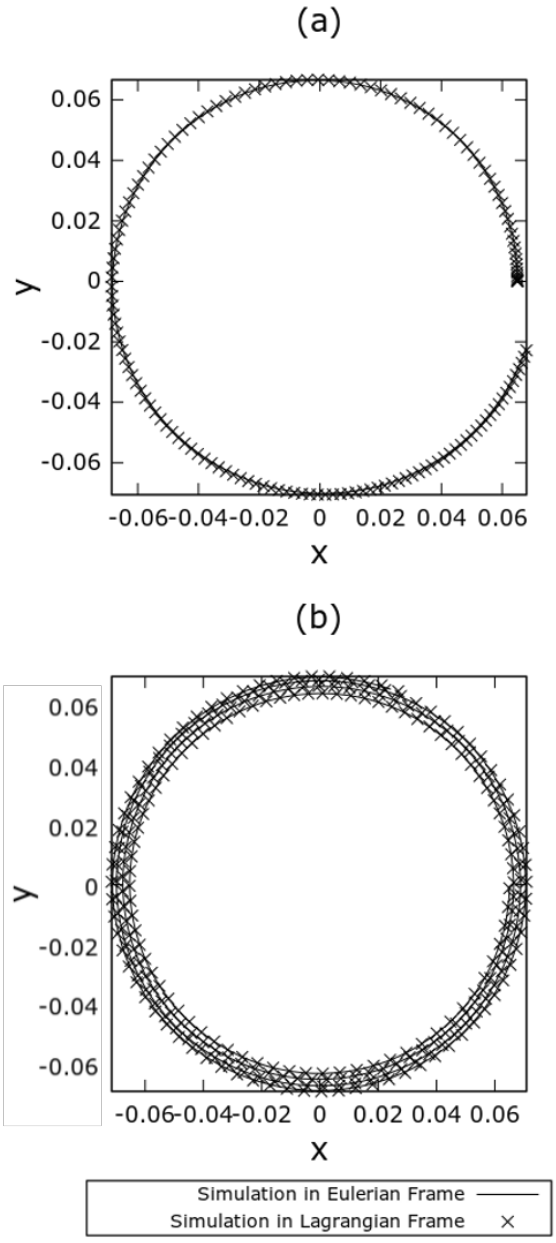

Figure 5.4 Trajectoire de la particule vue depuis le référentiel Eulérien (a) et depuis le référentiel Lagrangien (b)

Paramètre	Symbole	Valeur
Module de Young	Y	100 MPa
Coefficient de restitution	e_r	0.9
Coefficient de Poisson	ν	0.25
Coefficient de friction	μ_s	0.3
Coefficient de friction de roulement	μ_r	0.1
Pas de temps DEM	Δt_{DEM}	$5 \times 10^{-6} s$
Pas de temps CFD	Δt_{CFD}	$5 \times 10^{-5} s$
Temps de couplage	Δt_c	$5 \times 10^{-5} s$
Diamètre	d_p	$3mm$
Densité des particules	ρ_p	2500 kg/m^3
Nombre de particules	N	148700
Densité du fluide	ρ_f	1390 kg/m^3
Viscosité dynamique du fluide	μ_f	1 $Pa.s$
Diamètre de la cuve	T	0.365 m
Hauteur	H	0.365 m
Vitesse de rotation	Ω	250 RPM
Maillage	$n_x \times n_y \times n_z$	$20 \times 20 \times 80$

Tableau 5.3 Paramètre de simulation CFD-DEM pour le cas de la cuve sans mélangeur.

effet d'augmenter les dissipations visqueuses. Ainsi, nous pourrions penser que notre modèle CFD-DEM le prendrait en compte implicitement. Cependant, il semble important de rappeler ici que nous utilisons un modèle de CFD-DEM non-résolu. Or, ce phénomène de dissipation se fait, au plus, à l'échelle des particules. Ainsi, il est impossible de capturer la variation de viscosité avec notre modèle. Ceci fut prouvé et expliqué par Blais et *al* [3], qui montrèrent que l'ajout d'un modèle de viscosité local était nécessaire. Au vu des résultats concluant obtenus avec le modèle de Krieger-Dougherty, c'est celui-ci qui sera utilisé pour le reste de ce projet.

$$\epsilon_f = \left(1 - \frac{\epsilon_p}{\epsilon_p *}\right)^{-[\eta]\epsilon_p *} \tag{5.9}$$

Lissage des termes de couplage entre les deux phases

Nous revenons une fois de plus sur la notion de continuité de la fraction volumique et de la quantité de mouvement du transfert entre les deux phases. En effet, on a pu voir que pour résoudre en partie les problèmes de continuité de la fraction volumique, on peut utiliser une *approche divisée* pour la projection des particules sur la grille fluide. Mais pour encore mieux stabiliser le couplage entre la phase solide et la phase liquide, on peut ajouter un lissage supplémentaire. Pour plus de détail sur cette opération, nous renvoyons le lecteur à l'étude comparative de Pirker et *al* [180] sur les différentes méthodes de lissage existantes. Au vue des résultats de cette étude, nous appliquons ici un lissage diffusif isotrope en utilisant un filtre parabolique sur la quantité de mouvement, échangée entre les deux phases, et la fraction volumique. Ainsi, pour une quantité α, nous imposons la résolution de l'équation :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\lambda^2}{\Delta t_{CFD}} \nabla^2(\alpha) \tag{5.10}$$

Avec λ la distance caractéristique de lissage que nous fixons ici à $3d_p$; ce qui semble être suffisant pour assurer une bonne stabilité, au vu des différents résultats obtenus. Pour mieux comprendre l'intérêt de cette méthode, nous illustrons à la Figure 5.5 le processus de lissage sur la quantité de mouvement pour une cellule fluide (numérotée 1) contenant 3 particules (α, β, γ). Les différents vecteurs représentés sur cette figure respectent les règles suivantes :

$$\boldsymbol{F}_{pf,1} = \boldsymbol{f}_{pf,\alpha} + \boldsymbol{f}_{pf,\beta} + \boldsymbol{f}_{pf,\gamma} \tag{5.11}$$

$$\boldsymbol{F}_{pf,1} = \sum_{i=1}^{9} \boldsymbol{f}_{pf,i} \tag{5.12}$$

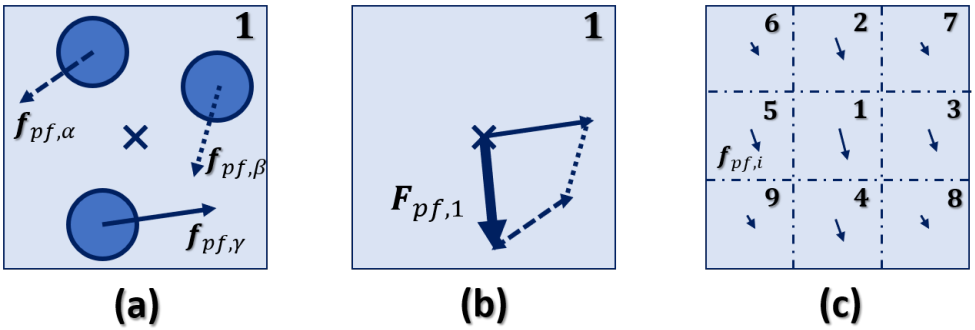

Figure 5.5 Illustration de la méthode de lissage diffusif isotrope - (a) Début du pas de temps CFD (b) Résultat obtenu sans lissage (c) Résultat obtenu en appliquant la méthode de lissage. Plus le paramètre λ est élevé, plus la distribution de la force dans la cellule 1 considérée, sera répartie sur les cellules voisines.

5.4.2 Résultats et discussion N°1

Nous ne nous attarderons pas sur cette section, car comme le met en évidence la Figure 5.6, le lit de particule ne reste pas stabilisé au fond de la cuve. En effet, l'on perçoit un décollement des particules sur le bord de la cuve. Nous devons donc adapter le modèle.

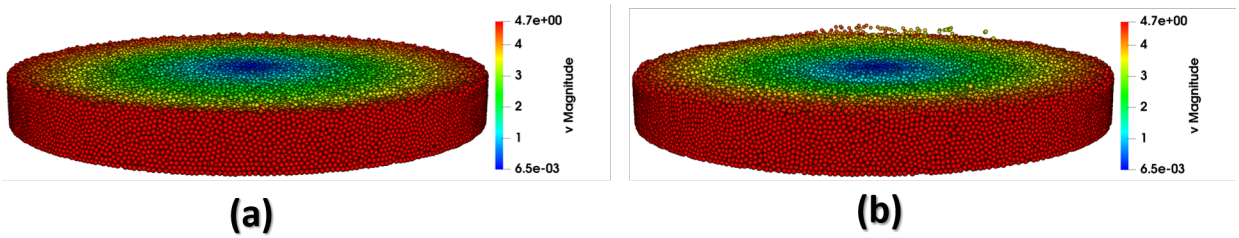

Figure 5.6 Évolution du lit de particule avec une stratégie de couplage implicite entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 10s$. On remarquera que le lit de particule ne demeure pas stable au niveau du bord de la cuve.

Couplage implicite VS couplage explicite

On rappelle que ce cas test consiste simplement à simuler un lit de particules au repos dans un référentiel Eulérien, dans le référentiel tournant associé. Ainsi, aucune contrainte liée à l'interaction fluide-solide n'est présente dans le lit de particule, puisque celui-ci est au repos

au fond de la cuve. On peut alors penser que la stratégie de couplage utilisée ne devrait pas avoir d'impact. Dans cette première expérience, nous avons utilisé le couplage implicite décrit plus haut. Ceci implique l'utilisation de la différence de vitesse $\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f$ dans le terme de couplage. Dans le référentiel Eulérien, cela ne pose pas de problèmes, car ces deux vitesses sont nulles. Dans le référentiel Lagrangien, au vu des conditions initiales imposées, ces deux vecteurs devraient être égaux. Ceci serait en effet vrai pour un maillage isotrope. Mais si on regarde plus attentivement (Figure 5.7), ce n'est pas le cas et on s'aperçoit que sur l'extérieur d'une cellule fluide, il y a plus de volume disponible, donc plus de particules dans cette partie. Cela va impliquer deux problématiques :

— Un déplacement du barycentre de la cellule fluide en raison de la différence de densité entre le fluide et les particules solides.

— Les particules extérieures ayant une vitesse plus élevées et étant plus nombreuses, la vitesse moyenne solide dans une cellule fluide sera plus élevée que la véritable condition initiale imposée. Cet effet est d'autant plus important que la cellule est déformée c-à-d que la cellule fluide est excentrée. Cet effet est bien illustré à la Figure 5.7.

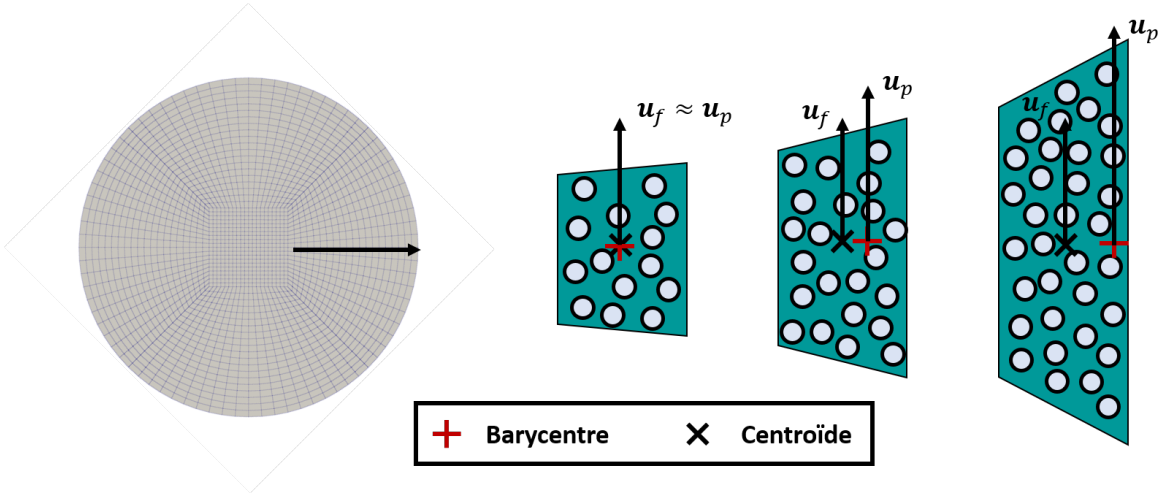

Figure 5.7 Illustration de l'impact du maillage sur la différence de vitesse $\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f$.

Ainsi, plus on s'éloigne du centre, plus la force d'interaction fluide-solide, impliquée par l'anisotropie du maillage, est importante ; alors que normalement, cette force devrait être nulle. Cette conclusion est vérifiée par la Figure 5.8 (a), où l'on voit que la vitesse des particules (ramenée dans le référentiel Eulérien) est non-nulle et plus élevée sur le bord de la cuve. Ceci est une conséquence direct de cette force d'interaction « fictive ». Cette force supplémentaire va finalement provoquer des contacts additionnels entre les particules. Ce qui peut être à l'origine des mouvements axiaux observés précédemment à proximité de la paroi (Figure 5.6).

5.4.3 Résultats et discussion N°2

Nous refaisons donc exactement la même expérience que précédemment, mais avec un couplage explicite. Ceci implique que le terme $K_{pf}(\boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_f)$, caractéristique d'un couplage implicite, est remplacé directement par la force de couplage $\boldsymbol{F}_{pf}$. Ce changement de couplage doit être pris en compte dans la stabilité du modèle. Cet aspect a été largement traité par Blais et *al* dans [3] et il est pris en compte dans le choix de notre pas de temps de couplage. À la Figure 5.8, nous comparons les résultats obtenus avec les deux stratégies employées, et nous pouvons voir que le problème évoqué ci-dessus, est résolu. Cependant, nous voyons une autre problématique avec le décollement de particules à proximité du centre, cette fois-ci (Figure 5.9). On remarque également dans les deux cas, un effet de maillage le long des arrêtes du carré centrale. Ceci, n'est cependant pas préjudiciable à la stabilité des simulations.

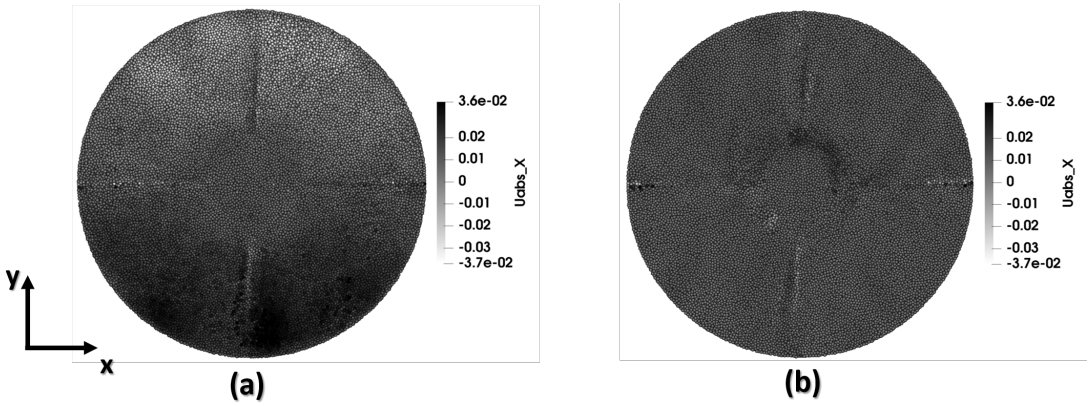

Figure 5.8 Comparaison de la composante U_x de la vitesse des particules simulée dans le référentiel Lagrangien et ramenée dans le référentiel Eulérien avec un couplage implicite (a) et explicite (b).

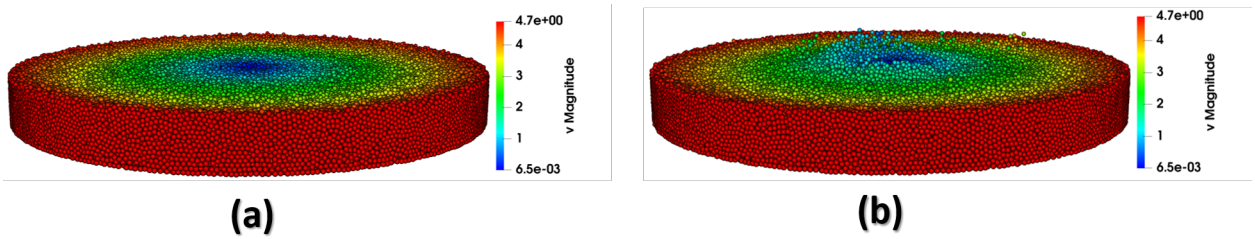

Figure 5.9 Évolution du lit de particules avec une stratégie de couplage explicite entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 10s$. On remarquera que le lit de particule ne demeure pas stable au centre de la cuve.

Équations de Navier-Stokes non-moyennées

On peut supposer que ce dernier problème à proximité du centre vient de la discontinuité de la fraction volumique au niveau du changement du maillage. Ce qui entraine une perturbation de l'écoulement et, par la suite, du lit de particule. Une première idée pourrait être de saturer la fraction volumique, en l'imposant constante et égale à 1. Le problème de cette solution est que l'on vient enlever la dépendance de la viscosité à la fraction volumique dans le modèle de Krieger-Dougherty. La solution la plus judicieuse est donc de négliger ϵ_f uniquement dans le calcul de la vitesse. Ceci revient finalement à utiliser les équations de Naviers-Stokes « classiques » dans le modèle CFD-DEM explicite.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \boldsymbol{u}_f) + \nabla \cdot (\rho_f \boldsymbol{u}_f \otimes \boldsymbol{u}_f) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{F}_g - \boldsymbol{F}_{pf} + \boldsymbol{F}_{Coriolis} + \boldsymbol{F}_{Centrifuge} \quad (5.13)$$

5.4.4 Résultats et discussion N°3

Ainsi, en appliquant un modèle CFD-DEM basé sur les équations de Navier-Stokes pour la description du mouvement fluide et traitant le couplage entre la phase solide et fluide de façon explicite, nous obtenons enfin le résultat attendu, à savoir un lit de particules, en rotation, stabilisé au fond de la cuve (Figure 5.10). Nous pouvons donc bâtir notre modèle CFD-DEM en référentiel tournant sur ces résultats préliminaires.

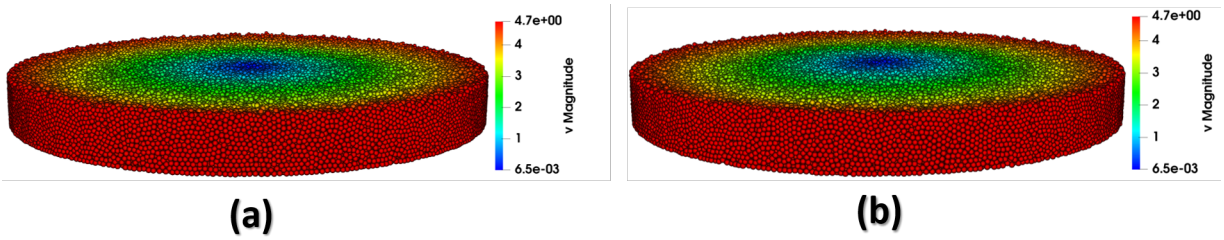

Figure 5.10 Évolution du lit de particules avec une stratégie de couplage explicite et un solveur CFD basé sur les équations de Navier-Stokes non-moyennées entre (a) l'instant initial et (b) à $t = 60s$, après 250 tours.

5.5 Cas test 3 : Validation et vérification du modèle en référentiel tournant avec un système de cuve agitée par une PBT

Après avoir obtenu des résultats concluants sur la faisabilité de réaliser des expériences de CFD-DEM en référentiel tournant, il est maintenant temps de définitivement valider le modèle. Pour cela, nous allons nous baser sur de précédents résultats expérimentaux et numé-

riques obtenus à l'URPEI pour des cuves agitées avec une turbine à pâles inclinées en milieux visqueux. Nous noterons que tous les paramètres utilisés ici sont exactement les mêmes que ceux de la section précédente (*cf* Tableau 5.3). Ce qui correspond également aux conditions initiales utilisées dans [3, 10, 60].

5.5.1 Description du modèle CFD-DEM

Pour ce qui est du modèle CFD-DEM, nous nous appuyons, bien sûr, sur les résultats concluants obtenus à la section 5.4.4 précédente. Nous adaptons simplement ici le modèle de force.

Modèle de force

Depuis le début de cette étude CFD-DEM, nous utilisons un modèle de Stokes pour la force de trainée. Nous allons ici, améliorer le modèle, en utilisant un modèle de trainée prenant en compte la fraction volumique. Pour cela, nous utilisons le modèle de Di Felice [83] que nous décrivons au tableau 5.4. A noter, que nous ajoutons aussi la poussée d'Archimède et que nous négligeons ici encore les force de portances (Magnus et Saffman), de Basset et de masse virtuelle.

Force	Équation
Pression	$-\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla p$
Contrainte visqueuse	$-\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla \cdot \tau$
Archimède	$-\rho_f V_p \boldsymbol{g}$
Trainée - Modèle de Di Felice	$\frac{1}{8} C_D \rho_f \pi d_p^2 \epsilon_f^{2-X_i} \left\|\boldsymbol{u}_f - \boldsymbol{u}_p\right\| (\boldsymbol{u}_f - \boldsymbol{u}_p)$
	$X_i = 3.7 - 0.65 \exp\left(\frac{(-1.5 - log(R_{ep}))^2}{2}\right)$
	$C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{R_{ep}}}\right)^2$
	$R_{ep} = \frac{d_p \epsilon_f \left\|\boldsymbol{u}_f - \boldsymbol{u}_p\right\| \rho_f}{\mu_f}$

Tableau 5.4 Modèle de force CFD-DEM utilisé dans le cas de la cuve agitée avec une PBT

5.5.2 Description de la géométrie

La géométrie, utilisée dans ce cas, est entièrement décrite avec le Tableau 5.5 et la Figure 5.11.

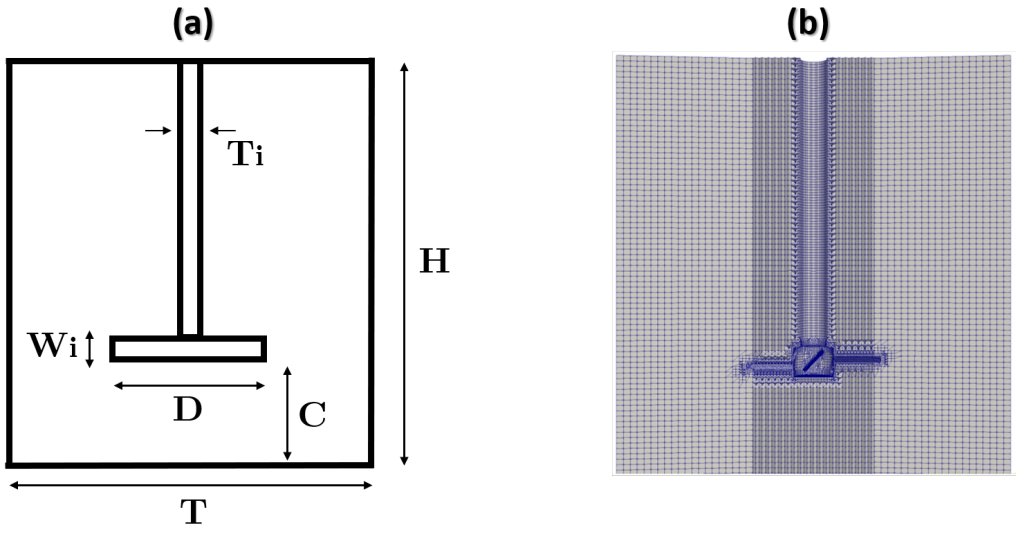

Figure 5.11 Géométrie utilisée pour simuler une opération de mélange solide-liquide avec une PBT - (a) Différents paramètres (b) Vue de coupe du maillage employé

Élément	Symbole	Dimension
Diamètre de la cuve	T	$0.365m$
Diamètre de la PBT	D	$\frac{T}{3}$
Hauteur de liquide	H	T
Dégagement au fond	C	$\frac{T}{4}$
Hauteur des pâles de la PBT	W_i	$\frac{D}{5}$
Diamètre de la tige	T_i	$\frac{D}{5}$

Tableau 5.5 Paramètres géométriques utilisés pour la simulation d'un mélangeur avec une PBT

5.5.3 Validation visuelle

Pour commencer notre processus de validation, nous voudrions simplement faire quelques observations visuelles. Premièrement, commençons par observer le comportement du fluide. En effet, nous savons qu'une PBT génère des écoulements mixtes avec des composantes axiales et radiales. La Figure 5.12 montre que le modèle CFD-DEM est capable de bien retranscrire les caractéristiques propres à un écoulement généré par une PBT.

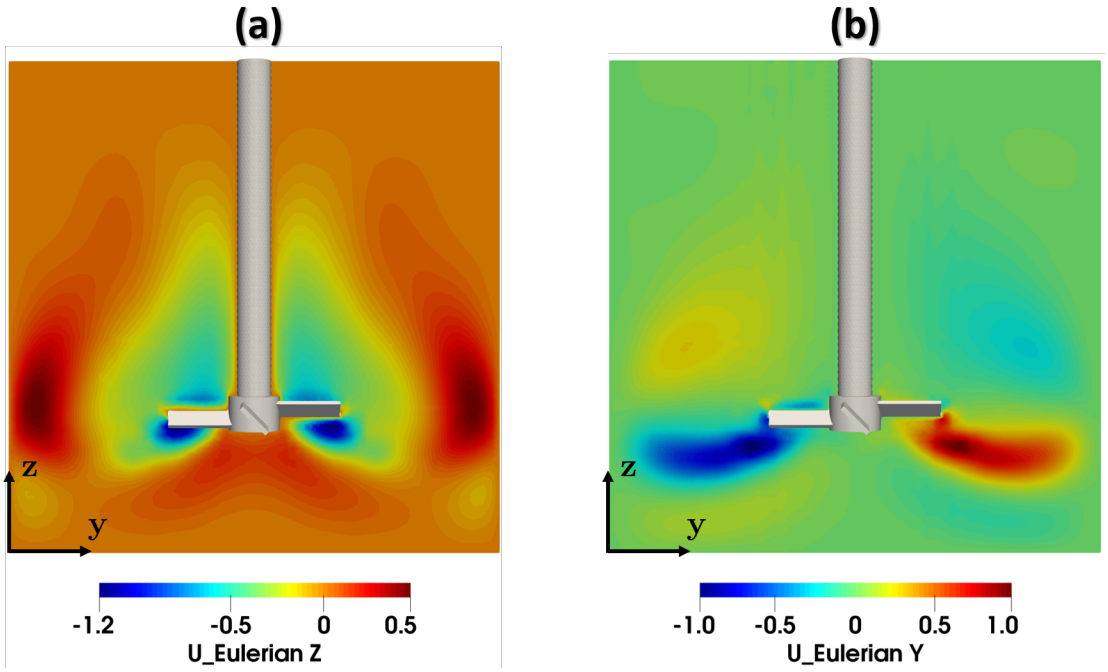

Figure 5.12 Vue en coupe dans le plan $y - z$ des composantes axiales (a) et radiales (b) de la vitesse du fluide, ramenées dans le référentiel Eulérien pour une vitesse d'agitation de 450RPM

Un autre phénomène hydrodynamique, caractéristique de l'agitation avec une turbine à pâles inclinées, est la formation d'une zone de faible concentration en particules, à proximité de l'agitateur. Cette forme est particulièrement remarquable, car de forme toroïdale. Ce phénomène, est connu de longue date pour les système monophasiques [181, 182] et il a également été observé pour les systèmes diphasiques [3]. L'observation de cette zone est donc un autre élément visuel pouvant nous aider à caractériser la précision de notre modèle. La Figure 5.13 illustre parfaitement cette zone toroïdale de faible concentration en particule pour une vitesse d'agitation suffisamment élevée.

Enfin, une dernière particularité de l'agitation avec une PBT avec pompage vers le bas, est la formation d'un cône de particules directement sous l'agitateur. Premièrement, nous

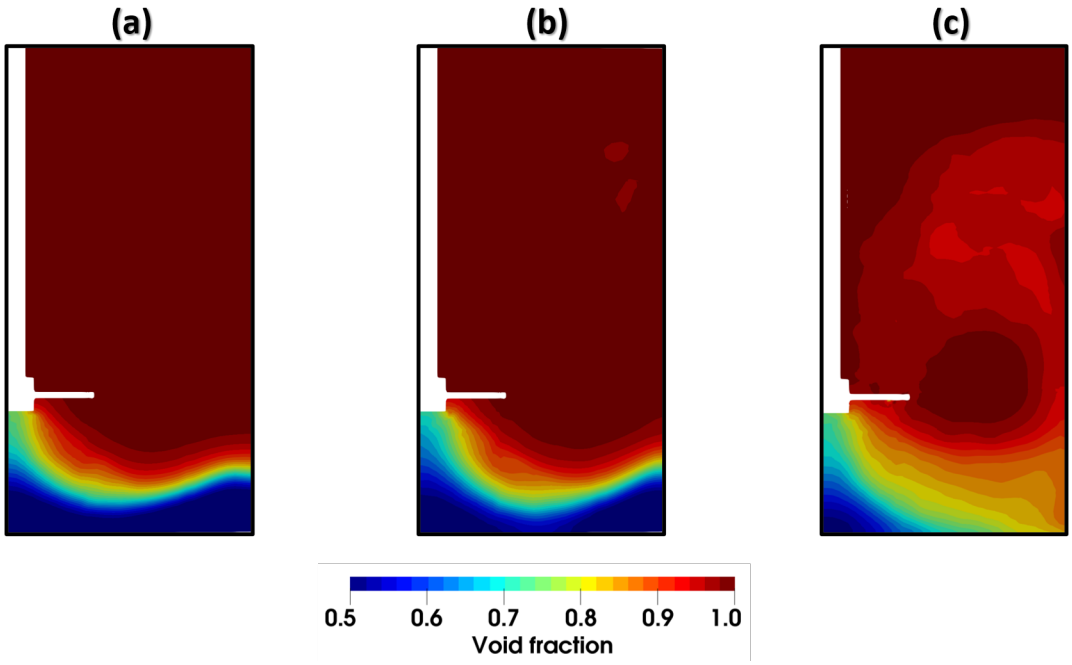

Figure 5.13 Vue en coupe dans le plan $y - z$ de la fraction de vide, en régime permanent, pour différentes vitesses d'agitation - (a) 250RPM, (b) 350RPM, (c) 450RPM

pouvons voir que notre modèle retranscrit cet autre phénomène caractéristique à la Figure 5.14. Maintenant essayons d'aller un peu plus loin en comparant la forme de ce cône avec la forme d'autres cônes obtenus expérimentalement [10], et numériquement avec un modèle CFD-DEM basé sur la méthode des conditions immergés [3]. Pour cela, nous comparons les rapports entre la dimension de la base du cône et le diamètre de la cuve. Nous avons conscience que cette méthode souffre de nombreuses incertitudes de mesure. Mais elle a tout du moins le mérite, de nous donner des informations importantes sur la capacité de notre modèle numérique à retranscrire les phénomènes hydrodynamiques occurents dans une cuve de mélange. La Figure 5.14 illustre les différents résultats obtenus tandis que, dans le Tableau 5.6 nous retrouvons les résultats des mesures effectuées.

Ce que nous pouvons retenir de ces résultats préliminaires, est que le modèle CFD-DEM semble capable de bien retranscrire le comportement du fluide comme celui des particules. Nous pouvons donc envisager de continuer notre processus de validation.

5.5.4 Validation quantitative

Nous basons la suite de cette validation du modèle CFD-DEM en référentiel tournant, en nous appuyant sur une étude énergétique, en comparant les courbes de puissances obtenues

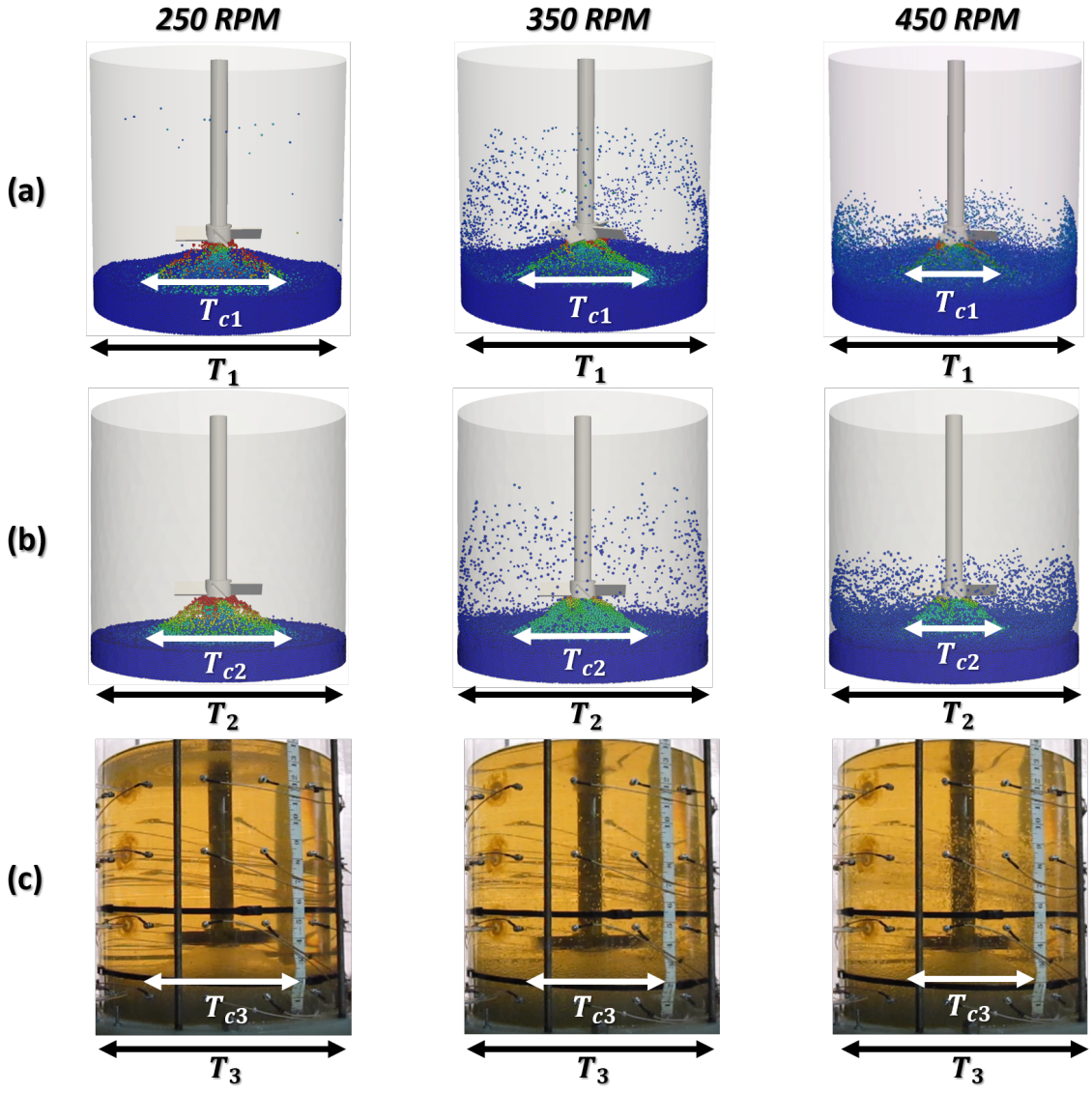

Figure 5.14 Illustration du comportement des particules obtenu pour différentes vitesses d'agitation avec : (a) un modèle CFD-DEM utilisant la méthode des conditions immergées, (b) avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant, (c) de façon expérimentale.

Méthode	$250RPM$ $(Re = 86)$	$350RPM$ $(Re = 121)$	$450RPM$ $(Re = 155)$
Conditions immergées	$\frac{T_{c1}}{T_1} = 0.54$	$\frac{T_{c1}}{T_1} = 0.48$	$\frac{T_{c1}}{T_1} = 0.37$
Référentiel tournant	$\frac{T_{c2}}{T_2} = 0.54$	$\frac{T_{c2}}{T_2} = 0.50$	$\frac{T_{c2}}{T_2} = 0.36$
Expérimentale	$\frac{T_{c3}}{T_3} = 0.57$	$\frac{T_{c3}}{T_3} = 0.50$	$\frac{T_{c3}}{T_3} = 0.42$

Tableau 5.6 Comparaison de la dimension des cônes obtenus expérimentalement et avec différentes méthodes numériques pour différentes vitesses

expérimentalement par Lassaigne *et al* [10] et celles obtenues à l'aide de notre modèle numérique. Les résultats obtenus sont illustrés à la Figure 5.15 pour une gamme de Reynolds comprise entre 60 et 150. Au vu du très bon accord entre ces deux courbes, nous pouvons continuer sereinement le processus de validation.

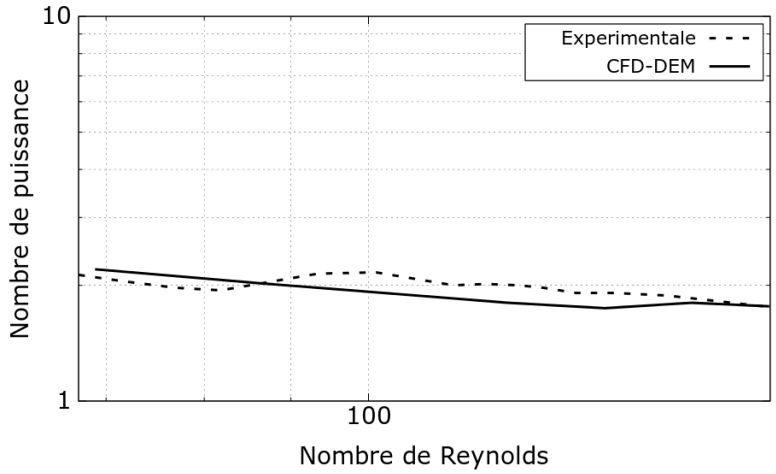

Figure 5.15 Comparaison des courbes de puissances obtenues expérimentalement et numériquement avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant (échelle log-log).

Ainsi, pour définitivement conclure quant à la validité du modèle, nous effectuons une analyse de fractions suspendues de particules. Une fois encore, ce processus de validation est motivé par les résultats des études de Blais *et al* et Lassaigne *et al* [3,10]. Pour la mesure numérique de la fraction suspendue, nous utilisons la méthode *LSFA* (Lagrangian suspended fraction analysis). Cette méthode repose sur le fait de considérer une particule comme suspendue, si celle-ci se déplace d'une certaine distance Δz_{js}, dans la direction axiale, pendant un temps Δt_{js}. Une illustration de cette méthode est donnée à la Figure 5.16. Dans la présente étude,

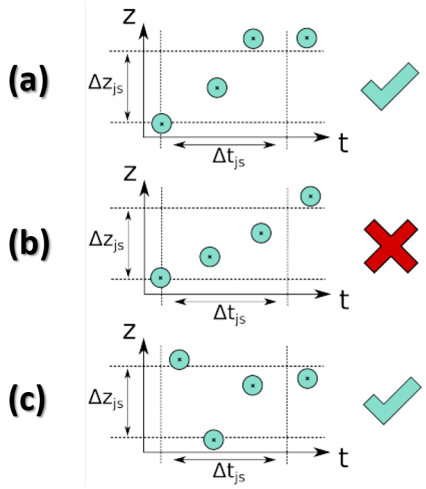

Figure 5.16 Illustration de la méthode LSFA pour différents cas : (a) La particule est considérée comme suspendue (b) La particule n'est pas considérée comme suspendue (c) La particule est considérée comme suspendue malgré le fait qu'entre les positions initiales et finales il n'y ait pas une distance de Δz_{js} - extrait de [3]

les paramètres choisis sont $\Delta z_{js} = d_p$ et $\Delta t_{js} = 2sec$. Ce choix de temps est motivé par le critère de Zwietering qui stipule qu'une particule est considérée comme suspendue si elle ne demeure pas plus de 2 secondes au fond de la cuve. Les différents résultats obtenus sont illustrés à la Figure 5.17. Sur cette figure, nous pouvons observer que la suspension des particules commence réellement à partir de *300RPM*, pour atteindre une suspension complète dans un intervalle compris entre *400RPM* et *450RPM*. Ce qu'il est intéressant d'observer, est que les résultats numériques et expérimentaux mènent aux mêmes conclusions. Nous pouvons néanmoins observer une légère différence au niveau de la suspension complète ($N \in [400, 450]$). Ceci est une conséquence direct du fait qu'expérimentalement la technique de pression de jauge a été utilisé pour mesurer les fractions suspendues. Avec cette méthode, une fois la pression hydrostatique stabilisée, on considère que la totalité des particules est suspendue. Or, comme on l'a vu précédemment, les particules constituant le cône sous l'agitateur demeurent et demeureront non-suspendues. Les mesures numériques s'appuient, quant à elle, sur la méthode LSFA qui permet de prendre en compte cette fraction non-suspendu dans le cône ; les particules dans cette zone ayant un mouvement axial limité. Ceci explique en partie l'écart dans cette zone de vitesse. A noter qu'une explication similaire peut être donnée pour justifier l'écart entre les résultats expérimentaux et numériques à faible vitesse ($N \in [200, 300]$). Cependant, il est important de noter que ceci n'est pas préjudiciable pour la détermination de N_{js} avec une très bonne précision. Enfin, nous observons que cette figure met également en lumière la nécessité d'utiliser un modèle de trainée dépendant de la frac-

tion volumique. En effet, les résultats obtenus avec le très simple modèle de Stokes ne sont absolument pas concluant, contrairement à ceux obtenus avec le modèle de Di Felice.

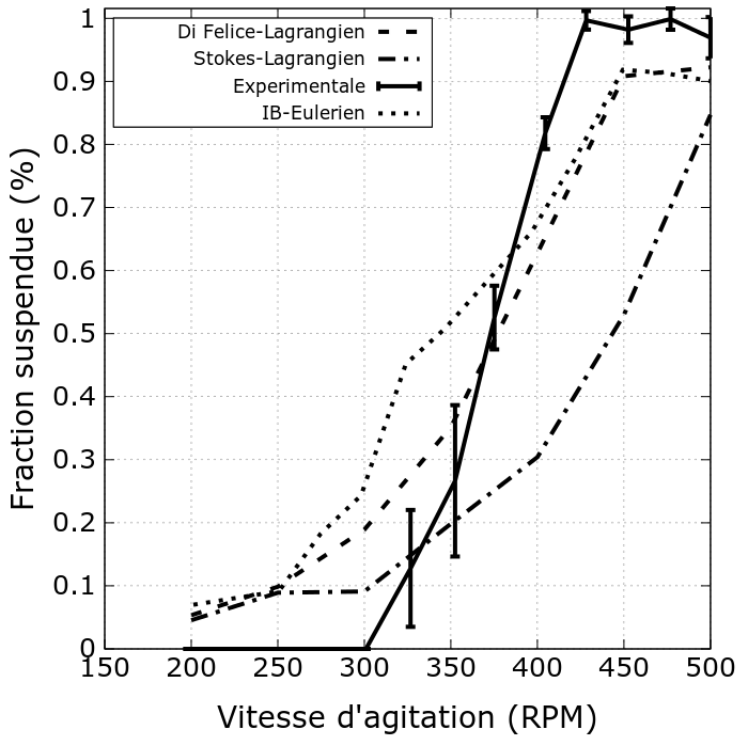

Figure 5.17 Comparaison des courbes de fractions suspendues obtenues de façon expérimentale [10] et de façon numérique avec un modèle CFD-DEM basé sur la méthode des conditions immergées [3] et avec le modèle CFD-DEM en référentiel tournant.

Ainsi au vu de tous les résultats énoncés et présentés dans cette section, nous pouvons définitivement conclure que le modèle CFD-DEM en référentiel tournant développé, est suffisamment robuste et précis pour pouvoir modéliser des opérations de mélange solide-liquide.

5.6 Application au double ruban hélicoïdal

Notre modèle maintenant définitivement validé, nous pouvons alors l'exploiter en toute confiance. Nous rappelons que la principale force de ce modèle est sa capacité à simuler tout type de géométrie d'agitateur. C'est pourquoi, nous décidons de modéliser ici, une géométrie encore jamais étudiée numériquement pour des opérations de mélange solide-liquide, et très utilisée en milieu visqueux : le double ruban hélicoïdal. La description de la géométrie

employée est donné au Tableau 5.7 et la Figure 5.18. Pour plus de détail sur le maillage employée nous renvoyons le lecteur à l'Annexe B. Pour ce qui est des propriétés physiques des particules et du fluide, nous utilisons exactement les mêmes que celles utilisées depuis le début de ces expériences de CFD-DEM (cf Tableau 5.3).

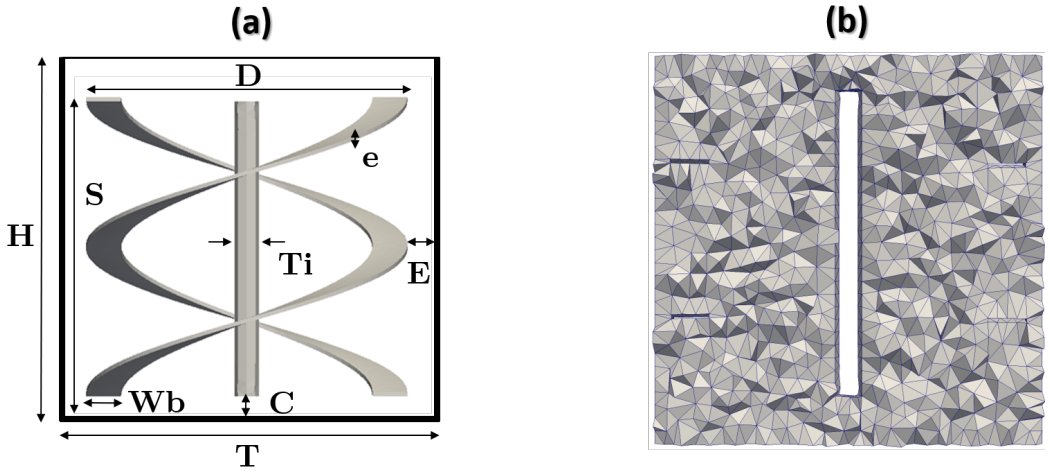

Figure 5.18 Géométrie utilisée pour simuler une opération de mélange solide-liquide avec un double ruban hélicoïdal - (a) Différents paramètres (b)Vu de coupe du maillage employé

Élément	Symbole	Dimension
Diamètre de la cuve	T	$36.5cm$
Diamètre de l'agitateur	D	$33.3cm$
Hauteur de liquide	H	T
Hauteur du ruban	S	D
Dégagement au fond	C	$\frac{T}{8}$
Distance au mur	E	$1.6cm$
Épaisseur d'un ruban	e	$0.4cm$
Largeur d'un ruban	W_b	$3.6cm$
Diamètre de la tige	T_i	$2.54cm$

Tableau 5.7 Paramètres géométriques utilisés pour la simulation d'un mélangeur avec un double ruban hélicoïdal

Commençons par observer le comportement du fluide (Figure 5.19). Ce que nous pouvons retenir de cette figure, est que la composante principale de la vitesse reste la composante

axiale. Celle-ci se décompose en deux flux ascendants, un à proximité du bord de la cuve et un autre proche du centre, le long de l'axe de l'agitateur, ainsi qu'un flux descendant situé entre les deux.

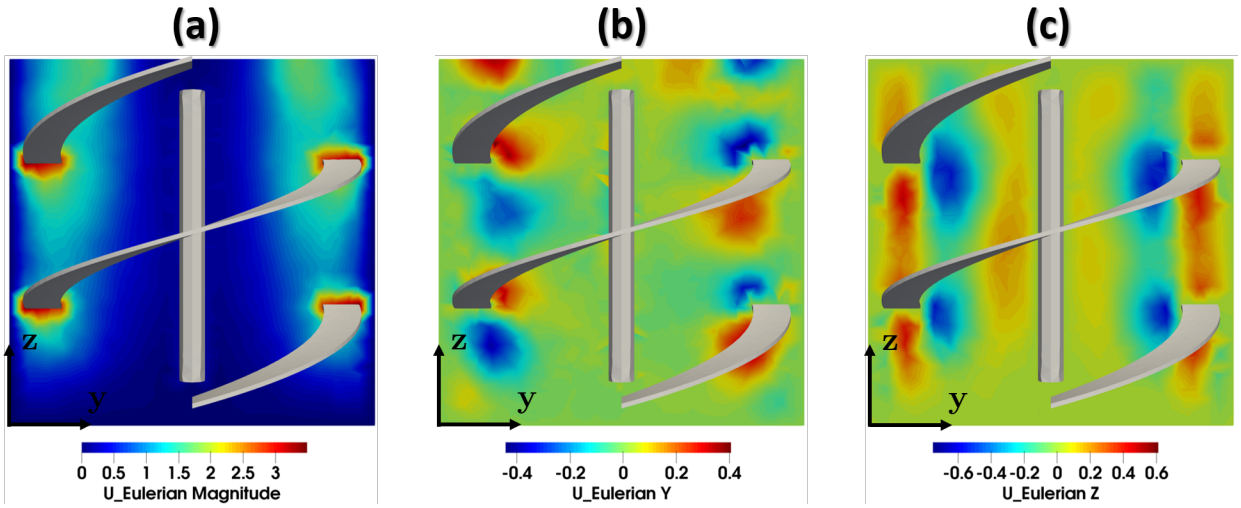

Figure 5.19 Vue en coupe dans le plan $y - z$ de la magnitude de la vitesse du fluide dans le référentiel Eulérien (a) ainsi que de ses composantes radiales (b) et axiales (c) pour une vitesse d'agitation de 200RPM

Nous pouvons également observer l'évolution de la fraction de vide, en fonction de la vitesse d'agitation. C'est ce qui est illustré à la Figure 5.20. Nous pouvons voir que les particules montent préférentiellement sur les bords de la cuve. Et que c'est seulement à partir d'une vitesse suffisamment importante, qu'il y a une suspension des particules le long de l'axe de l'agitateur. Ceci est parfaitement cohérent avec les observations faites sur les composantes de la vitesse du fluide.

Enfin, nous concluons en déterminant N_{js} pour le système étudié. Ainsi, comme pour la PBT, nous calculons la fraction suspendue pour différentes vitesses d'agitation. Ce résultat est illustré à la Figure 5.21, permettant de conclure que pour ce système $N_{js} \in [250, 300]$.

5.7 Résultats additionnels : Stratégie d'agglomération des particules

Au vu des temps de calculs toujours relativement élevés pour ce type de systèmes avec des approches Euler-Lagrange, il nous a semblé intéressant de réfléchir à différentes stratégies permettant d'accélérer les simulations. Comme le facteur le plus limitant est le nombre de particules, nous avons plutôt investigué du côté de ce qu'on appelle le *Coarse Graining*. Cette méthode consiste à regrouper plusieurs particules ensemble et ainsi à en diminuer le nombre

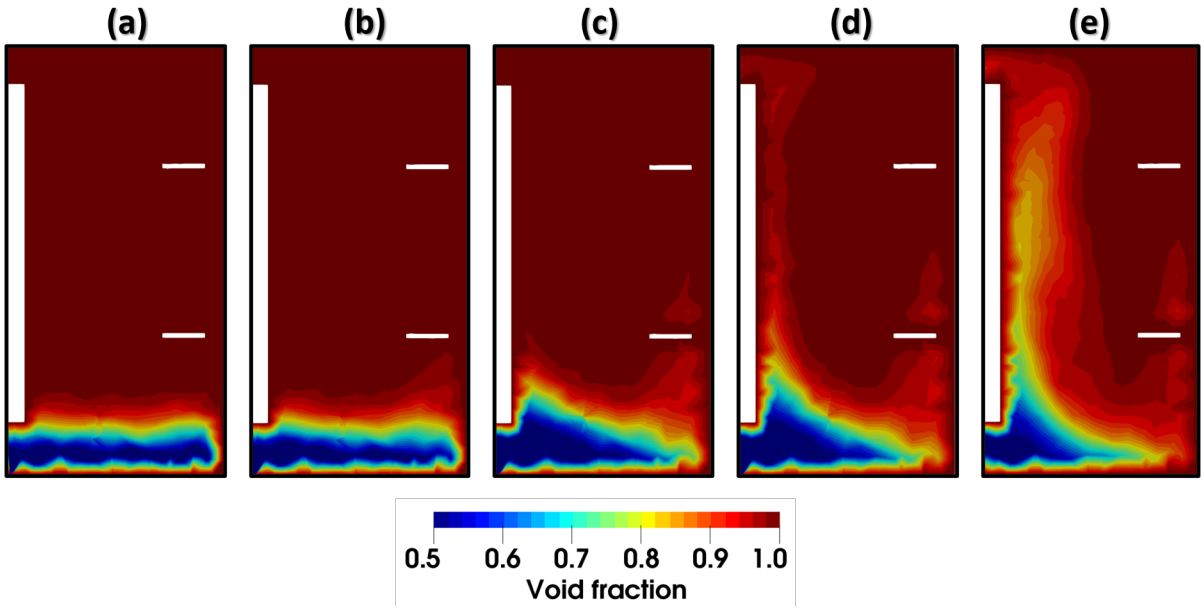

Figure 5.20 Vue en coupe dans le plan $y - z$ de la fraction de vide, en régime permanent, pour différentes vitesses d'agitation - (a) 10RPM, (b) 50RPM, (c) 110RPM, (d) 150RPM, (e) 200RPM

total. Pour tester nos différentes approches, nous avons utilisé exactement le même système que dans le cas de la PBT où nous disposons de résultats numériques et expérimentaux. La différence est que nous avons décidé d'utiliser des particules deux fois plus grosses. Ainsi, on regroupe 8 particules de $3mm$, du système initial, en une seule plus grosse de $6mm$ (Figure 5.22), pour ainsi conserver le même volume de solide. Le système modélisé passe donc de 148700 particules à 15558, accélérant environ les simulations d'un facteur 4. Nous avons conscience que le *coarse graining* ne semble pas exploitable pour étudier la répartition précise des particules dans la cuve, ou pour faire des études hydrodynamiques avancées. Mais, en revanche, elle pourrait permettre de retranscrire d'autres informations importantes telles que la fraction suspendue. Nous avons donc imaginé deux stratégies basées sur cette approche :

5.7.1 Masse équivalente

Nous avons commencé très simplement en ne considérant que la masse volumique. Lorsque l'on regroupe des particules ensemble, il y a une limitation sur la fraction maximale d'empilement. Cette fraction est souvent prise égale à 0.64 pour des sphères [68]. Ainsi, lorsque que l'on regroupe des particules ensembles il faut également considérer une fraction de liquide. Conserver la même masse volumique pour les plus grosses particules se révèle donc être une grosse approximation. Pour tenter de rectifier cela, nous calculons alors, ce que l'on appellera,

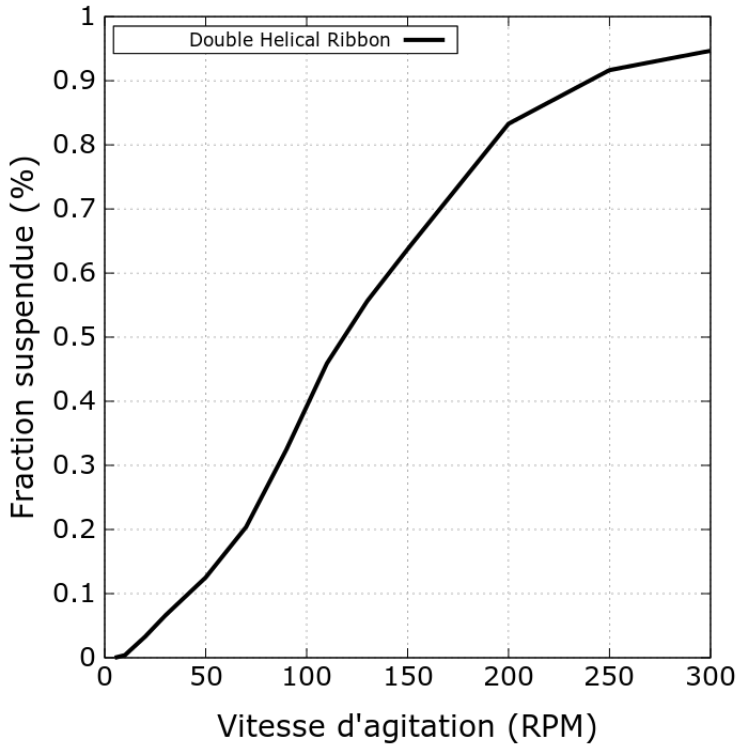

Figure 5.21 Courbe de fraction suspendue obtenue avec un double ruban hélicoïdal

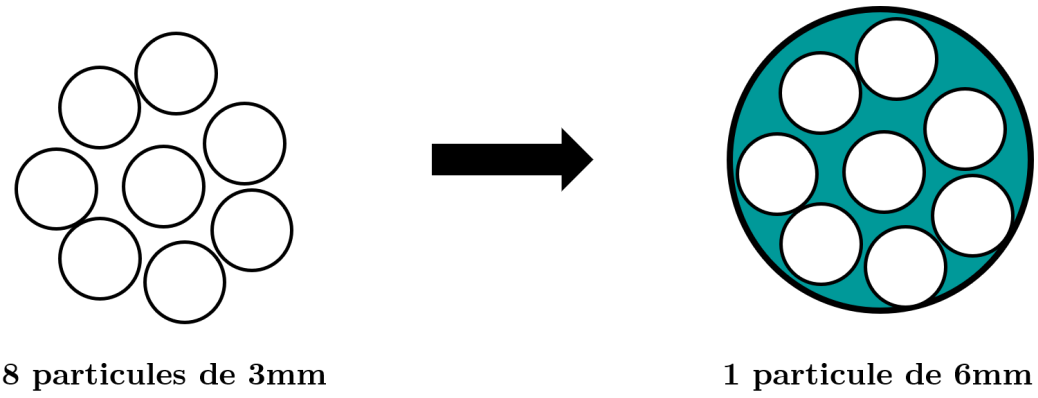

Figure 5.22 Illustration du principe de la stratégie d'agglomération des particules

une masse volumique équivalente (ρ_{eq}).

$$\rho_{eq} = \rho_{p,3mm}\epsilon_p^* + \rho_f(1-\epsilon_p^*) = 2100kg/m^3 \tag{5.14}$$

Ainsi notre système est composé de 15558 particules de $6mm$ de diamètre et de masse volumique égale à $2100kg/m^3$. Nous utilisons le même processus de validation que précédemment en nous basant sur la fraction suspendue de particules. Les résultats sont observables à la Figure 5.23. A noter que pour la mesure LSFA il nous a semblé logique de conserver la même longueur caractéristique que dans le cas précédent à savoir $\Delta z_{js} = d_p = 3mm$.

5.7.2 Masse équivalente et viscosité équivalente

Dans l'idée d'améliorer ce modèle de *Coarse Graining*, nous avons repensé le problème en nous basant sur le fait que l'une des principales différences d'avoir des particules plus grosses, est l'augmentation de la masse. Cette variation de diamètre a donc comme premier impact, l'augmentation de la force de gravitation. Parmis les différents nombres adimensionels définis dans la revue de littérature, un est particulièrement intéressant pour cette application : le nombre d'Archimède. L'idée ici est, que la modification des particules ne doit pas influencer l'importance relative entre les forces visqueuses et les forces gravitationnelles. C'est pourquoi, nous calculons ici ce que l'on appellera une viscosité équivalente, calculée en égalisant les nombres d'Archimèdes pour les 2 diamètres considérés.

$$Ar_{3mm} = Ar_{6mm} \tag{5.15}$$

$$\text{(ie)} \qquad \frac{d_{p,6mm}^3 g\rho_f(\rho_{eq}-\rho_f)}{\mu_{eq}^2} = \frac{d_{p,3mm}^3 g\rho_f(\rho_p-\rho_f)}{\mu_f^2} \tag{5.16}$$

$$\text{(ie)} \qquad \mu_{eq} = 5.02Pa.s \tag{5.17}$$

Ainsi, notre système est composé de 15558 particules de $6mm$ de diamètre, de masse volumique égale à $2100kg/m^3$ et la viscosité du fluide est de $5.02Pa.s$. Nous utilisons toujours le même processus et nous calculons la fraction suspendue pour différentes vitesses d'agitation. Les résultats sont observables à la Figure 5.23.

Au vu de ces différents résultats, nous pouvons observer, qu'un modèle de *coarse grainig*, permet de retranscrire, de façon globale, la mise en suspension de particules. Cependant, on peut tout de même noter que la suspension complète est moins franche. Ceci complique

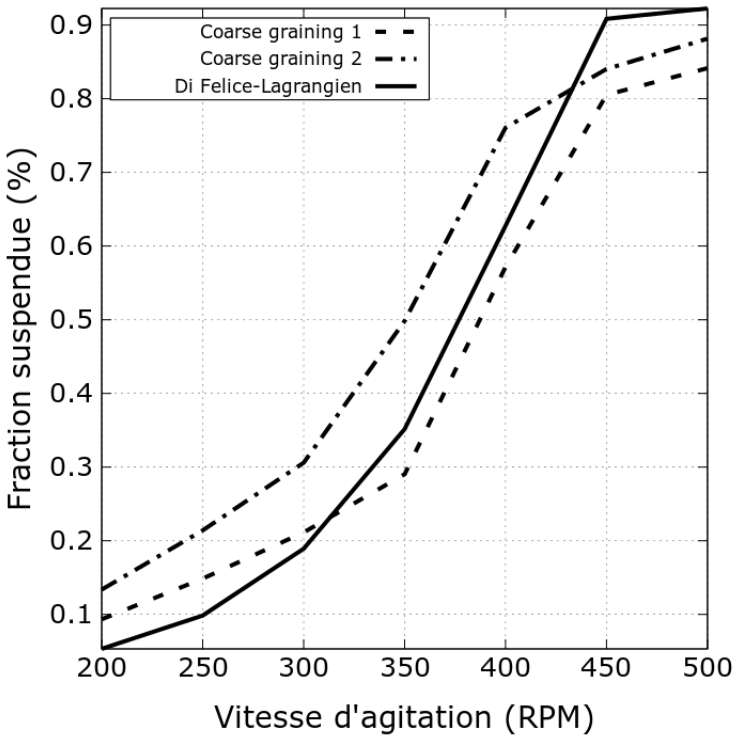

Figure 5.23 Comparaison des résultats obtenus précédemment (Di Felice Lagrangien) avec les résultats obtenus en utilisant une stratégie d'agglomération des particules utilisant une masse équivalente (Coarse graining 1) et une viscosité équivalente (Coarse graining 2). Pour les mesures nous utilisons la méthode LSFA avec les critéres $\Delta z_{js} = d_p = 3mm$ et $\Delta t_{js} = 2sec$.

la détermination de N_{js} de façon précise. Mais, on peut tout de même avoir une idée de l'intervalle dans lequel se situe cette vitesse minimale de suspension complète.

Pour conclure, on pourrait voir cette approche comme une approche complémentaire, plus qu'une approche de substitution. En effet, on utiliserait le *coarse graining*, dans un premier temps, pour avoir une idée rapide du comportement de la mise en suspension. Puis on utiliserait l'approche classique pour l'intervalle de vitesse « déterminant », c-à-d proche de N_{js}.

CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE

La revue de la littérature avait permis de mettre en lumière le manque d'études de mélange solide-liquide, menées en régime laminaire, avec de fortes concentrations en particules. Depuis quelques années maintenant, l'URPEI tente de rectifier cela, avec notamment les travaux expérimentaux de M.Lassaigne [10] et O.Bertrand [7] et ceux, numériques, de B.Blais [3, 30, 60, 109]. Ces travaux sont d'autant plus importants qu'aujourd'hui, dans l'industrie, s'accroit le besoin de travailler avec des fluides visqueux et des systèmes non-dilués. Le nombre d'études étant limitées sur ce genre de régime, il est alors de coutume, actuellement, d'utiliser les mêmes conclusions que celles obtenues en régime turbulent. Ce qui n'est absolument pas viable, d'un point de vue énergétique et économique. L'exemple le plus probant est sans aucun doute la corrélation de Zwietering, laquelle reste encore largement utilisée 60 ans après sa publication ; alors que sa précision n'a de cesse d'être remise en cause et, ce encore plus, lorsqu'il s'agit de fluides visqueux. Ce que nous avons pu finalement retenir, est que l'étude du mélange solide-liquide en régime laminaire, est un problème à part entière. Et, que de nouvelles approches doivent être envisagées.

L'une des principales caractéristiques de ce type de régime, est la géométrie employée. En effet, on trouve que les agitateurs les plus efficaces sont des agitateurs tels que le ruban hélicoïdal ou encore l'ancre, dont les utilisations et les études restent encore marginales aujourd'hui, lorsque que l'on parle de mélange diphasique. Si l'on trouve quelques études expérimentales sur ce sujet, on en déplore aucune avec des approches numériques. Ceci est, en grande partie, expliqué par la difficulté de simuler un corps complexe en rotation, sans avoir des coûts de calcul démesurément élevés, coûts déjà élevés dûs à la présence de deux phases. Heureusement pour nous, l'étude de régime laminaire apporte un point positif qui s'est avéré être un élément clef dans cette étude. À savoir le fait que l'on n'utilise pas de contre-pâles. Ceci confère donc au système, la très intéressante propriété d'être complètement symétrique par rotation. C'est, avec cette idée en tête, que nous avons décidé de baser tout notre modèle numérique sur une approche en référentiel tournant. Nous permettant ainsi, de complètement faire abstraction de la rotation de l'agitateur.

Ce premier choix réalisé, il restait à déterminer quelle approche nous souhaitions employer pour modéliser ce système diphasique. En effet, nous avons pu voir que la majorité des approches employées jusqu'alors, étaient de type Euler-Euler, avec le modèle à deux fluides par exemple. Cette approche permet de relativement bien appréhender la dynamique du fluide mais elle souffre du fait que le mouvement des particules est vu de façon globale.

Ceci reste un vrai problème lorsque l'on cherche à déterminer les fractions suspendues. Ce qui reste un élément primordial, lorsque l'on fait des études de mélange solide-liquide. C'est pourquoi, dans ce projet de maitrise, nous avons choisi de modéliser les particules comme des entités individuelles en utilisant une approche de type Euler-Lagrange. Pour ce faire, l'une des méthodes numériques les mieux adaptées est la CFD-DEM non résolue. Et c'est celle-ci qui a été choisie pour finalement définir notre objectif global :

« Développer un modèle Euler-Lagrange, basé sur la CFD-DEM, permettant l'étude du mélange solide-liquide en milieux visqueux sans limitation sur la géométrie de l'agitateur. »

Les différentes étapes de ce projet sont apparues de façon assez naturelles et logiques. La première étape fut de vérifier la possibilité de faire des simulations de dynamiques granulaires en référentiel tournant. En effet, si la mécanique des fluides numérique dans un référentiel en rotation reste quelque chose de commun, ce n'est absolument pas le cas pour la méthode des éléments discrets. La physique de ce type de problèmes étant comprise depuis plusieurs siècles, avec la prise en compte des forces de Coriolis et centrifuge, nous pensions initialement que cette étape ne présenterait pas de grandes difficultés. Il s'est avéré que l'ajout, dans le modèle, de la force de Coriolis, force dépendant de la vitesse des particules, amenait beaucoup de problématiques sur la résolution numérique de l'équation du mouvement de Newton avec le schéma de Verlet en vitesse classiquement utilisé en DEM. En effet, nous avons pu mettre en évidence que le fait d'ajouter une force dépendant de la vitesse, dégradait le schéma de Verlet vitesse à l'ordre 1, et lui faisait perdre son caractère symplectique. Cependant, nous avons vu que cela n'était pas préjudiciable au fait de pouvoir mener des études DEM en référentiel tournant. Car les forces de frottement, très importantes dans ce type d'étude, confèrent une certaine stabilité à la simulation. Ces différents résultats novateurs et inattendus ont permis l'écriture d'un premier article.

Fort de ces vérifications faites pour la DEM, nous avons ensuite pu poursuivre notre développement, en faisant intervenir le fluide avec l'utilisation de la CFD-DEM. Nous avons alors procédé par ordre de difficultés croissantes permettant d'ajuster notre modèle à chaque étape et ainsi obtenir un modèle final en référentiel tournant robuste, prenant en compte la rhéologie des suspensions, la fraction volumique de particules dans le modèle de trainée et utilisant un couplage explicite entre les deux phases. Ce modèle a pu être confronté et validé avec différentes études expérimentales et numériques préalablement menées à l'URPEI. Ceci a permis de conclure quant à la fiabilité de celui-ci pour être utilisé avec des géométries quelconques. Ce qui fut réalisé à la fin de ce projet avec le double ruban hélicoïdal. Il est cependant important de noter que nous avons bâti notre modèle final sur les équations de Navier-Stokes "classiques" alors qu'il est de coutume d'utiliser les équations moyennées

volumiquement (VANS), lorque l'on fait des étude diphasiques. Encore aujourd'hui, la justification d'un tel choix n'est pas claire pour l'auteur. Et plusieurs explications semblent possibles sans pour autant pouvoir être vérifiées. Ce point reste donc encore sujet à débat à ce jour.

Enfin, dans un souci de toujours vouloir accélérer les temps de calculs, nous avons imaginé différentes stratégies de *coarse graining*, méthode qui consiste à agglomérer plusieurs particules en une seule plus grosse pour diminuer le nombre total de particules dans le système. Nous avons pu voir que les différentes approches envisagées amenaient des résultats intéressants mais pas complètement concluants. C'est pourquoi, l'investigation doit être poursuivie. Par exemple, il serait intéressant d'étudier l'impact du diamètre des particules sur cette approche. Dans la présente étude, nous nous sommes limités à la modélisation de particules de $3mm$ avec des particules de $6mm$. Il est fortement probable que cette approximation soit trop importante et que pour des ratios plus faibles cette méthode soit plus fiable. Nous comprenons donc qu'il y a encore de nombreuses idées à exploiter sur cette méthode très intéressante du *coarse graining*.

CHAPITRE 7 CONCLUSION

7.1 Synthèse des travaux

L'ensemble de ce projet a conduit au développement d'un modèle numérique permettant de simuler des opérations de mélange biphasique de type solide-liquide en régime laminaire. Pour cela, une approche CFD-DEM a été choisie. Ce qui permet une résolution très précise du mouvement de chaque particule, tout en conservant des coûts de calculs raisonnables, avec une résolution du fluide à l'échelle mésoscospique. Ce modèle a fait ses preuves pour prédire les différents phénomènes hydrodynamiques pouvant avoir lieu dans une cuve de mélange. De plus, l'approche microscopique utilisée pour modéliser les particules permet de déduire de façon précise la répartition de celle-ci dans le système. Ce qui s'avère une information primordiale en mélange solide-liquide. L'une des principales limitations des modèles numériques existant jusqu'alors, était la modélisation des géométries, à formes complexes en rotation ; comme cela peut être le cas avec les agitateurs utilisés en régime laminaire. Pour cela, une approche en référentiel tournant a été choisie, faisant de ce projet une étude novatrice et particulièrement intéressante de par ses aspects physiques, numériques et ses applications concrètes.

Ce nouveau modèle permet ainsi la modélisation de tout type de géométrie d'agitateurs. C'est sa principale force car il se démarque ainsi des différents modèles déjà existants. Effectivement, plus aucune limitation sur la géométrie modélisable. Le programme est conçu pour fonctionner immédiatement, quelle que soit celle-ci. Si ce rendu fut le principal objectif du projet, les différentes étapes intermédiaires ont permis d'apporter d'autres contributions plus surprenantes et inattendues. Ainsi, l'étude de la DEM, en référentiel tournant, nous a permis de dresser des conclusions plus théoriques sur les schémas d'intégration d'équations différentielles ordinaires. Comme le fait qu'un schéma symplectique voit son ordre dégradé et sa capacité à conserver l'énergie perdue, lorsque l'on ajoute une force dépendant de la vitesse. Enfin, le processus de développement du modèle CFD-DEM a permis de mettre en lumière ce qu'un modèle numérique doit prendre en compte pour retranscrire, au mieux, les différents phénomènes d'interaction solide-liquide. A noter, que les différents outils numériques DEM et CFD-DEM développés au cours de cette étude, sont disponibles en accès libre via la plateforme de gestion de version *GIT*.

— DEM : "https ://github.com/blaisb/LIGGGHTS-PUBLIC.git"

— CFD-DEM : "https ://github.com/blaisb/CFDEMcoupling-Mirror.git"

En définitive, si la plus grande contribution de ce projet reste la mise à disposition en accès libre d'un modèle numérique précis, robuste et adapté à tout type de géométrie pour la modélisation des opérations de mélange solide-liquide, l'auteur espère que tous les résultats intermédiaires, notamment ceux retranscrits dans l'article, pourront aider les prochaines personnes développant des modèles DEM et CFD-DEM.

7.2 Limitations de la solution proposée

Comme dans tout travail de recherche, nous nous devons d'être critique vis à vis de l'étude menée. Si notre modèle est robuste et prêt à être utilisé sans modifications, il faut garder en tête qu'il n'est adapté qu'aux systèmes complètement symétriques. Ainsi, s'il y a la présence de contre-pâles, par exemple, ce modèle ne pourra être exploité. Cependant, il est à noter que pour des fluides visqueux on utilise jamais de contre-pâles afin d'éviter les zones mortes.

Le deuxième point faible, conséquence directe de vouloir utiliser une approche Lagrangienne pour la modélisation des particules, reste le temps de calculs qui est fortement lié aux nombres de particules. Ainsi, aujourd'hui, il semble difficile d'envisager des simulations avec plus de 500 000 particules, limitation due en grande partie par le fait que le domaine utilisé par chaque processeur lors du parallélisme du calcul, reste fixe. En effet, il serait beaucoup plus intéressant d'avoir une allocation dynamique des processeurs, pour que chacun traite un nombre de particules équivalent au cours du temps. L'auteur espère retrouver cette fonctionnalité rapidement disponible sur la plateforme LIGGGHTS.

Ce même problème de temps de calcul, nous limite également à utiliser une approche non-résolue de la CFD-DEM. Ce qui signifie que les cellules fluides sont plus grosses que le diamètre des particules, empêchant, ainsi, notre modèle à capturer tous les phénomènes hydrodynamiques se faisant à l'échelle de la particule.

Un autre point faible dont souffre le modèle, est sa non-capacité à fournir des données stables, sur la pression dans une cuve de mélange. Ceci limite les approches envisageables pour mesurer la fraction suspendue de particules comme la PGT par exemple.

Enfin, comme déjà évoqué plus haut, notre modèle souffre de pas avoir une justification claire et théorique, de la nécessité d'utiliser les équations de Navier-Stokes non-moyennées en référentiel tournant. Ce qui est contraire à tout ce qui à déjà pu être effectué, en matière de modélisation numérique de systèmes diphasiques solide-liquide.

7.3 Travaux futurs

Si l'objectif global de cette maitrise a pu être rempli, le travail sur le sujet, lui, est loin d'être terminé. Tout d'abord, l'auteur espère que son modèle numérique sera utilisé pour établir des résultats préliminaires de mélange solide-liquide avec des géométries complexes dont la littérature manque cruellement actuellement. Ainsi, on pourrait envisager des études avec des *rubans*, des *ancres*, des *turbines maxblend* ou encore avec des géométries plus exotiques tel que le *paravisc*, par exemple. Nous pourrions alors faire des études comparatives entre ces différentes géométries en fonction de différents paramètres physiques tels que la taille des particules, leur densité ou encore le type de fluide utilisé. De plus, l'approche CFD-DEM permets la modélisation de systèmes avec une distribution de tailles de particules non-uniforme. On pourrait ainsi envisager des études avec des particules de différentes tailles, ce qui reste encore aujourd'hui un sujet de recherche actif. En définitive, ce que nous devons retenir, est que ce nouveau modèle numérique permet d'envisager un très grand nombre d'études novatrices et variées sur le sujet du mélange solide-liquide.

A noter qu'il semblerait également intéressant de faire, en parallèle, une campagne expérimentale avec de telle géométrie pour confronter les différents résultats numériques. Nous pouvons regretter le fait de ne pas avoir pu simuler les expériences réalisées par Bertrand et *al* [7], car elles avaient été réalisées avec un trop grand nombre de particules, pour pouvoir espérer avoir des temps de calculs raisonnables.

Ceci nous permet d'introduire un dernier point qui nous semble très intéressant et important. En effet, à travers ce projet, nous avons pu être confrontés au calcul haute performance avec l'utilisation des grappes de serveurs de *Compute Canada*. Mais nous pouvons regretter une trop grande sensibilité de ceux-ci, ainsi qu'un manque de robustesse qui ont parfois ralenti notre travail. Ainsi, ce problème, ajouté à la limitation du nombre de particules que nous pouvons espérer simuler, nous entraine à penser que la stratégie *d'agglomération des particules* rapidement abordée à la fin de ce projet, est une piste qui mérite d'être plus largement explorée. Ce qui permettrait d'envisager des simulations avec des fractions volumiques encore plus importantes, avec des particules de plus petits diamètres et la possibilité d'utiliser des ordinateurs locaux plutôt que de gros serveurs de calculs.

7.4 Mot de la fin

Pour refermer cette étude, l'auteur voudrait souligner le fait que, même si ce projet fut mené seul, nous pouvons tout de même le considérer comme le fruit d'un travail collectif. En effet, la qualité des études expérimentales menées par M.Lassaigne et O.Bertrand, ces dernières

années, ont permis de grandement faciliter le processus de validation du modèle numérique développé. De plus, le fait que la thèse du Professeur Blais sur le développement du premier modèle CFD-DEM robuste, pour des applications aux mélanges solide-liquide, ait été très bien documentée et que les différents outils numériques développés durant ce projet soient en accès libre, via le logiciel libre de gestion de version *GIT*, aura permis des gains de temps considérables sur le développement et le post-traitement des résultats. Par cette remarque, je voudrais mettre en lumière ce qui restera l'un des plus grands enseignements de ce projet de maitrise, pour moi. À savoir, qu'un travail purement numérique, ne peut se suffire à lui même. En effet, il doit veiller à permettre l'accessibilité des différents modèles développés via des plateformes libres de partage tel que *GIT*. Et cela en proposant un manuel d'utilisation clair et fonctionnel ; sans quoi le travail aura été vain et jamais réutilisable.

RÉFÉRENCES

[1] R. Comolet, *Méchanique Expérimentale Des Fluides : Dynamique Des Fluides Reels Turbomachines*. Masson, 1963, vol. 2.

[2] V. A. Atiemo-Obeng, W. R. Penney et P. Armenante, "Solid-liquid mixing," *Handbook of industrial mixing : Science and practice*, p. 543–584, 2004.

[3] B. Blais, M. Lassaigne, C. Goniva, L. Fradette et F. Bertrand, "Development of an unresolved CFD–DEM model for the flow of viscous suspensions and its application to solid–liquid mixing," *Journal of Computational Physics*, vol. 318, p. 201–221, août 2016.

[4] S. M. Derakhshani, D. L. Schott et G. Lodewijks, "Micro–macro properties of quartz sand : Experimental investigation and DEM simulation," *Powder Technology*, vol. 269, p. 127–138, janv. 2015.

[5] M. Lassaigne, "Étude expérimentale du mélange solide-liquide : Caractérisation des suspensions concentrées en milieu visqueux," Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, 2015.

[6] Y.-Y. Tsui et Y.-C. Hu, "Flow Characteristics in Mixers Agitated by Helical Ribbon Blade Impeller," *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 5, n°. 3, p. 416–429, janv. 2011.

[7] O. Bertrand, B. Blais, F. Bertrand et L. Fradette, "Complementary methods for the determination of the just-suspended speed and suspension state in a viscous solid–liquid mixing system," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 136, p. 32–40, août 2018.

[8] R. R. Hemrajani et G. B. Tatterson, *Mechanically Stirred Vessels*. Wiley Online Library, 2004.

[9] B. Blais, "Développement d'un modèle Euler-Lagrange robuste pour la simulation des écoulements solide-liquide dans les opérations de mélange," p. 345.

[10] M. Lassaigne, B. Blais, L. Fradette et F. Bertrand, "Experimental investigation of the mixing of viscous liquids and non-dilute concentrations of particles in a stirred tank," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 108, p. 55–68, avr. 2016.

[11] C. R. Wildemuth et M. C. Williams, "Viscosity of suspensions modeled with a shear-dependent maximum packing fraction," *Rheol Acta*, vol. 23, n°. 6, p. 627–635, nov. 1984.

[12] H. R. Norouzi, R. Zarghami, R. Sotudeh-Gharebagh et N. Mostoufi, *Coupled CFD-DEM Modeling : Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows*. John Wiley & Sons, 2016.

[13] E. L. Paul, V. A. Atiemo-Obeng et S. M. Kresta, *Handbook of Industrial Mixing : Science and Practice*. John Wiley & Sons, févr. 2004.

[14] W. D. Curtis, J. D. Logan et W. A. Parker, "Dimensional analysis and the pi theorem," *Linear Algebra and its Applications*, vol. 47, p. 117–126, 1982.

[15] R. B. Bird, W. E. Stewart et E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, déc. 2006.

[16] A. Beuf et F. Raynal, "Comment mélanger en écoulement laminaire ?" *Bulletin de l'Union des Physiciens*, vol. 919, p. 1069–1079, 2009.

[17] M. Rice, J. Hall, G. Papadakis et M. Yianneskis, "Investigation of laminar flow in a stirred vessel at low Reynolds numbers," *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n°. 9, p. 2762–2770, mai 2006.

[18] R. Jafari, P. A. Tanguy et J. Chaouki, "Characterization of minimum impeller speed for suspension of solids in liquid at high solid concentration, using gamma-ray densitometry," *International Journal of Chemical Engineering*, vol. 2012, 2012.

[19] A. Bakker et L. E. Gates, "Properly choose mechanical agitators for viscous liquids," *Chem. Eng. Prog.*, vol. 91, n°. 12, p. 25–34, déc. 1995, wOS :A1995TM41200020.

[20] A. W. Nienow et D. Miles, "Impeller Power Numbers in Closed Vessels," *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, vol. 10, n°. 1, p. 41–43, janv. 1971.

[21] G. Özcan-Taşkin et H. Wei, "The effect of impeller-to-tank diameter ratio on draw down of solids," *Chemical Engineering Science*, vol. 58, n°. 10, p. 2011–2022, 2003.

[22] I. Ayranci, M. B. Machado, A. M. Madej, J. J. Derksen, D. S. Nobes et S. M. Kresta, "Effect of geometry on the mechanisms for off-bottom solids suspension in a stirred tank," *Chemical Engineering Science*, vol. 79, p. 163–176, 2012.

[23] P. Armenante, E. Nagamine et J. Susanto, "Determination of correlations to predict the minimum agitation speed for complete solid suspension in agitated vessels," *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 76, n°. 3, p. 413–419, 1998, agitated vessels ;Zwietering equation ;.

[24] G. Montante, K. Lee, A. Brucato et M. Yianneskis, "Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels," *Chemical Engineering Science*, vol. 56, n°. 12, p. 3751–3770, 2001, stirred vessels ;.

[25] G. Montante, A. Brucato, K. C. Lee et M. Yianneskis, “An experimental study of double-to-single-loop transition in stirred vessels,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 77, n°. 4, p. 649–659, août 1999.

[26] S. M. Kresta et P. E. Wood, “The flow field produced by a pitched blade turbine : Characterization of the turbulence and estimation of the dissipation rate,” *Chemical Engineering Science*, vol. 48, n°. 10, p. 1761–1774, 1993.

[27] S. M. Kresta, K. J. Bittorf et D. J. Wilson, “Internal annular wall jets : Radial flow in a stirred tank,” *AIChE journal*, vol. 47, n°. 11, p. 2390–2401, 2001.

[28] R. Conti, S. Sicardi et V. Specchia, “Effect of the stirrer clearance on particle suspension in agitated vessels,” *The Chemical Engineering Journal*, vol. 22, n°. 3, p. 247–249, 1981.

[29] R. Jafari, P. A. Tanguy et J. Chaouki, “Experimental investigation on solid dispersion, power consumption and scale-up in moderate to dense solid–liquid suspensions,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 90, n°. 2, p. 201–212, 2012.

[30] B. Blais et F. Bertrand, “CFD-DEM investigation of viscous solid–liquid mixing : Impact of particle properties and mixer characteristics,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 118, p. 270–285, févr. 2017.

[31] J. Bourne et R. Sharma, “Homogeneous particle suspension in propeller-agitated flat bottomed tanks,” *The Chemical Engineering Journal*, vol. 8, n°. 3, p. 243–250, 1974.

[32] I. Houcine, E. Plasari et R. David, “Effects of the Stirred Tank’s Design on Power Consumption and Mixing Time in Liquid Phase,” *Chemical Engineering & Technology*, vol. 23, n°. 7, p. 605–613, 2000.

[33] D.Guerci, R.Conti et S.Sicardi, dans *International Colloquium on Mechanical Agitation*, Toulouse, 1986.

[34] Alessandro Tamburini, Leonardo Gentile, Andrea Cipollina, Giorgio Micale et Alberto Brucato, “Experimental investigation of dilute solid-liquid suspension in an unbaffled stirred vessels by a novel pulsed laser based image analysis technique,” *Chemical Engineering Transactions*, vol. 17, p. 531–536, mai 2009.

[35] J. Y. Oldshue, “Mixing of solid-liquid suspensions,” *Journal of pharmaceutical sciences*, vol. 50, n°. 6, p. 523–530, 1961.

[36] A. Nienow et D. Miles, “The effect of impeller/tank, configurations on fluid-particle mass transfer,” *The Chemical Engineering Journal*, vol. 15, n°. 1, p. 13–24, 1978, an International Journal of Research and Development.

[37] S. Nagata, *Mixing : Principles and Applications*. Halsted Press, 1975.

[38] T. N. Zwietering, “Suspending of solid particles in liquid by agitators,” *Chemical Engineering Science*, vol. 8, n°. 3, p. 244–253, juin 1958.

[39] I. Ayranci et S. M. Kresta, “Critical analysis of Zwietering correlation for solids suspension in stirred tanks,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 92, n°. 3, p. 413–422, mars 2014.

[40] G. Micale, F. Grisafi et A. Brucato, “Assessment of Particle Suspension Conditions in Stirred Vessels by Means of Pressure Gauge Technique,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 80, n°. 8, p. 893–902, 2002, fluid Mixing VII.

[41] S. Ibrahim et A. Nienow, “Comparing Impeller Performance for Solid-Suspension in the Transitional Flow Regime with Newtonian Fluids,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 77, n°. 8, p. 721–727, 1999, fluid Flow.

[42] A. Nienow, “Suspension of solid particles in turbine agitated baffled vessels,” *Chemical Engineering Science*, vol. 23, n°. 12, p. 1453–1459, 1968.

[43] G. Baldi, R. Conti et E. Alaria, “Complete suspension of particles in mechanically agitated vessels,” *Chemical Engineering Science*, vol. 33, n°. 1, p. 21–25, 1978.

[44] I. Ayranci, T. Ng, A. W. Etchells et S. M. Kresta, “Prediction of just suspended speed for mixed slurries at high solids loadings,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 91, n°. 2, p. 227–233, 2013.

[45] A. Tamburini, A. Brucato, A. Busciglio, A. Cipollina, F. Grisafi, G. Micale, F. Scargiali et G. Vella, “Solid-Liquid Suspensions in Top-Covered Unbaffled Vessels : Influence of Particle Size, Liquid Viscosity, Impeller Size, and Clearance,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 53, n°. 23, p. 9587–9599, juin 2014, wOS :000337337000008.

[46] R. Grenville, J. Giacomelli et D. Brown, “Suspension of solid particles in vessels agitated by Rushton turbine imperllers,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 109, p. 730–733, 2016.

[47] W. D. Einenkel et A. Mersmann, “The agitator speed for particle suspension,” *Verfahrenstehnik*, vol. 11, p. 90, 1977.

[48] J. Y. Oldshue et R. N. Sharma, “The Effect of Off-Bottom Distance of an Impellar for the" Just Suspended Speed" N~ j~ s,” dans *AIChE Symposium Series*, vol. 88. American Institute of Chemical Engineers, 1992, p. 72–72.

[49] V. B. Rewatkar, K. R. Rao et J. B. Joshi, “Critical impeller speed for solid suspension in mechanically agitated three-phase reactors. 1. Experimental part,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 30, n°. 8, p. 1770–1784, 1991.

[50] R. Angst et M. Kraume, "Experimental investigations of stirred solid/liquid systems in three different scales : Particle distribution and power consumption," *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n°. 9, p. 2864–2870, 2006, fluid Mixing VIII International Conference.

[51] A. R. Rammohan, M. P. Duduković et V. V. Ranade, "Eulerian flow field estimation from particle trajectories : Numerical experiments for stirred tank type flows," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 42, n°. 12, p. 2589–2601, 2003.

[52] J. C. Godfrey et Z. M. Zhu, "Measurement of particle-liquid profiles in agitated tanks," dans *AIChE Symposium Series*, vol. 90. New York, NY : American Institute of Chemical Engineers, 1971-c2002., 1994, p. 181–185.

[53] N. Dohi, Y. Matsuda, N. Itano, K. Minekawa, T. Takahashi et Y. Kawase, "Suspension of solid particles in multi-impeller three-phase stirred tank reactors," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 79, n°. 1, p. 107–111, 2001.

[54] D. A. Brown, P. N. Jones, J. C. Middleton, G. Papadopoulos et E. B. Arik, "Experimental methods," *Handbook of industrial mixing : science and practice*, p. 145–256, 2004.

[55] P. Mishra et F. Ein-Mozaffari, "Critical review of different aspects of liquid-solid mixing operations," *Reviews in Chemical Engineering*, vol. 0, n°. 0, 2019.

[56] A. Tamburini, A. Cipollina, G. Micale, A. Brucato et M. Ciofalo, "CFD simulations of dense solid–liquid suspensions in baffled stirred tanks : Prediction of the minimum impeller speed for complete suspension," *Chemical engineering journal*, vol. 193, p. 234–255, 2012.

[57] G. R. Kasat et A. B. Pandit, "Review on mixing characteristics in solid-liquid and solid-liquid-gas reactor vessels," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 83, n°. 4, p. 618–643, 2005.

[58] A. Brucato, "Determination of the amount of unsuspended solid particles inside stirred tanks by means of pressure measurements," dans *Recents Progres En Genie Des Procedes, Proc. 9th European Mixing Conf., Paris, France, 1997*, vol. 11, 1997, p. 3–10.

[59] A. Tamburini, A. Cipollina, G. Micale, A. Brucato et M. Ciofalo, "CFD simulations of dense solid–liquid suspensions in baffled stirred tanks : Prediction of suspension curves," *Chemical Engineering Journal*, vol. 178, p. 324–341, 2011.

[60] B. Blais, O. Bertrand, L. Fradette et F. Bertrand, "CFD-DEM simulations of early turbulent solid–liquid mixing : Prediction of suspension curve and just-suspended speed," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 123, p. 388–406, 2017.

[61] G. Couarraze et J.-L. Grossiord, *Initiation à la rhéologie*. Tec & Doc, 2000.

[62] G. K. Batchelor, "The stress system in a suspension of force-free particles," *Journal of fluid mechanics*, vol. 41, n°. 3, p. 545–570, 1970.

[63] Mueller S., Llewellin E. W. et Mader H. M., "The rheology of suspensions of solid particles," *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 466, n°. 2116, p. 1201–1228, avr. 2010.

[64] D. G. Thomas, "Transport characteristics of suspension : VIII. A note on the viscosity of Newtonian suspensions of uniform spherical particles," *Journal of Colloid Science*, vol. 20, n°. 3, p. 267–277, 1965.

[65] I. R. Rutgers, "Relative viscosity of suspensions of rigid spheres in Newtonian liquids," *Rheol Acta*, vol. 2, n°. 3, p. 202–210, sept. 1962.

[66] G. K. Batchelor et J. T. Green, "The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c 2," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 56, n°. 3, p. 401–427, 1972.

[67] I. M. Krieger et T. J. Dougherty, "A mechanism for non-Newtonian flow in suspensions of rigid spheres," *Transactions of the Society of Rheology*, vol. 3, n°. 1, p. 137–152, 1959.

[68] H. A. Barnes, J. F. Hutton et K. Walters, *An Introduction to Rheology*. Elsevier, juin 1989.

[69] J. H. Perry, *Chemical Engineers' Handbook*. ACS Publications, 1950.

[70] O. Cadot, "MST33-Dynamique linéaire des fluides incompressibles," p. 34.

[71] F. F. Abraham, "Functional dependence of drag coefficient of a sphere on Reynolds number," *The Physics of Fluids*, vol. 13, n°. 8, p. 2194–2195, 1970.

[72] D. J. Tritton, *Physical Fluid Dynamics*. Springer Science & Business Media, 2012.

[73] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, Y. Tsuji, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld et Y. Tsuji, *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, août 2011.

[74] M. W. Reeks et S. McKee, "The dispersive effects of Basset history forces on particle motion in a turbulent flow," *The Physics of fluids*, vol. 27, n°. 7, p. 1573–1582, 1984.

[75] P. G. T. Saffman, "The lift on a small sphere in a slow shear flow," *Journal of fluid mechanics*, vol. 22, n°. 2, p. 385–400, 1965.

[76] S. I. Rubinow et J. B. Keller, "The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 11, n°. 3, p. 447–459, 1961.

[77] S. M. Peker et S. S. Helvaci, *Solid-Liquid Two Phase Flow*. Elsevier, 2011.

[78] P. Guiraud, J. Costes et J. Bertrand, "Local measurements of fluid and particle velocities in a stirred suspension," *Chemical Engineering Journal*, vol. 68, n°. 2, p. 75–86, 1997.

[79] A. D. Maude et R. L. Whitmore, "A generalized theory of sedimentation," *British journal of applied physics*, vol. 9, n°. 12, p. 477, 1958.

[80] B. Oesterlé, "Ecoulements multiphasiques," *Hermes-Lavoisier, Paris*, 2006.

[81] S. Ergun et A. A. Orning, "Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds," *Industrial & Engineering Chemistry*, vol. 41, n°. 6, p. 1179–1184, 1949.

[82] C. Y. Wen et Y. H. Yu, "A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity," *AIChE Journal*, vol. 12, n°. 3, p. 610–612, 1966.

[83] R. Di Felice, "The voidage function for fluid-particle interaction systems," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 20, n°. 1, p. 153–159, 1994.

[84] L. W. Rong, K. J. Dong et A. B. Yu, "Lattice-Boltzmann simulation of fluid flow through packed beds of uniform spheres : Effect of porosity," *Chemical Engineering Science*, vol. 99, p. 44–58, 2013.

[85] M. Ljungqvist et A. Rasmuson, "Numerical simulation of the two-phase flow in an axially stirred vessel," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 79, n°. 5, p. 533–546, 2001.

[86] G. B. Tatterson, *Fluid Mixing and Gas Dispersion in Agitated Tanks*. McGraw-Hill New York, 1991.

[87] A. Tamburini, A. Cipollina, G. Micale, A. Brucato et M. Ciofalo, "Influence of drag and turbulence modelling on CFD predictions of solid liquid suspensions in stirred vessels," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 92, n°. 6, p. 1045–1063, 2014.

[88] D. Gu, Z. Liu, F. Qiu, J. Li, C. Tao et Y. Wang, "Design of impeller blades for efficient homogeneity of solid-liquid suspension in a stirred tank reactor," *Advanced Powder Technology*, vol. 28, n°. 10, p. 2514–2523, 2017.

[89] A. R. Khopkar, G. R. Kasat, A. B. Pandit et V. V. Ranade, "Computational Fluid Dynamics Simulation of the Solid Suspension in a Stirred Slurry Reactor," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 45, n°. 12, p. 4416–4428, juin 2006.

[90] D. F. Fletcher et G. J. Brown, "Numerical simulation of solid suspension via mechanical agitation : Effect of the modelling approach, turbulence model and hindered settling drag law," *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, vol. 23, n°. 2, p. 173–187, 2009.

[91] S. Wang, X. Jiang, R. Wang, X. Wang, S. Yang, J. Zhao et Y. Liu, "Numerical simulation of flow behavior of particles in a liquid-solid stirred vessel with baffles," *Advanced Powder Technology*, vol. 28, nº. 6, p. 1611–1624, 2017.

[92] J. J. Derksen, "Numerical simulation of solids suspension in a stirred tank," *AIChE Journal*, vol. 49, nº. 11, p. 2700–2714, 2003.

[93] Y. Yoshida, T. Katsumoto, S. Taniguchi, A. Shimosaka, Y. Shirakawa et J. Hidaka, "Prediction of viscosity of slurry suspended fine particles using coupled DEM-DNS simulation," *Chemical Engineering*, vol. 32, 2013.

[94] Alessandro Tamburini, Andrea Cipollina et Giorgio Micale, "Cfd simulation of solid liquid suspensions in baffled stirred vessels below complete suspension speed," *Chemical Engineering Transactions*, vol. 24, p. 1435–1440, avr. 2011.

[95] A. Fluent, "Ansys fluent theory guide," *ANSYS Inc., USA*, vol. 15317, p. 724–746, 2011.

[96] C. ANSYS, "10.0 Users Manual," *ANSYS Inc., July*, 2005.

[97] G. Micale, F. Grisafi, L. Rizzuti et A. Brucato, "CFD simulation of particle suspension height in stirred vessels," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 82, nº. 9, p. 1204–1213, 2004.

[98] A. Tamburini, A. Brucato, A. Cipollina, G. Micale et M. Ciofalo, "CFD predictions of sufficient suspension conditions in solid-liquid agitated tanks," *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, vol. 13, nº. 6, p. 427–443, 2012.

[99] A. Tamburini, A. C. G. Micale et I. Palermo, "CFD Simulation of Solid Liquid Suspensions in Baffled Stirred Vessels Below Complete Suspension Speed," 2011.

[100] A. Tamburini, A. Cipollina, G. Micale, A. Brucato et M. Ciofalo, "CFD simulations of dense solid–liquid suspensions in baffled stirred tanks : Prediction of solid particle distribution," *Chemical engineering journal*, vol. 223, p. 875–890, 2013.

[101] L. Fradette, P. A. Tanguy, F. Bertrand, F. Thibault, J.-B. Ritz et E. Giraud, "CFD phenomenological model of solid–liquid mixing in stirred vessels," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 31, nº. 4, p. 334 – 345, 2007.

[102] D. C. Russ et R. E. Berson, "Computationally determined just suspended speed using multiphase mean age theory," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 114, p. 13–17, 2016.

[103] L. Xie et Z.-H. Luo, "Modeling and simulation of the influences of particle-particle interactions on dense solid–liquid suspensions in stirred vessels," *Chemical Engineering Science*, vol. 176, p. 439–453, 2018.

[104] S. Hosseini, D. Patel, F. Ein-Mozaffari et M. Mehrvar, "Study of solid- liquid mixing in agitated tanks through computational fluid dynamics modeling," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, n°. 9, p. 4426–4435, 2010.

[105] F. Wang, Z.-S. Mao et X.-Q. Shen, "Numerical study of solid-liquid two-phase flow in stirred tanks with Rushton impeller (ii) Prediction of critical impeller speed," *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 12, n°. 5, p. 610–614, 2004.

[106] S. Decker et M. Sommerfeld, "Calculation of particle suspension in agitated vessels with the Euler-Lagrange approach," dans *Institution of Chemical Engineers Symposium Series*, vol. 140. HEMSPHERE PUBLISHING CORPORATION, 1996, p. 71–82.

[107] R. Misumi, T. Sasaki, H. Kato, K. Nishi et M. Kaminoyama, "Relation between particle rising behavior and liquid flow around the bottom of a stirred vessel," dans *14th European Conference on Mixing, Session V*, 2012, p. 299–304.

[108] S. Ting, H. U. Yinyu, W. Wentan, J. I. N. Yong et Y. CHENG, "Simulation of solid suspension in a stirred tank using CFD-DEM coupled approach," *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 21, n°. 10, p. 1069–1081, 2013.

[109] B. Blais, M. Lassaigne, C. Goniva, L. Fradette et F. Bertrand, "A semi-implicit immersed boundary method and its application to viscous mixing," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 85, p. 136–146, févr. 2016.

[110] J. Doucet, F. Bertrand et J. Chaouki, "A measure of mixing from Lagrangian tracking and its application to granular and fluid flow systems," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 86, n°. 12, p. 1313 – 1321, 2008, international Symposium on Mixing in Industrial Processes (ISMIP-VI).

[111] J. H. Ferziger et M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Science & Business Media, déc. 2012.

[112] H. K. Versteeg et W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics : The Finite Volume Method*. Pearson education, 2007.

[113] B. P. Leonard, "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation," *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 19, n°. 1, p. 59–98, 1979.

[114] S. V. Patankar et D. B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows," dans *Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion*. Elsevier, 1983, p. 54–73.

[115] R. I. Issa, "Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting," *Journal of computational physics*, vol. 62, n°. 1, p. 40–65, 1986.

[116] B. Hoomans, J. Kuipers, W. Briels et W. van Swaaij, “Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed : A hard-sphere approach,” *Chemical Engineering Science*, vol. 51, n°. 1, p. 99–118, 1996.

[117] P. A. Cundall et O. D. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *geotechnique*, vol. 29, n°. 1, p. 47–65, 1979.

[118] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang et A. B. Yu, “Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments,” *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n°. 13, p. 3378–3396, juill. 2007.

[119] B. Blais, D. Vidal, F. Bertrand, G. S. Patience et J. Chaouki, “Experimental Methods in Chemical Engineering : Discrete Element Method—DEM,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 97, n°. 7, p. 1964–1973, 2019.

[120] G. Lu, J. R. Third et C. R. Müller, “Discrete element models for non-spherical particle systems : From theoretical developments to applications,” *Chemical Engineering Science*, vol. 127, p. 425–465, 2015.

[121] H. Tao, B. Jin, W. Zhong, X. Wang, B. Ren, Y. Zhang et R. Xiao, “Discrete element method modeling of non-spherical granular flow in rectangular hopper,” *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, vol. 49, n°. 2, p. 151–158, 2010.

[122] K. M. Aoki et T. Akiyama, “Simulation studies of pressure and density wave propagations in vertically vibrated beds of granules,” *Physical Review E*, vol. 52, n°. 3, p. 3288, 1995.

[123] H. Kruggel-Emden, E. Simsek, S. Rickelt, S. Wirtz et V. Scherer, “Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method,” *Powder Technology*, vol. 171, n°. 3, p. 157 – 173, 2007.

[124] A. Di Renzo et F. P. Di Maio, “Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes,” *Chemical engineering science*, vol. 59, n°. 3, p. 525–541, 2004.

[125] O. R. Walton et R. L. Braun, “Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks,” *Journal of rheology*, vol. 30, n°. 5, p. 949–980, 1986.

[126] C. Thornton et Z. Ning, “A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive, elastic-plastic spheres,” *Powder technology*, vol. 99, n°. 2, p. 154–162, 1998.

[127] Y. Tsuji, T. Tanaka et T. Ishida, “Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe,” *Powder Technology*, vol. 71, n°. 3, p. 239–250, sept. 1992.

[128] K. L. JOHNSON, “Normal contact of elastic solids : Hertz theory,” *Contact Mechanics*, p. 84–106, 1989.

[129] G. Kuwabara et K. Kono, “Restitution coefficient in a collision between two spheres,” *Japanese journal of applied physics*, vol. 26, n°. 8R, p. 1230, 1987.

[130] P. Langston, U. Tüzün et D. Heyes, “Continuous potential discrete particle simulations of stress and velocity fields in hoppers : Transition from fluid to granular flow,” *Chemical Engineering Science*, vol. 49, n°. 8, p. 1259 – 1275, 1994.

[131] H. Deresiewicz et R. D. Mindlin, *Elastic Spheres in Contact under Varying Oblique Forces*, 1952.

[132] H. Kruggel-Emden, S. Wirtz et V. Scherer, “A study on tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior,” *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 6, p. 1523–1541, 2008.

[133] X. Chen, W. Zhong, X. Zhou, B. Jin et B. Sun, “CFD–DEM simulation of particle transport and deposition in pulmonary airway,” *Powder Technology*, vol. 228, p. 309–318, 2012.

[134] A. Hobbs, “Simulation of an aggregate dryer using coupled CFD and DEM methods,” *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, vol. 23, n°. 2, p. 199–207, 2009.

[135] B. Ren, W. Zhong, Y. Chen, X. Chen, B. Jin, Z. Yuan et Y. Lu, “CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles,” *Particuology*, vol. 10, n°. 5, p. 562–572, 2012.

[136] A. Fortin, *Analyse Numérique Pour Ingénieurs*. Presses inter Polytechnique, 2011.

[137] D. I. Okunbor, “Energy conserving, Liouville, and symplectic integrators,” *Journal of Computational Physics*, vol. 120, n°. 2, p. 375–378, 1995.

[138] K. Feng et M. Qin, *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems*. Springer, 2010.

[139] L. Verlet, “Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules,” *Phys. Rev.*, vol. 159, n°. 1, p. 98–103, juill. 1967.

[140] J. Kozicki et F. V. Donzé, “YADE-OPEN DEM : An open-source software using a discrete element method to simulate granular material,” *Engineering Computations*, oct. 2009.

[141] A. R. Thornton, D. Krijgsman, R. H. A. Fransen, S. G. Briones, D. R. Tunuguntla, A. te Voortwis, S. Luding, O. Bokhove et T. Weinhart, “Mercury-DPM : Fast particle simulations in complex geometries,” *EnginSoft newsletter simulation based engineering & sciences*, vol. 10, n°. 1, p. 48–53, 2013.

[142] "LIGGGHTS. (2011). LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations. Retrieved from http ://www.liggghts.com."

[143] D. A. Drew, "Mathematical modeling of two-phase flow," *Annual review of fluid mechanics*, vol. 15, n°. 1, p. 261–291, 1983.

[144] P. S. Gough, "On the closure and character of the balance equations for heterogeneous two-phase flow," dans *Dynamics and Modelling of Reactive Systems*. Elsevier, 1980, p. 375–408.

[145] F. I. Frankl, "On the theory of motion of suspended sediments," dans *Dokl. Akad. Nauk. SSSr*, 1953, p. 92–247.

[146] A. Prosperetti et G. Tryggvason, *Computational Methods for Multiphase Flow*. Cambridge university press, 2009.

[147] S. M. Peker et S. S. Helvaci, *Solid-Liquid Two Phase Flow*. Elsevier, 2011.

[148] Z. Y. Zhou, S. B. Kuang, K. W. Chu et A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particle–fluid flow : Model formulations and their applicability," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 661, p. 482–510, 2010.

[149] D. Gidaspow, *Multiphase Flow and Fluidization : Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Academic press, 1994.

[150] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger et S. Pirker, "Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD–DEM," *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, vol. 12, n°. 2-3, p. 140–152, 2012.

[151] J. X. Bouillard, R. W. Lyczkowski et D. Gidaspow, "Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle," *AIChE Journal*, vol. 35, n°. 6, p. 908–922, 1989.

[152] K. D. Kafui, C. Thornton et M. J. Adams, "Discrete particle-continuum fluid modelling of gas–solid fluidised beds," *Chemical Engineering Science*, vol. 57, n°. 13, p. 2395–2410, 2002.

[153] S. Deb et D. K. Tafti, "A novel two-grid formulation for fluid–particle systems using the discrete element method," *Powder technology*, vol. 246, p. 601–616, 2013.

[154] J. S. Marshall et K. Sala, "Comparison of methods for computing the concentration field of a particulate flow," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 56, p. 4–14, 2013.

[155] A. Bakker, R. D. LaRoche, M.-H. Wang et R. V. Calabrese, "Sliding mesh simulation of laminar flow in stirred reactors," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 75, n°. 1, p. 42–44, 1997.

[156] C. Y. Perng et J. Y. Murthy, "Sliding-mesh technique for simulation of flow in mixing tanks," *American Society of Mechanical Engineers (Paper)*, p. 1–9, 1993.

[157] R. Mittal et L. Iaccarino, "Immersed Boundary Methods, Annual Review of Fluid Mechanics," 2005.

[158] C. S. Peskin, "The immersed boundary method," *Acta numerica*, vol. 11, p. 479–517, 2002.

[159] E. A. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi et J. Mohd-Yusof, "Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations," *Journal of computational physics*, vol. 161, n°. 1, p. 35–60, 2000.

[160] J. Y. Luo et A. D. Gosman, "Prediction of impeller-induced flow in mixing vessels using multiple frames of reference." INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS SYMPOSIUM SERIES, 1994.

[161] L. M. Oshinowo et A. Bakker, "CFD modeling of solids suspensions in stirred tanks," dans *Symposium on Computational Modelling of Metals, Minerals and Materials, TMS Annual Meeting. Seattle, WA*, 2002, p. 234–242.

[162] G. R. Kasat, A. R. Khopkar, V. V. Ranade et A. B. Pandit, "CFD simulation of liquid-phase mixing in solid–liquid stirred reactor," *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 15, p. 3877–3885, 2008.

[163] F. Ricard, C. Brechtelsbauer, X. Y. Xu et C. J. Lawrence, "Monitoring of multiphase pharmaceutical processes using electrical resistance tomography," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 83, n°. 7, p. 794–805, 2005.

[164] S. S. Shirsath, J. T. Padding, H. J. H. Clercx et J. A. M. Kuipers, "Dynamics of Granular Flows Down Rotating Semi-cylindrical Chutes," *Procedia Engineering*, vol. 102, p. 731–740, janv. 2015.

[165] S. S. Shirsath, J. T. Padding, J. a. M. Kuipers, T. W. J. Peeters et H. J. H. Clercx, "Numerical Investigation of Monodisperse Granular Flow Through an Inclined Rotating Chute," *AIChE Journal*, vol. 60, n°. 10, p. 3424–3441, oct. 2014.

[166] S. S. Shirsath, J. T. Padding, J. A. M. H. Kuipers et H. J. H. Clercx, "Simulation study of the effect of wall roughness on the dynamics of granular flows in rotating semicylindrical chutes," *AIChE Journal*, vol. 61, n°. 7, p. 2117–2135, juill. 2015.

[167] E. Alizadeh, F. Bertrand et J. Chaouki, "Comparison of DEM results and Lagrangian experimental data for the flow and mixing of granules in a rotating drum," *AIChE Journal*, vol. 60, n°. 1, p. 60–75, 2014.

[168] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows : The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Elsevier, 2007.

[169] X. Deng, J. V. Scicolone et R. N. Davé, "Discrete element method simulation of cohesive particles mixing under magnetically assisted impaction," *Powder Technology*, vol. 243, p. 96 – 109, 2013.

[170] R. Soda, K. Takagi et K. Ozaki, "Numerical simulation of magnetic-aligned compaction with pulsed high magnetic field," *Scripta Materialia*, vol. 120, p. 41 – 44, 2016.

[171] J. Lindner, K. Menzel et H. Nirschl, "Simulation of magnetic suspensions for HGMS using CFD, FEM and DEM modeling," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 54, p. 111–121, 2013.

[172] W. Benenson, J. W. Harris, H. Stöcker et H. Lutz, *Handbook of Physics*. Springer Science & Business Media, 2006.

[173] Q. Spreiter et M. Walter, "Classical Molecular Dynamics Simulation with the Velocity Verlet Algorithm at Strong External Magnetic Fields," *Journal of Computational Physics*, vol. 152, n°. 1, p. 102–119, juin 1999.

[174] C. Hellström et S. Mikkola, "Explicit algorithmic regularization in the few-body problem for velocity-dependent perturbations," *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 106, n°. 2, p. 143–156, févr. 2010.

[175] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang et A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particulate systems : A review of major applications and findings," *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 23, p. 5728–5770, déc. 2008.

[176] R. D. MINDLIN, "Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces," *J. Applied Mech.*, vol. 20, p. 327–344, 1953.

[177] S. Shirsath, J. Padding, N. Deen, H. Clercx et J. Kuipers, "Experimental study of monodisperse granular flow through an inclined rotating chute," *Powder Technology*, vol. 246, p. 235–246, sept. 2013.

[178] K. Feng et M. Qin, *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems*. Springer, 2010.

[179] H. Goldstein, *Classical Mechanics*. Pearson Education, sept. 2002.

[180] S. Pirker, D. Kahrimanovic et C. Goniva, "Improving the applicability of discrete phase simulations by smoothening their exchange fields," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 35, n°. 5, p. 2479 – 2488, 2011.

[181] D. J. Lamberto, M. M. Alvarez et F. J. Muzzio, "Experimental and computational investigation of the laminar flow structure in a stirred tank," *Chemical Engineering Science*, vol. 54, n°. 7, p. 919–942, 1999.

[182] F. Cabaret, L. Fradette et P. A. Tanguy, “New turbine impellers for viscous mixing,” *Chemical Engineering & Technology : Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*, vol. 31, n°. 12, p. 1806–1815, 2008.

[183] E. Brito-De La Fuente, L. Choplin et P. A. Tanguy, “Mixing With Helical Ribbon Impellers : Effect of Highly Shear Thinning Behaviour and Impeller Geometry,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 75, n°. 1, p. 45–52, janv. 1997.

[184] G. Delaplace, J. C. Leuliet et V. Relandeau, “Circulation and mixing times for helical ribbon impellers. Review and Experiments,” *Experiments in Fluids*, vol. 28, n°. 2, p. 170–182, févr. 2000.

ANNEXE A VÉRIFICATION DE L'IMPLÉMENTATION DES DIFFÉRENTS SOLVEURS UTILISÉS

Tout au long de cette étude, plusieurs solveurs ont été développés/adaptés à partir de solveurs déjà existants, pour répondre aux différentes problématiques rencontrées. L'idée était, dans un premier temps, de vérifier l'implémentation et seulement l'implémentation de ces nouveaux solveurs. C'est pourquoi, nous avons mis en place un cas test simple, basé sur un phénomène physique dont la solution analytique est bien connue (Eq.A.1 & A.2) : le *Couette Cylindrique* [15]. La Figure A.1 illustre le cas test employé.

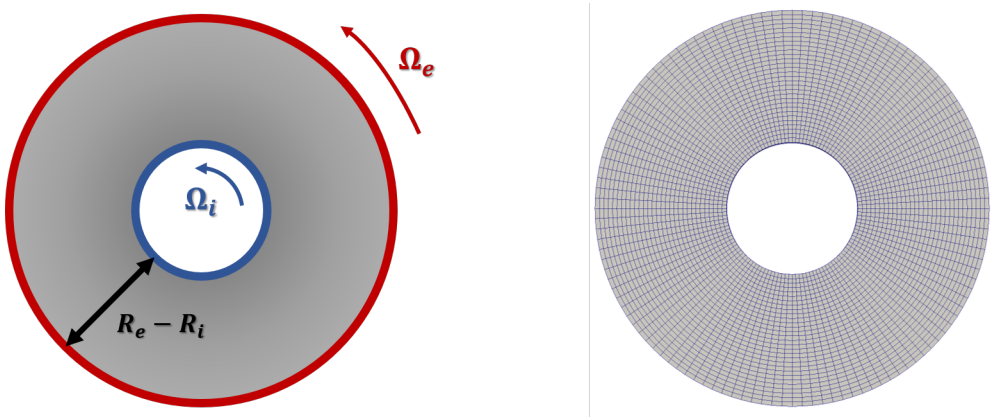

Figure A.1 Illustration du cas test utilisé ainsi que du maillage employé identiquement pour tous les solveurs testés : $n_x = n_y = 30 \quad \& \quad n_z = 1$

$$u_\theta(r) = A\frac{r}{2} + \frac{B}{r} \tag{A.1}$$

$$P(r,z) = \rho_f \left(A^2\frac{r^2}{8} + ABln(r) - \frac{B^2}{r^3} \right) + P_0 - \rho_f g z \tag{A.2}$$

$$Avec \quad A = 2\frac{\Omega_e R_e^2 - \Omega_i R_i^2}{R_e^2 - R_i^2} \quad \& \quad B = \frac{(\Omega_i - \Omega_e) R_i^2 R_e^2}{R_e^2 - R_i^2}$$

Les solveurs existant initialement dans OpenFoam et la librairie *CFDEM* sont :

— SimpleFoam : Basé sur l'algorithme *SIMPLE*

— PisoFoam : Basé sur l'algorithme *PISO*

— SRFSimpleFoam : Basé sur l'algorithme *SIMPLE* adapté pour faire des études en référentiel tournant *(ie)* prise en compte des forces de Coriolis et centrifuge.

— cfdemSolverPiso-Implicit : Basé sur l'algorithme *PISO* avec un couplage implicit pour l'intéraction fluide-solide et utilisant les équations de Navier-Stokes "moyennées"

Et les solveurs développés au cours de cette étude sont :

— SRFPisoFoam : Basé sur l'algorithme *PISO* adapté pour faire des études en référentiel tournant *(ie)* prise en compte des forces de Coriolis et centrifuge.

— cfdemSolverPiso-Explicit : Basé sur l'algorithme *PISO* avec un couplage explicit pour l'intéraction fluide-solide et utilisant les équations de Navier-Stokes "moyennées".

— cfdemSolverPisoSRF-Implicit : Basé sur l'algorithme *PISO* avec un couplage implicit pour l'intéraction fluide-solide, adaptée pour faire des études en référentiel tournant et utilisant les équations de Navier-Stokes "moyennées".

— cfdemSolverPisoSRF-Explicit : Basé sur l'algorithme *PISO* avec un couplage explicit pour l'intéraction fluide-solide, adaptée pour faire des études en référentiel tournant et utilisant les équations de Navier-Stokes "moyennées".

— cfdemSolverPisoSRF-Explicit-NonMoyenné : Basé sur l'algorithme *PISO*, avec un couplage explicit pour l'intéraction fluide-solide, adaptée pour faire des études en référentiel tournant et utilisant les équations de Navier-Stokes "classiques".

Sur les Figures A.2 & A.3, sont illustrés les différents résultats obtenus. Ce qui nous permet de conclure quant à la bonne implémentation des différents solveurs développés.

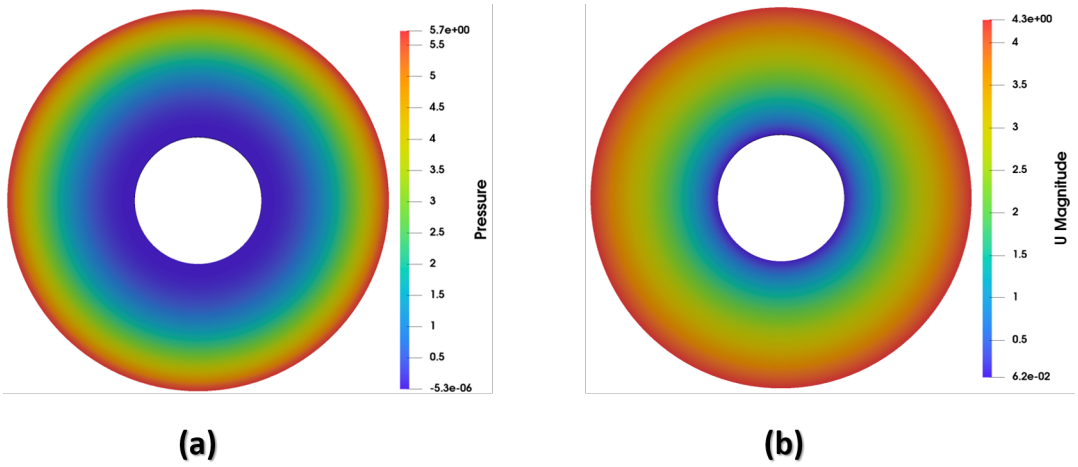

Figure A.2 Solution stationnaire obtenue pour un couette cylindrique avec rotation du mur extérieur à 250RPM. (a) Pression (b) Vitesse radiale

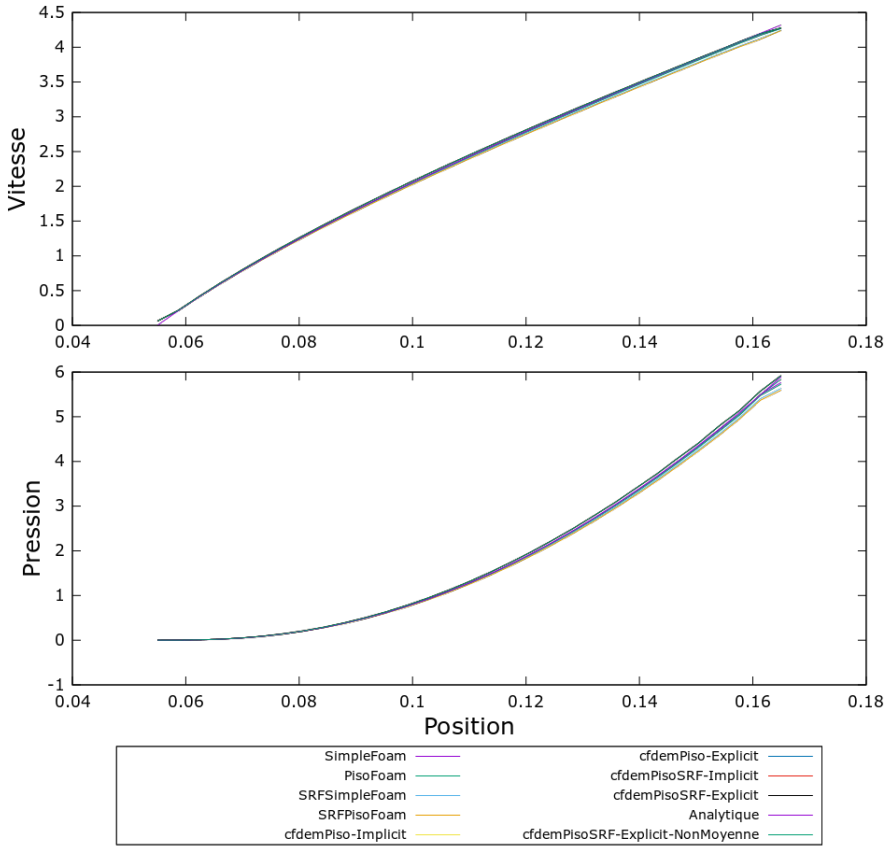

Figure A.3 Comparaison des solutions en pression et vitesse obtenues pour différents solveurs avec la solution analytique.

ANNEXE B ANALYSE DE MAILLAGE ET RÉSULTATS MONOPHASIQUES

Dans cette annexe, nous présentons différents résultats obtenus pour une cuve agitée, avec un double ruban hélicoïdal, avec un liquide sans particule. Ces résultats sont particulièrement intéressants pour pouvoir réaliser une analyse de maillage et valider le modèle CFD utilisé en référentiel tournant avec les résultats expérimentaux de [7].

Courbe de puissance

Comme nous avons pu le voir dans la revue de la littérature, une bonne manière de caractériser un système de mélange, est de tracer sa courbe de puissance. C'est ce que nous avons chercher à simuler, en nous basant sur la géométrie utilisée dans [7]. Pour la modélisation numérique, nous avons respecté la ligne de conduite suivie, tout au long de ce projet, en utilisant un modèle CFD, avec comme référentiel de référence, celui en rotation lié à l'agitateur (*méthode SRF*). Pour le calcul du nombre de puissance, nous déterminons le couple C généré à l'aide des fonctionnalités d'Open∇FOAM, puis nous en déduisons directement la puissance et ainsi le N_p via la relation :

$$Np = \frac{2\pi CN}{60\rho_f N^3 D^5} \tag{B.1}$$

Fort de ce modèle CFD permettant de tracer des courbes de puissances, nous en avons profité pour faire une analyse de sensibilité du maillage. Ainsi, nous avons généré plusieurs maillages non-structurés de tailles différentes, via le mailleur libre *GMSH* et des maillages structurés, avec le mailleur d'Open∇FOAM (*blockMesh + snappyHexMesh*). La Figure B.1 illustre différents maillages non-structurés utilisés.

Nous retrouvons les résultats de courbe de puissance obtenue avec ces maillages, à la Figure B.2. A partir de ce graphique, nous pouvons conclure qu'un maillage de 75000 cellules, est un bon compromis entre précisions et temps de calculs. Et que l'utilisation d'un maillage structuré ou non, n'a pas d'impact significatif sur la précision des résultats.

Enfin, pour terminer cette étude nous avons tracer l'évolution de $K_p = N_p \cdot Re$ en fonction du nombre de Reynolds sur la Figure B.2. Nous pouvons voir que, conformément aux résultats théoriques décris dans la revue de littérature, nous avons une valeur constante jusqu'à environ $Re = 10$. De plus, nous pouvons observer que $K_p \approx 260$ (Figure B.3). Si nous comparons ce

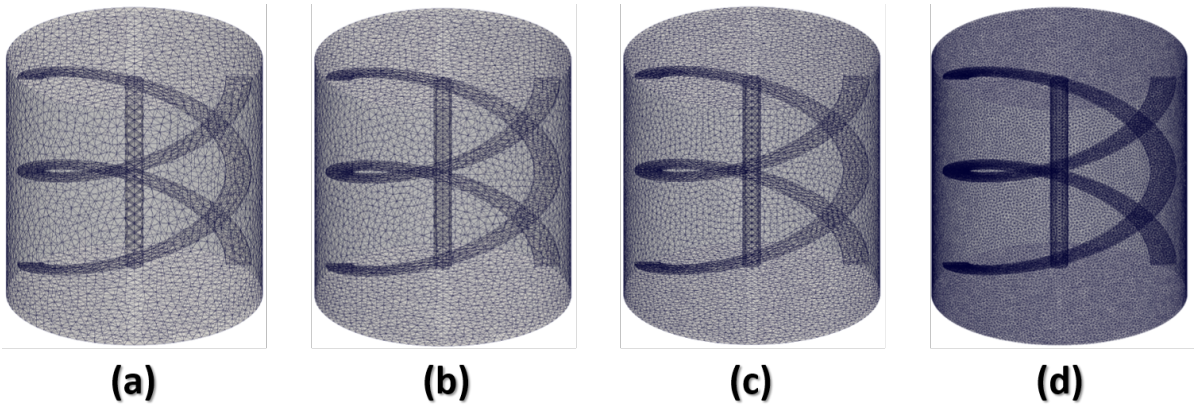

Figure B.1 Illustration d'un maillage non-structuré utilisé pour la modélisation d'une cuve agitée par un double ruban hélicoïdal - (a) 50k cellules (b) 75k cellules (c) 150k cellules (d) 1000k cellules

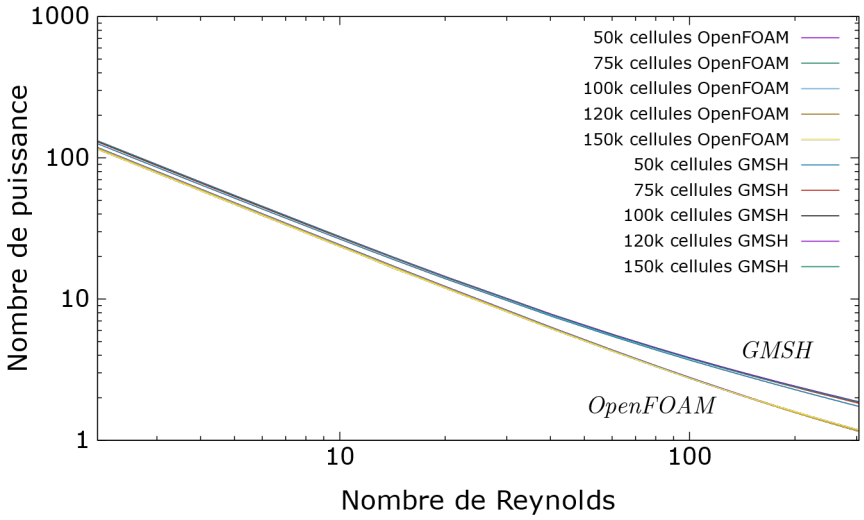

Figure B.2 Courbes de puissances obtenues avec une cuve agitée par un double ruban hélicoïdal pour différentes tailles de maillages

résultats avec la corrélation empirique développée par Brito-De La Fuente et *al* [183] :

$$K_p = 173.1 \left(\frac{s}{d}\right)^{-0.72} \left(\frac{s}{d}\right)^{-0.14} = 127 \tag{B.2}$$

avec s le pitch correspondant à la distance entre deux points du même ruban alignés verticalement, d le diamètre du ruban et w la largeur d'un ruban. On peut voir que le résultat donné par cette corrélation est relativement éloigné. Ceci est dû au fait que nous utilisons un double ruban. Cette corrélation doit donc être modifiée pour tenir compte de cela. Une approximation grossière, mais tout de même physique, est de simplement multiplier par le nombre de rubans. Pour plus de détails, nous renvoyons au modèle de Delaplace et *al* [184]. Ainsi, en multipliant par 2, nous obtenons des résultats très similaires. Ce qui nous permet de valider notre modèle CFD en référentiel tournant.

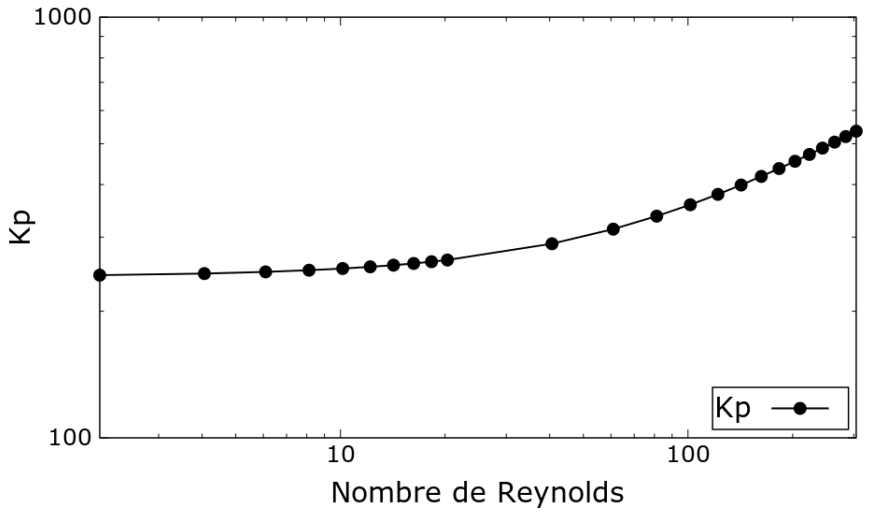

Figure B.3 Évolution de K_p avec le nombre de Reynolds pour un maillage non-structuré de 75k cellules

Pression en fond de cuve

L'étude expérimentale menée par Bertrand et *al* [7] a permis de générer des données sur la pression au fond de la cuve agitée avec un double ruban sans particule. C'est donc, tout naturellement, que nous avons confronté notre modèle CFD à ces différents résultats. Ceci est illustré à la Figure B.4. Nous pouvons regretter le fait que les résultats ne sont pas complètement cohérents. Cependant, deux choses sont à retenir. Premièrement, la tendance entre le modèle numérique et les résultats expérimentaux est la même, à savoir une diminution

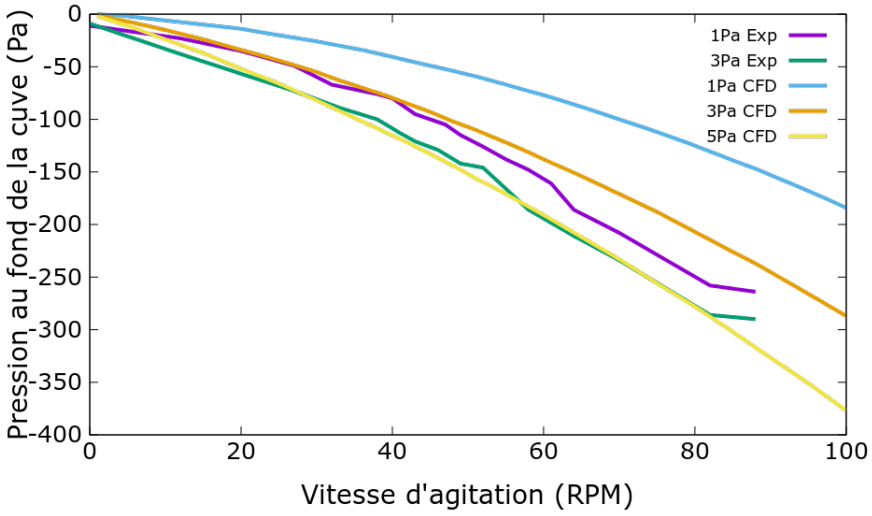

Figure B.4 Évolution de la pression en fond de cuve en fonction de la vitesse d'agitation d'un ruban hélicoïdal

de la pression avec la vitesse d'agitation. Et deuxièmement, nous pouvons aussi observer de bon accords entre les valeurs expérimentales avec une certaine viscosité et les résultats numériques avec une viscosité plus élevée (1Pa Exp/ 3Pa CFD d'une part & 3Pa Exp/ 5Pa CFD d'autre part). Ceci peut nous laisser penser que l'erreur expérimentale faite sur la mesure de la viscosité est responsable de ce décalage.

Finalement, cette étude monophasique nous a permis d'apporter les conclusions suivantes :

— Validité du modèle CFD en référentiel tournant.

— Pas de différence entre l'utilisation d'un maillage structuré et un maillage non-structuré.

— 75k cellules pour le maillage de la cuve avec un double ruban sont suffisantes pour la modélisation souhaitée.