

Titre: Vers une approche CFD-DEM résolue d'ordre élevé pour la
simulation directe d'écoulements autour d'essaims de particules

Auteur: Lucka Barbeau
Author:

Date: 2024

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Barbeau, L. (2024). Vers une approche CFD-DEM résolue d'ordre élevé pour la
simulation directe d'écoulements autour d'essaims de particules [Thèse de
doctorat, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/57895/>

 Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/57895/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Bruno Blais, Cédric Béguin, & Stéphane Étienne
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Vers une approche CFD-DEM résolue d'ordre élevé pour la simulation directe
d'écoulements autour d'essaims de particules**

LUCKA BARBEAU

Département de génie chimique

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
Génie chimique

Janvier 2024

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Cette thèse intitulée :

**Vers une approche CFD-DEM résolue d'ordre élevé pour la simulation directe
d'écoulements autour d'essaims de particules**

présentée par **Lucka BARBEAU**

en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

Charles DUBOIS, président

Bruno BLAIS, membre et directeur de recherche

Cédric BÉGUIN, membre et codirecteur de recherche

Stéphane ÉTIENNE, membre et codirecteur de recherche

Jean-Yves TRÉPANIER, membre

Catherine MAVRIPLIS, membre externe

DÉDICACE

Quand on n'essaie pas, on n'échoue pas, mais l'échec est le premier pas vers le succès.

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse, qui marque un jalon important de mon parcours académique, n'aurait pas pu aboutir sans l'apport et le soutien de nombreuses personnes à qui je tiens à exprimer ma gratitude la plus sincère.

Je commence par remercier chaleureusement mon superviseur principal, Bruno Blais. Ta patience, ta créativité, ton incroyable connaissance de notre domaine et surtout ton soutien infaillible ont été des éléments clés de mon succès. Ta capacité à inspirer, à motiver, et à croire en tes étudiants a profondément marqué mon parcours doctoral. Les heures passées à ton bureau à partager mille et une idées auront été parmi les plus formatrices de mon doctorat. Merci.

À mes co-directeur Cédric Béguin et Stéphane Étienne, votre soutien, vos conseils avisés et vos contributions d'idées ont considérablement enrichi ma recherche. Votre expertise et votre guidance ont été des atouts précieux tout au long de ce parcours.

Je suis également reconnaissant envers mes collègues de travail, pour leur soutien inestimable et leur collaboration enrichissante. Un merci tout particulier à Amishga Alphonius, Valérie Bibeau, Audrey Collard-Daigneault, Carole-Anne Daunais, Toni El Geitani, Olivier Gaboriault, Shahab Golshan, Olivier Guévremont, Jeanne Joachim, Pierre Laurentin, Oreste Marquis, Ghazaleh Mirakhor, Victor Oliveira Ferreira, Hélène Papillon-Laroche, Paul Patience, Laura Prieto Saavedra et Mikael Vaillant pour votre esprit d'équipe et votre précieuse amitié. Nos moments passés au Pub McCarold où nous partageons une bière en discutant de tout et de rien, ont été parmi les plus précieux de mon parcours doctoral. Ces échappées hors du cadre académique ont renforcé nos liens et ont été une source de détente et d'inspiration inestimable.

Je tiens à souligner la collaboration exceptionnelle de mes collègues Olivier Guévremont et Carole-Anne Daunais. Olivier, nos sessions de codage intensives et notre volonté commune de perfectionner notre travail ont été des moments clés de ma thèse. Carole-Anne, collaborer avec toi sur l'application de mon solveur aux fluides non Newtoniens a été non seulement agréable, mais aussi extrêmement enrichissant. Vous avez tous les deux grandement contribué à la qualité de mon travail et rendu les semaines de travail encore plus agréables.

Enfin, mes remerciements les plus chaleureux vont à ma famille et à mes proches. À Catherine Maheux, ma partenaire incroyable, merci pour ton amour, ton soutien inébranlable, et ta compréhension durant ces années. Sans ton soutien et ton aide à des moments clés, je ne suis

pas sûr que j'aurais pu réaliser cette grande réussite. Tes encouragements dans les moments de doute et ta joie dans les moments de succès ont été des plus précieux. À mes parents, Stéphane Barbeau et Édith Martin, pour leur soutien indéfectible depuis toujours, vous avez toujours été là pour moi, dans les bons et les mauvais moments, et cela a fait toute la différence. Votre soutien constant a été un pilier dans cette aventure.

RÉSUMÉ

Les écoulements polyphasiques, et plus particulièrement les interactions solide-fluides, représentent un domaine d'intérêt majeur dans de nombreuses applications industrielles, allant du traitement des eaux à la production d'énergie. Cette omniprésence des écoulements solide-liquide en génie chimique a stimulé un effort de recherche intensif visant à comprendre et à modéliser les phénomènes complexes qui régissent le comportement physique de ces écoulements. La compréhension de ces interactions est essentielle non seulement pour l'optimisation des processus existants, mais aussi pour l'innovation dans le développement de nouvelles technologies. Cet intérêt est motivé par la nécessité de modéliser avec précision les interactions dynamiques entre les solides et les fluides, qui sont cruciales pour la performance et l'efficacité de ces processus industriels. Les défis inhérents à ces systèmes incluent la diversité des échelles impliquées, la complexité des phénomènes physiques et la nécessité de méthodes de modélisation numérique robustes et précises.

Cette thèse s'inscrit dans ce contexte en abordant la nécessité d'une modélisation précise et rapide des écoulements fluides-solides à petite échelle, en particulier dans les systèmes où la dynamique de l'écoulement à l'échelle des particules influence la formation de structures (vortex, nuage de particules, etc) à plus grande échelle. L'objectif principal étant de développer une approche de modélisation de la dynamique des fluides numérique, appelée en anglais *Computational Fluid Dynamics (CFD)*, combinée avec une méthode des éléments discrets, appelée en anglais *Discrete Element Method (DEM)* (CFD-DEM) d'ordre élevée et résolue à l'échelle des particules, pour identifier les mécanismes d'interaction hydrodynamique des particules en mouvement dans des écoulements incompressibles. Ce nouveau solveur permet l'étude des interactions hydrodynamiques entre particules dans des écoulements incompressibles à l'échelle de celles-ci.

La thèse introduit une méthode de conditions immergées à ordre de convergence contrôlable pour représenter des assemblages de particules sphériques. Cette méthode, basée sur le concept de l'interface nette dans le contexte de la méthode des éléments finis, vise à simplifier le processus de maillage tout en préservant une précision élevée. Elle est testée et validée à travers des simulations de l'écoulement de Couette et l'étude de l'écoulement autour de sphères, en comparant les forces de traînée et les caractéristiques des zones de recirculation avec des résultats expérimentaux et numériques existants.

Cette approche de condition immergée est combinée avec un solveur DEM pour en faire un solveur CFD-DEM implicite d'ordre contrôlable (2 ou 3 en espace et en temps), intégrant un

nouveau schéma de couplage implicite entre les phases solides et fluides. Ce solveur est testé et validé à travers divers cas, y compris la sédimentation et la montée de particules, ainsi que des situations impliquant des contacts entre particules et des comportements complexes tels que le *drafting*, *kissing*, et *tumbling* (DKT). Une attention particulière est accordée à la stabilité du schéma dans des cas impliquant de nombreux contacts particule-particule et particule-paroi.

Finalement, la thèse utilise cet outil de simulation pour développer un nouveau modèle de force hydrodynamique pour un assemblage de deux particules basé sur un réseau de neurones artificiels (ANN). Ce modèle de force est utilisé en combinaison avec d'autres modèles de force disponible dans la littérature pour définir un modèle de force hydrodynamique pour la sédimentation d'une paire de particules. La comparaison de ce modèle avec les résultats de simulation CFD-DEM résolue souligne l'importance de l'historique des interactions entre les particules sur leur dynamique, principalement pour des cas ayant de faibles rapports densité particule/fluide (0.001).

Cette recherche met en évidence le potentiel des méthodes CFD-DEM avancées dans l'amélioration de la compréhension et de la prédiction des dynamiques complexes des systèmes fluides-particules, avec des implications significatives pour l'optimisation des procédés industriels.

ABSTRACT

Multiphase flows, and more specifically, solid-fluid interactions, represent a major area of interest in numerous industrial applications, ranging from water treatment to energy production. The ubiquity of solid-liquid flows in chemical engineering has stimulated intensive research efforts to understand and model the complex phenomena governing the physical behavior of these flows. Understanding these interactions is essential not only for optimizing existing processes but also for innovation in the development of new technologies. This interest is driven by the need to accurately model the dynamic interactions between solids and fluids, which are crucial for the performance and efficiency of various industrial processes. The inherent challenges in these systems include the diversity of scales involved, the complexity of the physical phenomena, and the need for robust and precise numerical modeling methods.

This thesis tackles the need for precise and rapid modeling of solid-fluid flows at a small scale, especially in systems where the flow dynamics at the particle scale influence the formation of large-scale structures (Vortices, clusters of particles, etc). The main objective is to develop a high-order computational fluid dynamics (CFD) modeling approach combined with a discrete element method (DEM) (CFD-DEM) resolved at the particle scale to identify the hydrodynamic interaction mechanisms of moving particles in incompressible flows. This new solver allows the study of hydrodynamic interactions between particles in incompressible flows at their scale.

The thesis introduces an immersed boundary method with a controllable order of convergence to represent assemblies of spherical particles. This method, based on the concept of the sharp interface in the context of the finite element method, aims to simplify the meshing process while maintaining high accuracy. It is tested and validated through Couette flow simulations and the study of flow around spheres, comparing drag forces and recirculation zone characteristics with existing experimental and numerical results.

This immersed boundary approach is combined with a DEM solver to create a controllable order (2 or 3) implicit CFD-DEM solver, integrating a new implicit coupling scheme between solid and fluid phases. This solver is tested and validated through various cases, including particle sedimentation and rise, as well as situations involving particle-particle and particle-wall contacts and complex behaviors such as drafting, kissing, and tumbling (DKT). Special attention is given to the stability of the scheme in cases involving numerous particle-particle and particle-wall contacts.

Finally, the thesis uses this simulation tool to develop a new hydrodynamic force model for a pair of particles based on an artificial neural network (ANN). This force model is used in combination with other force models available in the literature to define a hydrodynamic force model for the sedimentation of a pair of particles. The comparison of this model with the results of resolved CFD-DEM simulations underscores the importance of the history of particle interactions on their dynamics, especially in cases with low particle/fluid density ratios (0.001).

This research highlights the potential of advanced CFD-DEM methods in improving the understanding and prediction of complex dynamics in particle-fluid systems, with significant implications for the optimization of industrial processes.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES TABLEAUX	xiv
LISTE DES FIGURES	xvi
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xxv
LISTE DES ANNEXES	xxix
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	5
2.1 Hydrodynamique d'une particule seule	5
2.1.1 Régime d'écoulement autour d'une sphère	6
2.1.2 Forces appliquées sur une particule	12
2.1.3 Sédimentation d'une particule seule	17
2.2 Hydrodynamique de plusieurs particules	19
2.2.1 Hydrodynamique de deux particules	19
2.2.2 Hydrodynamique de plus de deux particules	25
2.3 Modélisation numérique d'un fluide	28
2.3.1 Méthode d'ordre élevé	29
2.3.2 Méthode des éléments finis	30
2.3.3 Adaptation de maillage	32
2.4 Modélisation de particules immergées	33
2.4.1 Force de contact	34
2.4.2 Force sans contact	36
2.4.3 Modélisation de particules en CFD-DEM non-résolue	36

2.4.4	Modélisation de particules en CFD-DEM résolue	38
2.4.5	Couplage entre la CFD et la DEM pour une approche de CFD-DEM résolue	45
CHAPITRE 3 OBJECTIFS DE RECHERCHE		47
3.1	Critique de la revue de littérature	47
3.1.1	Absence de méthode d'ordre élevé appliquée à la CFD-DEM résolue .	47
3.1.2	Stabilité du couplage fluide-solide des modèles de type CFD-DEM résolus	48
3.1.3	Modélisation de l'interaction d'une paire de particules	48
3.2	Objectif principal	48
3.3	Objectifs spécifiques	49
3.3.1	Objectif spécifique 1	49
3.3.2	Objectif spécifique 2	49
3.3.3	Objectif spécifique 3	50
3.4	Organisation de la thèse	50
CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE		52
4.1	Plateformes logicielles	52
4.1.1	Lethe	52
4.1.2	Modèle dynamique en Python	53
4.2	Méthodologie d'implémentation	54
4.2.1	Gestion de versions	54
4.2.2	Vérification de code	55
4.2.3	Validation	56
4.3	Analyse des données	56
4.3.1	Post-traitement des données	56
4.3.2	Visualisation	56
CHAPITRE 5 ARTICLE 1 : DEVELOPMENT OF A HIGH-ORDER CONTINUOUS GALERKIN SHARP-INTERFACE IMMersed BOUNDARY METHOD AND ITS APPLICATION TO INCOMPRESSIBLE FLOW PROBLEMS		57
5.1	Contexte de l'article	57
5.2	Introduction	58
5.3	Sharp-interface immersed boundaries	60
5.3.1	Algorithm for the sharp-interface method	63
5.3.2	Definition of the vector normal to the boundary and finding x_n	63
5.3.3	Definition and use of $s(x)^*$	65

5.4	Application to the incompressible Navier–Stokes equations	68
5.5	Applications examples	70
5.5.1	Taylor–Couette flow in 2D	70
5.5.2	Vortex shedding behind a cylinder	75
5.5.3	Flow around a sphere	80
5.5.4	Flow through a packing of spheres	80
5.6	Conclusion	83
5.7	Discussion	84
5.7.1	Complément d’éléments méthodologique	85
5.7.2	Limitations	87
CHAPITRE 6 ARTICLE 2: HIGH-ORDER MOVING IMMERSED BOUNDARY AND ITS APPLICATION TO A RESOLVED CFD-DEM MODEL		
6.1	Contexte de l’article	91
6.2	Introduction	92
6.3	Model formulation	95
6.3.1	Particle dynamics	95
6.3.2	Fluid dynamics and sharp-edge immersed boundary	98
6.3.3	Solid-fluid coupling	100
6.3.4	Spurious pressure oscillations	105
6.4	Verification of the model	108
6.4.1	Imposed dynamics case	110
6.4.2	Coupled dynamics case	111
6.4.3	Time step convergence	111
6.4.4	Computational efficiency	111
6.5	Validation of the model	114
6.5.1	Sedimentation at low Reynolds	115
6.5.2	Positively buoyant particle at $Re=2500$	117
6.5.3	Contact between two particles	119
6.5.4	Boycott effect	123
6.6	Conclusion	126
6.7	Acknowledgements	128
6.8	Discussion	128
6.8.1	Complément de validation	128
6.8.2	Alternatives pour le couplage des particules avec le fluide	128
6.8.3	Limitations	130

CHAPITRE 7	ARTICLE 3: ARTICLE 3: SOLID-FLUID FORCE MODELING: INSIGHTS FROM COMPARING A REDUCED ORDER MODEL FOR A PAIR OF PARTICLES WITH RESOLVED CFD-DEM	132
7.1	Contexte de l'article	132
7.2	Introduction	133
7.3	ANN regression of particle pair fluid force interactions	136
7.3.1	Creation of the data set	137
7.3.2	Definition of the ANN training parameters	138
7.3.3	ANN validation	141
7.3.4	Validation of the model	141
7.4	Reduced order model	144
7.4.1	Validation of the reduced order model	145
7.5	Model Analysis	148
7.5.1	ROM and resolved CFD-DEM comparison	151
7.5.2	Effect of angular velocity	157
7.6	Conclusion	160
7.7	Acknowledgements	161
7.8	Discussion	161
7.8.1	Limitations	162
CHAPITRE 8	DISCUSSION GÉNÉRALE	163
CHAPITRE 9	CONCLUSION	164
9.1	Synthèse des travaux	164
9.2	Limitations	165
9.2.1	Limitations du modèle de type CFD-DEM résolue	165
9.2.2	Limitations de l'étude sur la dynamique d'une paire de particules	166
9.3	Améliorations futures et autres applications	166
9.3.1	Améliorations futures	167
9.3.2	Autre applications	168
9.4	Mot de la fin	168
RÉFÉRENCES		170
ANNEXES		193

LISTE DES TABLEAUX

Table 5.1	Coefficients a_s^j that form $s(\mathbf{x})^*$ when n is defined based on Equation (5.1) with $\varepsilon_n = 1/8$. The coefficients are given for a polynomial approximation of $s(\mathbf{x})^*$ of order lower than or equal to 4.	66
Table 5.2	Error on the velocity field for the Taylor–Couette cases evaluated in the L2 norm for Q1-Q1, Q2-Q1 and Q2-Q2 elements, using both formulation of $s(\mathbf{x})^*$ given in Section 5.3.3.	74
Table 5.3	Error on the velocity field for the Taylor–Couette cases evaluated in the L2 norm for Q3-Q2, Q3-Q3 elements, using both formulation of $s(\mathbf{x})^*$ given in Section 5.3.3	75
Table 5.4	Error on the torque evaluation, for the Taylor–Couette cases, on the inner cylinder for Q1-Q1, Q2-Q1 and Q2-Q2 elements, using both formulation of $s(\mathbf{x})^*$ given in the Section 5.3.3. The analytical solution for this specific case is $T_z = -\frac{\pi}{3}$	76
Table 5.5	Comparison table of C_L , C_D , and S_t found in various numerical studies of flow around a cylinder at Reynolds = 200.	77
Table 5.6	Table of key results for a flow around a sphere at Re = 100, Methods used are classified as follows: simulation with a conformal mesh (NCM), simulation with immersed boundary (NIB), experimental (EXP). . .	81
Table 5.7	Position of the center of the spheres of radius $R = 0.5$ for the case of a flow throw the packing of 10 spheres	83
Table 5.8	Comparison of the force on each sphere from Table 5.7 using a conformal mesh (CM) the sharp interface immersed boundary method on an unstructured mesh (IB US) and the sharp interface immersed boundary method on a structured mesh (IB S)	83
Table 6.1	Fluid properties for the 4 experiments presented by Ten Cate <i>et al.</i> .	115
Table 7.1	Without any hypothesis on the initial conditions, we obtained a system with 35 variables to express the total solid-fluid force on one particle	136
Table 7.2	Assuming that particles have the same constant velocity, the flow is fully developed, the flow has not developed 3-dimensional instability (all interaction happens in the plane defined by $\mathbf{v} \times \mathbf{r}$), there is no buoyancy force, and the particle has zero angular velocity the system of Table 7.1 simplified to these nine variables to express the force and torque on a particle.	137

Table 7.3	Structured sampling of the three independent dimensionless numbers used to analyze the modification of the solid-fluid force as a function of the Reynolds number and the relative particle position. All combinations of these three variables are sampled for a total of 2475 data points.	138
Table 7.4	Fluid force and torque models and the range of applicability of each model	146
Table 7.5	Properties of the fluid for each of the four cases proposed by [1] . . .	146
Table 7.6	The initial condition for the sedimentation of two particles is defined by a set of 4 dimensionless numbers assuming that the particles are initially at rest and identical. The vector $\mathbf{r}_{01}$ is the relative position vector going from particle P_0 center to particle P_1 center.	148
Table 7.7	The 12 sedimentation cases used to characterize the predictive capability of the ROM.	149
Table D.1	Input variables and their interval.	213
Table D.2	Performance metrics on each set.	222
Table D.3	Correlation equations for the power number for pitched and paddle impellers in unbaffled condition.	224
Table E.1	Values for correlation equation (E.24).	250
Table E.2	Dimensionless maximal shear rate on the surface of the sphere for $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.	250
Table E.3	Dimensionless upstream-downstream pressure difference on the surface of the sphere for $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.	250
Table E.4	Comparison of the dimensionless wake length (L/D) between present work values and values from the literature [2,3] for power-law fluids. .	252

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Diagramme des méthodes de modélisation et de l'échelle de résolution de l'interaction entre les particules et le fluide. Cette figure est inspirée du travail de Bakker pour la séparation des approches numériques pour la modélisation de la turbulence [4].	2
Figure 1.2	Visualisation des différentes échelles pouvant être utilisées pour modéliser l'interaction de particules avec un fluide. À gauche, la modélisation d'un système de grande taille où la modélisation directe de l'ensemble des particules est impossible. Au centre la modélisation d'un écoulement avec des particules ou l'écoulement est approximée autour des particules par des modèles de fermeture. À droite, modélisation directe de l'écoulement autour des particules permettant d'étudier directement leur interaction. Tiré de [5].	3
Figure 2.1	Évolution du coefficient de traînée moyenne d'une sphère seule en fonction du nombre de Reynolds. Tiré de [6].	7
Figure 2.2	Apparition d'instabilité temporelle dans le sillage derrière une sphère. Tiré de [7].	9
Figure 2.3	Apparition d'instabilités de Kelvin-Helmholtz dans le sillage d'une sphère pour un nombre de Reynolds supérieur à 800. Tiré de [8].	10
Figure 2.4	Apparition d'un second mode pour la formation des vortex principaux dans le sillage d'une sphère pour un nombre de Reynolds supérieur à 800. Tiré de [8].	11
Figure 2.5	Passage du régime sous-critique de l'écoulement autour d'une sphère à un écoulement supercritique. Tiré de [9].	12
Figure 2.6	Évolution du coefficient de traînée moyen ainsi que de la portance moyenne en fonction du nombre de Reynolds et de α	14
Figure 2.7	Modification du coefficient de traînée en fonction de la position du centre de la sphère relativement à une sphère de référence pour un Reynolds de 100. Ici, l'angle fait référence à l'angle entre le vecteur formé par les centroïdes de sphère et la vitesse de l'écoulement. Tiré de [10].	20

Figure 2.8	Modification du coefficient de portance en fonction de la position du centre de la sphère relativement à une sphère de référence pour un Reynolds de 100. Ici, l'angle fait référence à l'angle entre le vecteur formé par les centroïdes de sphère et la vitesse de l'écoulement Tiré de [10].	21
Figure 2.9	Processus de <i>drafting</i> , <i>kissing</i> et <i>tumbling</i>	22
Figure 2.10	Schéma des variables propres au mouvement des particules qui influencent la force de lubrification appliquée sur celles-ci.	24
Figure 2.11	Densité de probabilité de la force appliquée sur une particule relativement à la force moyenne pour d'un assemblage de particules sphériques	26
Figure 2.12	Illustration de la réduction du temps de calcul nécessaire pour atteindre une précision donnée avec un schéma présentant un ordre de convergence supérieur à deux (schéma utilisant des éléments de type Q2, Q3 et Q4). L'erreur représentée dans cette figure est obtenue par la méthode des solutions manufacturées pour le cas des vortex de Taylor-Green en 2D. Figure extraite de Blais <i>et al.</i> [11].	29
Figure 2.13	Comparaison de la discrétisation du fluide utilisé en fonction de l'approche de CFD-DEM utilisé. En (A) l'approche résolue et en (B) l'approche non-résolue. Tiré de [12].	34
Figure 2.14	Présentation des grilles utilisées afin de résoudre l'écoulement autour d'un cylindre à partir d'une grille chimère. (a) la grille principale du domaine de calcul (b) la grille représentant l'objet (c) la grille chimère formée par la superposition des grilles (a) et (b). Tiré de [13]	40
Figure 2.15	La méthode <i>cut-cell</i> ajoute des degrés de liberté à l'intersection entre la condition immergée et les éléments. Les éléments coupés sont par la suite redéfinis en plusieurs sous-éléments. Tiré de [14]	44
Figure 5.1	Representation of the domain Ω , the domain on which a PDE is solved, and its constituents: Ω_Γ the cells intersected by the immersed boundary Γ and $\Omega_E = \Omega - \Omega_\Gamma$ the effective domain.	62
Figure 5.2	Representation of a Q2 element being cut by an immersed boundary Γ . Present the normal to the boundary and d the DOFs that form the boundary of the effective domain. The boundary value of those DOFs allows the proper representation of the Boundary Γ that lies outside of the effective domain Ω_E	64

Figure 5.3	Representation of $\mathbf{n}$ and the key points along it. Here a second order Lagrange approximation of $s(\mathbf{x})$ is used to define $s(\mathbf{x})^*$. This function will then be used to define the boundary condition applied on d	67
Figure 5.4	Norm of the velocity field for the Taylor–Couette flow in 2D using 2 sharp immersed boundaries. The flow is solved on both sides of the immersed boundary for both cylinders using meshes of the domain of 32X32 to 256X256. The cylinder radius is $R_i = 0.25$ and $R_o = 0.5$ which gives a Taylor number $Ta = \frac{1}{256}$	72
Figure 5.5	Comparison between the analytical solution and some simulation results of the azimuthal velocity in function of the radius of the Taylor–Couette case. The mesh used for comparison is 64×64 , and the simulation results presented are Q1-Q1 S1, Q2-Q1 S2, and Q3-Q2 S3. Note: the Q3-Q2 S3 simulation results are difficult to distinguish from those of the Q2-Q1 S2 simulation since they both coincide with the analytical solution.	73
Figure 5.6	Geometry of the domain for the von Karman vortex analysis around a cylinder at $Re = 200$. Adapted from [15].	77
Figure 5.7	Evolution of the drag and lift coefficient for the vortex shedding cases behind a cylinder. The flow has a Reynold number $Re = 200$ and is simulated over 200 s.	78
Figure 5.8	Strouhal number associated with the vortex shedding behind a cylinder obtained using a fast Fourier transform of the lift coefficient in the last 100 s of the simulation.	79
Figure 5.9	Streamlines for the flow around a sphere at $Re = 100$. Also, presents the key variable for the geometry of the re-circulation zone.	81
Figure 5.10	Streamline of a flow through the packing of 10 spheres at $Re_p = 50$. The purple surface is obtained based on the iso-surface of the norm of the velocity field at $\ u\ = 0.05$	82
Figure 5.11	Vue de coupe du domaine utilisé pour évaluer les propriétés de conservation de la masse de la méthode de condition immergée présentée dans le Chapitre 5	89
Figure 5.12	Convergence de la conservation de la masse à la surface de la particule en fonction de la taille du maillage et de l'ordre des éléments utilisés. Les éléments Q1-Q1 présentent une convergence qui suit l'ordre du schéma, alors que les éléments Q2-Q1 présentent une sur convergence par rapport à l'ordre du schéma.	90

Figure 6.1	Visualisation of the different mathematical components needed to impose the sharp interface IB condition at the surface of a particle. This figure adapted from Barbeau <i>et al</i> [16]	101
Figure 6.2	Flowchart of the resolved CFD-DEM model. If the statements inside the diamond shape box are true, the algorithm follows the (T) path; otherwise, it follows the (F) path.	102
Figure 6.3	Representation of the sudden change of the solution when the IB changes cell.	107
Figure 6.4	Error on the velocity (a) and pressure (b) field for the imposed oscillating Stokes cases in 3D evaluated using Equations (6.48) and (6.50) as functions of the size of the space discretization. The convergence analysis uses Q1-Q1 and Q2-Q1 elements with a BDF2 time-stepping scheme using a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$	110
Figure 6.5	Error on the velocity (a) and pressure (b) field for the coupled oscillating Stokes cases in 3D evaluated using Equations (6.48) and (6.50) in functions of the size of the space discretization. The convergence analysis is done using Q1-Q1 and Q2-Q1 elements using a BDF2 scheme with a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$. The reference convergence curve for the IBM without the coupling was added as a reference for each case. The only notable exception is the convergence order for the pressure using Q2-Q1 element since the reference convergence order (2) is not affected by the coupling.	112
Figure 6.6	Time convergence of the velocity field for the coupled dynamics case using $128 \times 128 \times 128$ Q2-Q1 elements ($\frac{d_p}{\Delta x} = 64$) and a BDF2 time-stepping scheme.	113
Figure 6.7	Total CPU time as a function of the velocity field error for the imposed dynamics case (a) and coupled dynamics case (b). The analysis uses Q1-Q1 and Q2-Q1 elements using a BDF2 scheme with a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$. Results for the imposed dynamics case were obtained using 40 to 200 Intel Gold 6148 Skylake CPUs running at 2.4GHz. Results for the coupled dynamics case were obtained using 64 to 256 AMD Rome 7532 CPUs running at 2.4GHz	114
Figure 6.8	Vertical velocity comparison between the simulation and the experimental results presented by Ten Cate <i>et al.</i> [17]	116

Figure 6.9	Vertical velocity comparison for the E4 case between the simulations done with various discretization. The experimental results presented by Ten Cate <i>et al.</i> [17] are also added to the figure as a reference. Results with the same color have a similar number of total DOFs.	117
Figure 6.10	Comparison of the vertical (a) and horizontal(b) velocity of the particles observed in the simulation and in the experiments. The average vertical velocity is also compared to the expected terminal velocity using a force balance. The average velocity in the simulation (21.2 cm s^{-1}) and in the experiments (20.8 cm s^{-1}) are calculated after their respective first vortex shedding.	120
Figure 6.11	Representation of the initial conditions for the contact between two particles. This case is derived from the original work of Glowinski <i>et al.</i> [18]. The representation is not to scale to emphasize some dimension.	121
Figure 6.12	Vertical velocity comparison between different simulation results obtained and the results of Nie <i>et al.</i> and Apte <i>et al.</i> [19,20].	122
Figure 6.13	Representation of the initial conditions for all inclination angles: (a) $\theta = 0^\circ$, (b) $\theta = 10^\circ$, (c) and $\theta = 20^\circ$. We note that the coordinate system stays in the direction of the container.	123
Figure 6.14	Average velocity of the particles in z for the Boycott sedimentation case for all inclination angles. The higher inclination angles increase the sedimentation speed.	124
Figure 6.15	Dispersion of the particles in the x direction. The lower the dispersion, the more compact the particles are.	125
Figure 6.16	Average velocity of the 64 particles in the z direction as a function of the dispersion in x of the particles. Regardless of the inclination angle and approach used for the simulation, all results are regrouped around the regression line $g(x) = 94.2x - 11.8 \text{ cm s}^{-1}$ with $R^2 = 0.90$	127
Figure 6.17	Validation de la vitesse terminale de sédimentation d'une particule dans un fluide de type Herschel-Bulkley par Fazli <i>et al.</i> [21]. Cette validation utilise le solveur présenté dans les Chapitres 5 et 6.	129
Figure 7.1	Representation of the simulation domain and the two refinement zones (Z1 and Z2) around the particles. The refinement zone Z1 guarantees a minimal element size of $0.1172d_p$, and the refinement zone Z2 guarantees the minimal element size allowed.	139

Figure 7.2	Mesh sensitivity analysis of the relative error on Cd , Cl , and Ct . The variables reported with r are evaluated at the smallest ($\frac{\Delta x}{d_p} = \frac{15}{1024}$). The Δx reported is the smallest space discretization in a given discretization.	140
Figure 7.3	Parity plot of the Cd , Cl , and Ct ANN correlations with the testing data set (30% of the data set) and the untrained data at Reynolds 54. All three correlations agree well with the simulation results ($R^2 > 0.999$).	142
Figure 7.4	Comparison of results obtained for the modification of the drag coefficient with various results in the literature [10, 22–26].	143
Figure 7.5	Comparison of results obtained for the modification of the lift coefficient with the results of [10].	144
Figure 7.6	ROM validation using the modified validation case for a single particle of [1]. Results are in good agreement with the resolved CFD-DEM results [27].	147
Figure 7.7	Standard disposition of the particles pair in a Cartesian frame of reference.	149
Figure 7.8	Typical trajectory for both initial dispositions of the particles; (a) $r^* = 1.5$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ and (b) $r^* = 2.06$, $\theta = 0.245$).	150
Figure 7.9	Comparison of the vertical velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.	153
Figure 7.10	Comparison of the horizontal velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.	154
Figure 7.11	Comparison of the angular velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.	155

Figure 7.12	Comparison of ROM vertical and horizontal particle velocity results with resolved CFD-DEM simulations for various ρ^* . For these cases $r^* = 2.06$, $\theta = 0.245$ and Archimedes number $Ar = 2930$	158
Figure 7.13	Comparison of the horizontal velocity of resolved CFD-DEM simulation with and without the rotation of the particles. The rotation of the particle leads to a significant disparity in the horizontal velocity between the two simulations. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' positions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.	159
Figure A.1	Vertical velocity of a lone particle floating compared to its terminal velocity. The particle-to-fluid density ratio is 0.01, highlighting the stability of the scheme for a very low particle-to-fluid density ratio. .	194
Figure B.1	Drag coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. In this figure, the velocity of the particle is negative in x.	196
Figure B.2	Lift coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. In this figure, the velocity of the particle is negative in x.	197
Figure B.3	Torque coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. The velocity of the particle is assumed to be negative in x for in this figure	205
Figure D.1	Scheme of the mixing rig used for the simulations.	211
Figure D.2	Artificial Neural Network (ANN) architecture with two hidden layers to predict the power number based on features that describes the mixer.	214
Figure D.3	Velocity in the radial direction in a mixer at $Re = 100$ in a top view perspective.	218
Figure D.4	Velocity in the axial direction at $Re = 100$ in a side view perspective.	219
Figure D.5	Mesh refinement near the blades and the shaft of the impeller. . . .	220
Figure D.6	Normalized torque Γ according to the maximum characteristic length of the mesh near the agitator for average and worse geometries. . . .	222
Figure D.7	Predictions using the ANN and the correlation from Hiraoka et al. (1997) versus values of the power number N_p from the CFD simulations.	224
Figure D.8	Power number versus Reynolds number for a specified geometry ($T/D = 3$, $H/T = 1$, $T/C = 4$, $D/W = 5$, $E/W = 0.1$, $\theta = \pi/4$) using the ANN, CFD simulations (Lethe) and Hiraoka et al. (1997) correlation.	226

Figure D.9	Power number versus Reynolds number for a specified geometry ($T/D = 2.5$, $H/T = 1.2$, $T/C = 3$, $D/W = 3.5$, $E/W = 0.15$, $\theta = \pi/6$) using the ANN, CFD simulations (Lethe) of two different element sizes L_c and Hiraoka et al. (1997) correlation.	226
Figure D.10	Validation of the ANN's prediction of a power curve for a specified geometry ($T/D = 3$, $H/T = 1$, $T/C = 4$, $D/W = 5$, $E/W = 0.15$, $\theta = \pi/4$).	227
Figure E.1	Viscosity regions for shear thinning flows, in log-log scale, with two Newtonian plateaus (1 & 4), a transition (3) to the descending section (2) (adapted from [28]).	233
Figure E.2	Evolution of the $\mathcal{L}^2$ norm of the error on the velocity profile of a Carreau fluid for different scheme orders when operating a global mesh refinement. The order of convergence is consistent with the order of the underlying FEM interpolation.	238
Figure E.3	Geometry of the calculation domain and position of the particle for all simulations, with D the diameter of the spherical particle. The dimension H will be determined in section E.4.1.	239
Figure E.4	Evolution of the drag coefficient C_D as H/D is increased at $\text{Re} = 0.1$ for Newtonian flow, considering $C_{D,H/D=75} = 244.7$. With an error of less than 1%, the H/D ratio of 60 is chosen.	240
Figure E.5	Evolution of the drag coefficient (C_D) as the cells near the particle are refined, for different n values for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$, using the power-law model. The chosen mesh size ($\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$) is in grey.	242
Figure E.6	Examples of xy -plane mesh slices used for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$, with $H/D = 60$ around the spherical particle (in turquoise). . . .	243
Figure E.7	Evolution of the drag coefficient (C_D) for $n = \{0.5, 0.7, 0.9\}$ for a series of minimal shear rate ($\dot{\gamma}_{\min}$) values used for power-law simulations, at $\text{Re} = 0.1$. A $\dot{\gamma}_{\min} < 10^{-4}$ is ideal for $\text{Re} = 0.1$, for all n	244
Figure E.8	Comparison between drag coefficient models given in the literature and our results for $\text{Re} \in [0.1, 100]$ at $n = 1$ (the ideal ratio is $C_D/C_{D,\text{Lethe}} = 1$, in black) [2,29–33]. The chosen model is Clift <i>et al.</i> 's, in yellow. The abrupt slope change in the yellow curve at $\text{Re} \approx 23$ is due to the shift in the formulation at $\text{Re} = 20$ (see equation (E.22)).	245

Figure E.9	Simulation drag coefficient ratios ($C_D/C_{D,0}$), with $C_{D,0}$ defined in (E.22), for Re from 0.1 to 100 for all simulated n values using the power-law model. The subtle slope change at $\text{Re} \approx 23$ is due to the formulation change in (E.22).	247
Figure E.10	Calculated drag coefficients for power-law fluids from the Lethe simulations and the suggested correlation compared to results from Tripathi <i>et al.</i> [34], Dhole <i>et al.</i> [2] and Song <i>et al.</i> [3, 35]. Newtonian results ($n = 1$ in (a)) are also compared to Johnson & Patel's [36].	248
Figure E.11	xy -plane velocity profiles with streamlines (in white) around the spherical particle (in turquoise) for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.	249
Figure E.12	Evolution of the ratio between the pressure drag ($C_{D,p}$) and the friction drag ($C_{D,f}$) for $n = \{1, 0.9, 0.7, 0.5\}$ when increasing the Reynolds number using the power-law model.	251
Figure E.13	Simulation drag coefficient ratios ($C_D/C_{D,0}$), with $C_{D,0}$ defined in (E.22) for Re from 0.1 to 100 comparing Newtonian flow, power-law modeled flow and all Carreau modeled simulations for (a) $n = 0.9$, (b) $n = 0.7$, (c) $n = 0.5$ and (d) $n = 0.3$	253
Figure E.14	xy -plane velocity profile with streamlines (in white) around spherical particle (in turquoise) for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = 0.3$ using the Carreau model with $\Lambda = \{0.4, 4\}$	255
Figure E.15	Drag coefficient correction factors (X in $C_D = \frac{24}{\text{Re}}X$) at $\text{Re} = 0.1$ simulated in Lethe using the Carreau model as a function of the dimensionless relaxation time Λ , compared to experimental data provided by Chhabra and Uhlherr [37] in the creeping flow regime.	256

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Pour des raisons de consistance avec les articles présentés en anglais, les abréviations sont aussi en anglais dans cette thèse.

Abréviations :

BDF	<i>Backward Differentiation Formulation</i>
CFD	<i>computational fluide dynamique</i>
CPU	<i>Central processing Unit</i>
DEM	<i>Discrete element method</i>
DKT	<i>drafting, kissing, thumbing</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
GLS	<i>Galerkin Least Square</i>
GMRES	<i>Generalized minimal residual method</i>
IB	<i>Immersed Boundary</i>
IBM	<i>Immersed Boundary Method</i>
ILU	<i>Incomplete Lower Upper</i>
LBB	<i>Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi</i>
MMS	<i>Method of Manufactured Solution</i>
NSERC	<i>National Science and Engineering Research Council of Canada</i>
ODE	<i>Ordinary Differential Equation</i>
PSPG	<i>Pressure-stabilizing Petrov–Galerkin</i>
RMSE	<i>Root Mean Squared Error</i>
SUPG	<i>Streamline upwind Petrov–Galerkin</i>

Sigles :

A_f	amplitude d'oscillation de la force
A_p	surface de référence pour une particule
α	rapport de vitesse angulaire sur la vitesse de translation
α^v	coefficient de relaxation pour la méthode de point fixe accéléré pour l'intégrale de la vitesse
α^ω	coefficient de relaxation pour la méthode de point fixe accéléré pour l'intégrale de la vitesse angulaire

a_i	coefficient des degrés de libertés
a_s^i	coefficient pour l'extrapolation polynomial
Ar	nombre d'Archimède
C_d	coefficient de traînée
C_l	coefficient de portance
d	degré de liberté manipulé
d_p	diamètre d'une particule
D_x	dispersion des particules en x
e_u	erreur sur le champ de vitesse
e_p	erreur sur le champ de pression
ϵ_f	fraction volumique de fluide
f	fréquence de relâchement de tourbillons
f^c	force de contact particule-particule
f^d	force de traînée sur une particule
f^f	force du fluide sur une particule
f^h	force d'histoire
f^l	force de portance sur une particule
f^{lub}	force de lubrification
f^{mag}	force de Magnus
$f^{\nabla p}$	force de pression non perturbée
f^{saf}	norme de la force de Saffman
f^τ	force de contraintes visqueuses non perturbée
f^v	force de masse virtuel
f_{ext}	champ de forces externes
f^w	force de contact particule-mur
γ	terme de forçage à la frontière
g	norme de l'accélération gravitationnelle
$\mathbf{g}$	accélération gravitationnelle
Γ	Surface d'une particule ou frontière
h	distance entre une particule et une paroi
I_i	inertie angulaire d'une particule sphérique
$\mathbf{I}$	impulsion de contact translationnel
$\mathbf{J}$	impulsion de contact angulaire
k_n	constante de ressort normal du modèle de contact
k_t	constante de ressort tangentiel du modèle de contact
l_r	longueur de référence

λ	multiplicateur de Lagrange
m_i	masse d'une particule
m_r	masse de référence
μ_f	viscosité du fluide
n_b	nombre de particules
$\mathbf{n}$	normal unitaire
ν	viscosité cinématique
Ω	domaine de calcul
Ω_γ	cellules intersecté par Γ
Ω_E	domaine de calcul effectif
$\Phi(\mathbf{x})$	fonction distance signé
ϕ	coordonnée azimuthal
ϕ_u	fonction test pour l'équation de conservation de quantité de mouvement
ϕ_q	fonction test pour l'équation de continuité
p	champ de pression
$\mathbf{p}$	le centre d'une particule
$\mathbf{R}^v$	Vecteur résidu pour l'intégrale de la vitesse
$\mathbf{R}^\omega$	Vecteur résidu pour l'intégrale de la vitesse angulaire
Re	nombre de Reynolds
ρ_f	densité du fluide
ρ_p	densité d'une particule
r	coordonnée radial
$s(\mathbf{x})$	fonction d'extrapolation proche de la frontière
$\mathbf{S}$	terme source de quantité de mouvement
St	nombre de Strouhal
t	temps
t_r	temps de référence
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuses
τ_f	temps de réponse d'un écoulement de fluide
τ_c	temps caractéristique de contact entre particule
τ_u	coefficient de stabilisation
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuses
$\mathbf{T}^c$	couple de contact particule-particule
$\mathbf{T}^f$	couple du au fluide sur une particule
$\mathbf{T}^{lub}$	couple de lubrification
$\mathbf{T}^w$	couple de contact particule-mur

θ	coordonnée polaire
σ	tenseur de contraintes
τ_u	coefficient de stabilisation
$\mathbf{u}$	champ de vitesse du fluide
u_r	composante radial du champ de vitesse du fluide
u_θ	composante polaire du champ de vitesse du fluide
u_ϕ	composante azimuthal du champ de vitesse du fluide
u_∞	norm de la vitesse du fluide loin d'une particule
$\mathbf{v}$	vitesse d'une particule
$\mathbf{V}$	Matrice de Vandermonde
V_p	volume d'une particule
V_f	volume de fluide dans un domaine
V_{total}	volume total d'un domaine
ω	vitesse angulaire d'une particule
$\mathbf{x}$	un point
$\mathbf{x}_d$	position d'un degré de liberté manipulé
$\mathbf{x}_\gamma$	point sur la frontière Γ
$\mathbf{x}_n$	point le long de la normale à la frontière Γ
Δx	taille de la discrétisation de l'espace
Δt	taille de la discrétisation temporel
η_n	contante d'amortissement normal du modèle de contact
η_t	contante d'amortissement tangentiel du modèle de contact
δ_n	chevauchement normal du modèle de contact
δ_t	chevauchement tangentiel du modèle de contact

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	STABILITY OF THE SCHEME FOR A LOW PARTICLE TO FLUID DENSITY RATIO	193
Annexe B	FORCE MODELS DETAILS	195
Annexe C	FLUID RESPONSE TIME	206
Annexe D	ARTICLE 4 : ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO PREDICT THE POWER NUMBER OF AGITATED TANKS FED BY CFD SI- MULATIONS	207
Annexe E	ARTICLE 5 : AN EXTENSIVE STUDY OF SHEAR THINNING FLOW AROUND A SPHERICAL PARTICLE FOR POWER-LAW AND CARREAU FLUIDS	228

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

L'interaction entre un fluide et des structures solides est au cœur d'une large gamme de procédés. Dans le cadre de l'industrie chimique, plus de 40% de la valeur ajoutée est associée à des procédés impliquant des particules solides en interaction avec un fluide [38]. À titre d'exemple, les opérations de séchage par atomisation (*spray drying*), les opérations de séparation (telles que les séparateurs de type cyclone), les réactions en lits fluidisés, et les opérations de transport de particules par fluide (*slurry transport*) impliquent toutes une interaction entre particules et fluide. La dynamique de ces systèmes est en partie caractérisée par les interactions entre le fluide et les particules solides. La taille caractéristique de certains systèmes peut dépasser 10 mètres, tandis que les particules utilisées peuvent être de taille inférieure à un millimètre [5]. On qualifie alors ces systèmes de multi-échelles. En effet, dans ces systèmes, la dynamique de l'écoulement à l'échelle des particules a un impact sur la formation de structures à plus grande échelle (vortex, nuages de particules, etc.) [39]. Même avec toutes les ressources de calcul disponibles aujourd'hui, il reste impossible de résoudre simultanément toutes les échelles d'un tel système. Le coût de calcul serait trop élevé pour les infrastructures informatiques modernes, et il est probable que cette situation perdure encore longtemps [12].

Pourtant, la modélisation numérique de tels systèmes est aujourd'hui un aspect important de leur développement. Or, cela est uniquement possible par la modélisation d'une certaine échelle de l'interaction entre le fluide et les particules solides à l'aide de modèles de fermeture. La taille du système et le nombre de particules déterminent l'échelle à laquelle les interactions entre les particules et le fluide sont modélisées par un modèle de fermeture ainsi que l'approche de modélisation numérique utilisée. Il existe trois grandes approches pour simuler les interactions entre un fluide et des particules solides.

Lorsque les particules sont représentées individuellement, on utilise une méthode de dynamique des fluides numérique, généralement appelée en anglais *Computational Fluid Dynamics (CFD)*, combinée avec une méthode des éléments discrets, généralement appelée en anglais *Discrete Element Method (DEM)* (CFD-DEM). Lorsque les particules ne sont pas suivies individuellement, on adopte une approche à deux fluides (*Two-fluid model*). L'approche CFD-DEM se divise en deux branches de méthodes, résolue et non résolue, qui dépendent de la taille et des caractéristiques du système étudié. Chaque taille de système est associée à une méthode de modélisation qui représente un compromis entre le temps de calcul et la précision obtenue. L'approche CFD-DEM résolue représente directement les particules dans la discrét-

tisation du fluide, tandis que l'approche non résolue représente indirectement les particules par l'utilisation de la fraction volumique de fluide dans un volume de contrôle, complétée par un modèle de fermeture pour l'interaction fluide-particule [40]. L'approche deux fluides, quant à elle, représente les particules à l'aide d'une approche Eulerienne en les modélisant comme un continuum ayant des propriétés propres aux types de particules. Ces particules sont représentées dans le fluide à l'aide de la fraction volumique de fluide. La figure 1.1 illustre pour chacune de ces trois approches de modélisation l'échelle de l'interaction fluide-particule qu'elles peuvent résoudre et celle modélisée par des modèles de fermeture.

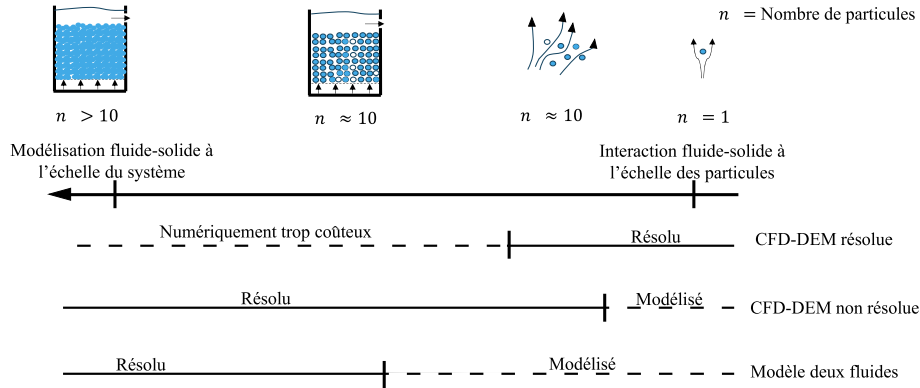


FIGURE 1.1 Diagramme des méthodes de modélisation et de l'échelle de résolution de l'interaction entre les particules et le fluide. Cette figure est inspirée du travail de Bakker pour la séparation des approches numériques pour la modélisation de la turbulence [4].

La modélisation de systèmes industriels repose sur l'utilisation de modèles de fermeture pour modéliser les interactions fluides solides à l'échelle des particules. La dérivation de modèles de fermeture de manière analytique n'est généralement pas possible, car le nombre de Reynolds des particules est souvent supérieur à 1 [39]. Cela implique que les modèles de fermeture sont élaborés soit à partir de résultats expérimentaux, soit à partir de simulations numériques à l'échelle des particules. Avec l'augmentation des capacités de calcul des infrastructures informatiques modernes, les corrélations sont de plus en plus fréquemment obtenues à partir de la modélisation des interactions fluide-particule à l'échelle des particules. Ces simulations

permettent une mesure directe de la force exercée sur chacune des particules, facilitant ainsi la définition de corrélations de plus en plus précises [39].

Cette relation entre les modèles de grande échelle et les modèles de petite échelle est illustrée à la figure 1.2. Cette figure montre que les approches de modélisation à l'échelle des particules sont utilisées pour extraire les informations nécessaires à la définition des modèles de fermeture, requis pour la modélisation de systèmes de taille industrielle. De plus, la modélisation de l'écoulement à l'échelle des particules permet de comprendre les phénomènes spécifiques aux régimes d'écoulement fluide-solide étudiés. Cela contribue à une meilleure capacité de modélisation macroscopique de systèmes industriels, mais aussi à une meilleure compréhension des phénomènes observés dans la nature.

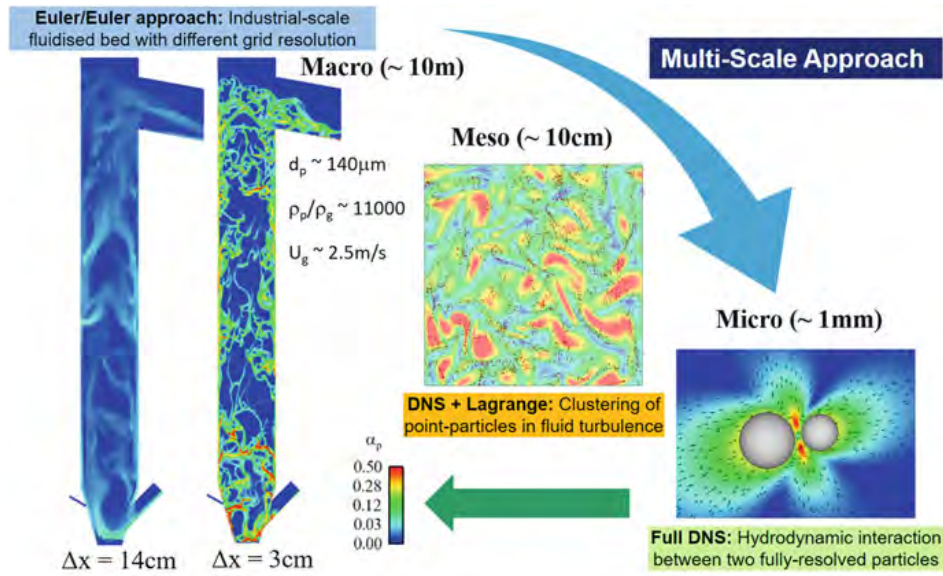


FIGURE 1.2 Visualisation des différentes échelles pouvant être utilisées pour modéliser l'interaction de particules avec un fluide. À gauche, la modélisation d'un système de grande taille où la modélisation directe de l'ensemble des particules est impossible. Au centre la modélisation d'un écoulement avec des particules ou l'écoulement est approximée autour des particules par des modèles de fermeture. À droite, modélisation directe de l'écoulement autour des particules permettant d'étudier directement leur interaction. Tiré de [5].

Toutefois, la modélisation des écoulements à l'échelle des particules n'est pas sans compromis entre la précision et le temps de calcul [41]. La résolution dans la modélisation des particules influe significativement sur la précision de l'évaluation des variables d'intérêt (telles que la force exercée sur une particule). Améliorer les méthodes de modélisation fluide-solide est donc un sujet de recherche actif, visant à accroître la précision de ces simulations et, par conséquent, la fiabilité des modèles de fermeture qui peuvent en être déduits. Cette thèse

visé ainsi à introduire une approche de modélisation d'écoulement fluide-solide à l'échelle des particules afin d'étudier leurs interactions hydrodynamiques et de faciliter l'étude des modèles de fermeture.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Dans cette thèse, une particule est définie comme un objet sphérique non déformable et dont le mouvement brownien est négligeable [42]. On suppose que la taille est suffisamment grande pour que les effets de Van der Waals soient négligeables. Les fluides considérés sont limités à des fluides newtoniens incompressibles.

2.1 Hydrodynamique d'une particule seule

L'écoulement d'un fluide autour d'une sphère isolée a été largement étudié depuis plusieurs siècles. De nombreux résultats et questions ont découlé de l'étude de l'écoulement d'un fluide autour d'une sphère. Un exemple de résultat ayant longtemps suscité d'importantes interrogations chez les spécialistes est le paradoxe d'Alembert [43]. Ce paradoxe, proposé par d'Alembert en 1752, résulte de l'étude de l'écoulement à vitesse constante d'un fluide parfait, c'est-à-dire incompressible et sans viscosité, autour d'une sphère. Dans cette configuration, la force exercée sur la sphère est nulle, ce qui contredit les résultats expérimentaux observés pour des écoulements de fluide à des nombres de Reynolds très élevés. Ce n'est qu'en 2010 que Hoffman et Johnson [44] ont proposé une solution à ce paradoxe en démontrant que l'écoulement d'un fluide parfait n'est pas correctement défini et qu'il est instable en présence de perturbations.

Aujourd'hui, le principal modèle mathématique pour étudier l'écoulement de fluide dans la plupart des situations courantes utilise les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \mathbf{u}) + \rho_f(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_{\text{ext}} \quad (2.2)$$

où

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_f(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (2.3)$$

et la condition de non-glissement à la surface de la sphère (Γ_p)

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{p}) \quad \text{sur } \Gamma_p. \quad (2.4)$$

Il est important de noter que l'hypothèse d'incompressibilité est valable uniquement lorsque la norme de la vitesse de l'écoulement du fluide est significativement inférieure à la vitesse du son (c) dans le fluide ($\text{Ma}^2 = \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{c^2} < 0.1$) [45]. Les équations (2.1), (2.2) et (2.3) présentent la formulation classique de ce modèle mathématique. Cette formulation de la dynamique des fluides combine les forces inertielles et visqueuses. Le rapport de ces forces est caractérisé par un nombre adimensionnel bien connu : le nombre de Reynolds. Pour l'écoulement autour d'une particule sphérique, le nombre de Reynolds est généralement défini par l'équation (2.5).

$$\text{Re} = \frac{\rho_f d_p \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|}{\mu_f} \quad (2.5)$$

Dans les équations (2.1) à (2.5) : ρ_f est la densité du fluide, μ_f la viscosité du fluide, d_p le diamètre de la particule, $\mathbf{u}$ le champ de vitesse de l'écoulement, $\mathbf{v}$ la vitesse de la particule, $\boldsymbol{\omega}$ la vitesse angulaire de la particule, $\mathbf{p}$ la position du centroïde de la particule, p le champ de pression, $\mathbf{f}_{\text{ext}}$ un champ de forces externes appliquées sur le fluide (typiquement la gravité) et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses. Ces variables ont la même signification dans le reste de la thèse.

Généralement, la force totale de fluide appliquée à un objet, notée $\mathbf{f}^f$, est divisée en deux composantes : la force de traînée $\mathbf{f}^d$ et la force de portance $\mathbf{f}^l$. Chacune de ces composantes est associée à un coefficient spécifique, soit le coefficient de traînée (C_d) et le coefficient de portance (C_l). La force de traînée est définie comme étant colinéaire à l'écoulement du fluide, tandis que la force de portance est perpendiculaire à celui-ci :

$$\mathbf{f}^d = \frac{1}{2} \rho_f A_p C_d \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (2.6)$$

$$\mathbf{f}^l = \mathbf{f}^f - \mathbf{f}^d = \frac{1}{2} \rho_f A_p C_l \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 \mathbf{l}. \quad (2.7)$$

Dans les équations (2.6) et (2.7), A_p représente l'aire de référence de l'objet par rapport à l'écoulement [46], et $\mathbf{l}$ est un vecteur unitaire colinéaire à $\mathbf{f} - \mathbf{f}^d$.

2.1.1 Régime d'écoulement autour d'une sphère

L'écoulement d'un fluide à vitesse constante autour d'une sphère isolée est bien établi dans la littérature. Neuf régimes d'écoulement autour d'une sphère ont été identifiés [47]. Les régimes d'écoulement permettent d'associer une plage du nombre de Reynolds auquel sont associées certaines caractéristiques de l'écoulement de fluide autour de la sphère. La figure 2.1 présente la variation du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds ainsi que les divers

régimes d'écoulement qui seront abordés. À noter que ces régimes d'écoulement sont pour une sphère fixe.

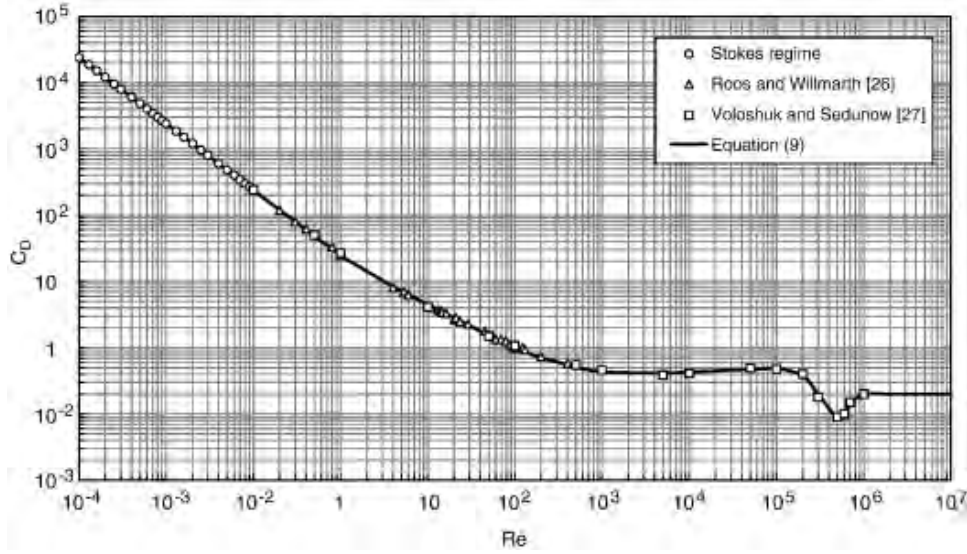


FIGURE 2.1 Évolution du coefficient de traînée moyenne d'une sphère seule en fonction du nombre de Reynolds. Tiré de [6].

Écoulement rampant

Ce régime d'écoulement laminaire est caractérisé par l'absence d'une zone de recirculation en aval de la sphère. De plus, ce régime d'écoulement est l'un des deux régimes pour lequel une solution analytique existe. En effet, George Gabriel Stokes a proposé en 1851 une solution pour décrire l'écoulement d'un fluide autour d'une sphère, dans le cas où l'écoulement peut être caractérisé comme rampant (les forces internes au fluide dues à l'inertie de celui-ci sont négligeables) [46, 48]. En utilisant un système de coordonnées sphériques centré sur la particule (r rayon, θ l'angle polaire, ϕ l'angle azimutal) l'écoulement autour d'une sphère est décrit par :

$$u_r = -u_\infty \cos \theta \left(1 - \frac{3d_p}{4r} + \frac{d_p^3}{16r^3} \right) \quad (2.8)$$

$$u_\theta = -u_\infty \sin \theta \left(1 - \frac{3d_p}{8r} + \frac{d_p^3}{32r^3} \right). \quad (2.9)$$

L'écoulement est symétrique et nul en ϕ , seule la vitesse selon la coordonnée r , u_r et la vitesse selon la coordonnée θ , u_θ sont données. u_∞ est la norme de la vitesse de l'écoulement loin en amont de la particule. d_p est le diamètre de la particule.

Cette solution devient de plus en plus approximative à mesure que le nombre de Reynolds augmente. En effet, ce modèle présume que les lignes de courant divergent en amont de la sphère au même rythme qu'elles convergent en aval. Ce qui n'est pas le cas pour des écoulements où la valeur du nombre de Reynolds est supérieure à 0.1. Dans le régime de Stokes, la force hydrodynamique subie par une sphère dans un écoulement à vitesse constante est donnée par :

$$\mathbf{f}^d = 3\pi\mu_f d_p(\mathbf{u} - \mathbf{v}). \quad (2.10)$$

À partir de la définition du nombre de Reynolds, il est possible d'isoler le coefficient de traînée pour une sphère et d'obtenir la relation suivante :

$$C_d = \frac{24}{\text{Re}}. \quad (2.11)$$

Écoulement axisymétrique

Ce régime d'écoulement est encore considéré comme laminaire. Toutefois, dans ce régime, l'écoulement présente généralement une différence significative entre la divergence des lignes de courant en amont de la sphère et la convergence de celles-ci en aval. Pour un nombre de Reynolds inférieur à 20, aucune zone de recirculation n'est présente. Cependant, pour un écoulement avec un nombre de Reynolds supérieur à 20, une zone de recirculation apparaît, accompagnée d'une réduction de l'impact du nombre de Reynolds sur le coefficient de traînée. Ce régime d'écoulement autour d'une sphère est observé pour des valeurs du nombre de Reynolds supérieures à 0.1 et inférieures à 210 [47].

Écoulement avec instabilité planaire

Ce régime d'écoulement est caractérisé par l'apparition d'une instabilité dans la zone de recirculation. Cette instabilité reste confinée dans un plan et prend la forme de deux vortex dont la rotation est inverse par rapport à l'autre. Cette instabilité reste relativement stable et ne varie pas avec le temps [7]. La figure 2.2 présente une visualisation expérimentale de la traînée derrière une sphère pour une valeur du nombre de Reynolds allant de 262 à 276. Dans cette figure, pour un nombre de Reynolds de 262, on observe la présence de deux tourbillons stables dans le temps. En outre, on peut voir l'apparition du décollement des tourbillons en aval de la sphère autour d'un nombre de Reynolds de 270. Ce régime d'écoulement est observable expérimentalement pour des valeurs du nombre de Reynolds allant de 210 à 270. Ce régime est le dernier dans lequel les forces de traînée et de portance sont constantes dans le temps [47].

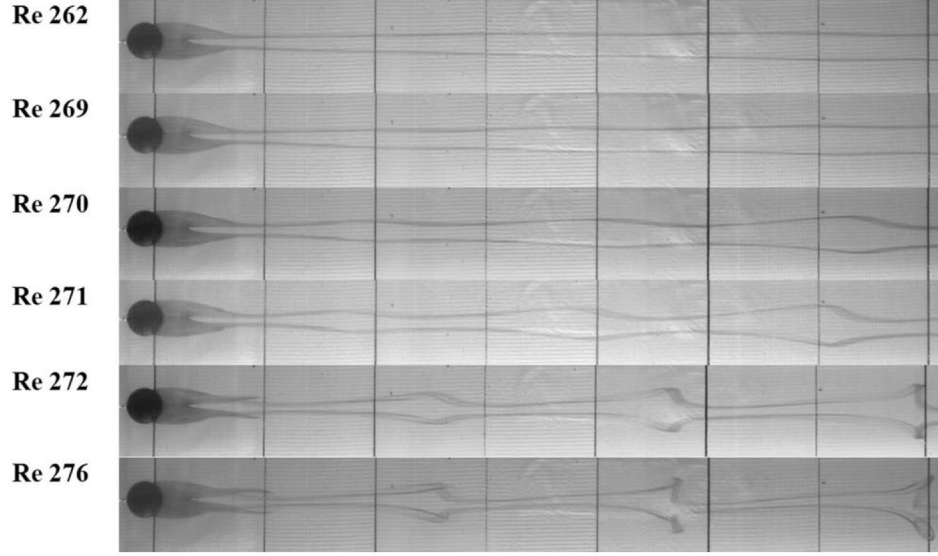


FIGURE 2.2 Apparition d'instabilité temporelle dans le sillage derrière une sphère. Tiré de [7].

Écoulement avec décollement de tourbillons

Ce régime d'écoulement est caractérisé par le décollement de tourbillons en aval de la sphère à une fréquence donnée. Ce décollement de tourbillons prend la forme d'un beigne (le terme *hairpin* est souvent utilisé dans la littérature pour les désigner). Cette périodicité mène à l'apparition d'une portance et d'une traînée variables dans le temps. La figure 2.2 montre pour un nombre de Reynolds de 276 la présence de ces tourbillons en forme de beigne. Ce régime d'écoulement semble stable pour des valeurs du nombre de Reynolds inférieures à 650 [47]. Toutefois, certains résultats expérimentaux montrent l'apparition d'un décollement non rectiligne des tourbillons pour un nombre de Reynolds supérieur à 420 [8]. Cela indique que le décollement des tourbillons produit une alternance dans la direction des tourbillons. Ce lâcher de tourbillons est associé au nombre de Strouhal défini par :

$$St = \frac{f d_p}{\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|} \quad (2.12)$$

Dans cette équation (2.12), f est la fréquence de relâchement des tourbillons. À noter que la fréquence de décollement des tourbillons pour des nombres de Reynolds compris entre 650 et 800 n'est plus parfaitement constante [8]. Le régime d'écoulement avec décollement de tourbillons présente donc une transition vers un régime turbulent.

Écoulement avec décollement de tourbillons sous forme de tube

Ce régime d'écoulement est caractérisé par l'apparition de vortex en forme de tube combinée aux vortex qui se détachent de manière régulière à la surface de la sphère. Ceci mène à l'interaction entre deux types de vortex de tailles différentes en aval de la sphère. En raison de cette interaction, des vortex à petite échelle se développent et affectent les vortex de plus grande échelle, accélérant leur dissipation [8]. La figure 2.3 présente cette dispersion rapide de la structure des vortex en aval de la sphère. La structure principale des vortex reste dominante et il est possible de déterminer un nombre de Strouhal pour ces écoulements. Toutefois, cette structure présente deux modes principaux pour lesquels il est possible de définir deux nombres de Strouhal. La figure 2.4 illustre la bifurcation du nombre de Strouhal pour un écoulement ayant un nombre de Reynolds supérieur à 800. L'apparition d'un second mode est due à la manifestation d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz dans le sillage de la sphère. Cette explication pour l'apparition d'un second mode a été proposée par Kim et Durbin [49]. L'écoulement conserve des propriétés similaires jusqu'à un nombre de Reynolds d'environ 3000. Dans la plage de nombres de Reynolds allant de 800 à 3000, le coefficient de traînée moyen dans le temps de la sphère se stabilise et ne diminue plus.



FIGURE 2.3 Apparition d'instabilités de Kelvin-Helmholtz dans le sillage d'une sphère pour un nombre de Reynolds supérieur à 800. Tiré de [8].

Écoulement sous-critique

Ce régime d'écoulement se caractérise par l'apparition de turbulence dans les vortex en forme de tube [8]. L'écoulement de ces vortex devient donc complètement turbulent au moment où ils sont relâchés en aval de la sphère. La fréquence de décollement du vortex principal diminue également de manière significative. En effet, la dissipation de l'énergie à petite échelle, occasionnée par l'apparition de la turbulence, serait la cause de cette diminution de fréquence [47]. Ce régime d'écoulement peut être observé pour des nombres de Reynolds allant de $3 \cdot 10^3$ à environ $3.4 \cdot 10^5$. À l'intérieur de cette gamme de nombres de Reynolds, le coefficient de traînée augmente légèrement.

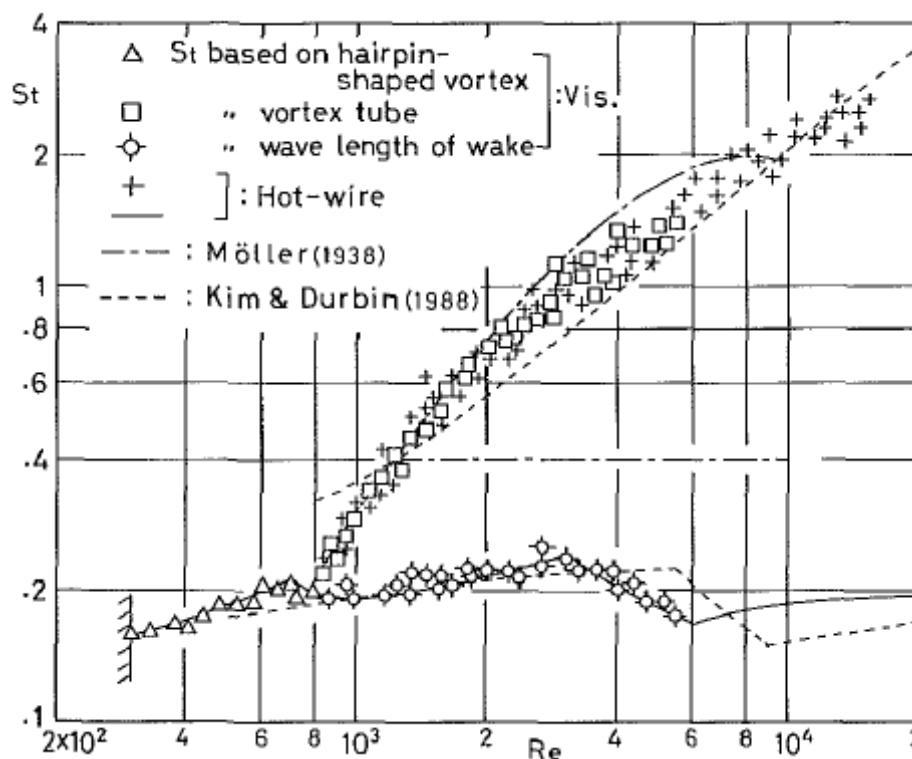


FIGURE 2.4 Apparition d'un second mode pour la formation des vortex principaux dans le sillage d'une sphère pour un nombre de Reynolds supérieur à 800. Tiré de [8].

Écoulement critique

Ce régime d'écoulement est caractérisé par le passage à un régime turbulent de la zone de recirculation en aval de la sphère avant qu'elle se détache de celle-ci. Ce passage à un régime turbulent déplace le point de séparation de la couche limite à l'arrière de la sphère, à un angle d'environ 82 degrés par rapport au point de stagnation arrière de la sphère. En comparaison, avant le passage à un régime turbulent de la couche limite, le point de décollement est d'environ 132 degrés par rapport au point de stagnation arrière de la sphère [50]. La figure 2.5 illustre le passage d'un régime sous-critique à un régime critique, puis à un régime supercritique de l'écoulement autour d'une sphère. Cette figure met aussi en évidence la disparition des vortex principaux dans le sillage de la sphère, accompagnée d'une diminution importante du coefficient de traînée, qui passe d'environ 0,5 à environ 0,1. Cette brusque diminution est due à la forte réduction de la taille de la zone de recirculation en aval de la sphère. C'est pour un écoulement critique avec un nombre de Reynolds d'environ $3.7 \cdot 10^5$ que le coefficient de traînée atteint son point le plus bas, à une valeur d'environ 0,1. Cette phase de transition critique se produit pour des nombres de Reynolds compris entre

$3.4 \cdot 10^5$ et $4.4 \cdot 10^5$ [47].

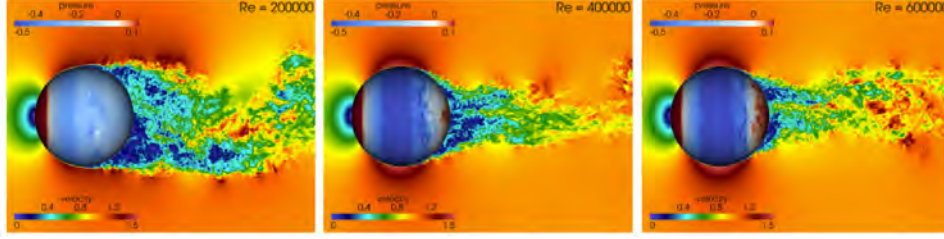


FIGURE 2.5 Passage du régime sous-critique de l'écoulement autour d'une sphère à un écoulement supercritique. Tiré de [9].

Écoulement supercritique

Cet écoulement est caractérisé par une nouvelle augmentation du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds et par le déplacement du point de décollement de la couche limite de plus en plus vers l'arrière de la sphère [47]. Cette augmentation du coefficient de traînée continue jusqu'à atteindre un nombre de Reynolds d'environ $1.5 \cdot 10^6$.

Écoulement transcritique

Cet écoulement est caractérisé par un angle de séparation de la couche limite ainsi qu'un coefficient de traînée indépendants du nombre de Reynolds. L'angle de séparation prend alors une valeur d'environ 55 degrés et le coefficient de traînée une valeur d'environ 0.19 [51].

2.1.2 Forces appliquées sur une particule

Les forces de traînée et de portance définies précédemment aux équations (2.6) et (2.7) ne sont pas les seules forces qui découlent de l'interaction solide-liquide d'une particule. Plusieurs autres forces peuvent s'appliquer sur une particule selon les circonstances entourant l'écoulement de fluide. Les forces subies par les particules peuvent donc se définir en fonction des diverses caractéristiques de l'écoulement du fluide dans lequel elles évoluent ainsi que la dynamique de la particule en soi (e.g la rotation de la particule sur elle-même, la présence d'un gradient de vitesse dans l'écoulement en amont de la particule, etc.).

Force de traînée

La force de traînée, présentée précédemment, est l'une des plus importantes. Elle résulte d'une différence de vitesse entre une particule et le fluide environnant. Cette force domine

généralement la dynamique d'une particule immergée lorsqu'elle est en mouvement de translation. Comme mentionné à la Section 2.1.1, cette force varie significativement en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement. La figure 2.1 présente le coefficient de traînée moyen en fonction du nombre de Reynolds. En effet, la force de traînée appliquée à une sphère n'est pas constante et varie pour des nombres de Reynolds supérieurs à 270, en raison du décrochage alternatif des vortex en aval de la sphère. Le coefficient de traînée est obtenu à partir de l'équation (2.6). Différents modèles existent pour décrire la force de traînée sur une particule ; ils seront abordés plus en détail dans la Section 2.4.3. Il convient cependant de rappeler la formule de la force de traînée sur une sphère dans le cas d'un écoulement rampant, présentée à l'équation (2.10).

Force de Magnus

Cette force résulte de la combinaison de la rotation d'une particule sur elle-même et de son mouvement de translation par rapport au fluide environnant. La distribution de vitesse non uniforme de l'écoulement autour d'une particule en rotation génère une force de portance. L'effet de la force de Magnus varie selon deux paramètres importants : le nombre de Reynolds et α , le rapport entre la vitesse de rotation de la surface de la particule et la vitesse de translation de la particule par rapport au fluide.

$$\alpha = \frac{||\boldsymbol{\omega}||d_p}{2||\mathbf{u} - \mathbf{v}||} \quad (2.13)$$

Dans cette équation (2.13), $\boldsymbol{\omega}$ est le vecteur représentant la vitesse angulaire de la particule.

La force de Magnus peut induire une portance positive ou négative selon la valeur des paramètres. La portance est considérée comme positive lorsque sa direction est la même que celle du vecteur $(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \times \boldsymbol{\omega}$, comme illustré à la figure 2.6 (A). La force de Magnus est qualifiée d'inverse lorsqu'elle produit une portance négative. Cette inversion de la portance, observée pour certaines valeurs du nombre de Reynolds et de α , est due au déplacement du point de séparation de la couche limite sur la surface de la sphère qui se déplace le plus rapidement par rapport au fluide. Ce déplacement brusque du point de séparation est provoqué par l'apparition l'instabilités dans la couche limite de la surface en mouvement accéléré [52]. La figure 2.6 illustre la variation de la force de Magnus et de la traînée appliquées à une sphère en fonction du nombre de Reynolds et de α , ainsi que la gamme de valeurs pour lesquelles la force de Magnus est inversée. Loth [53] propose le modèle suivant pour la force de Magnus :

$$\Omega^* = \frac{||\boldsymbol{\omega}||d_p}{||\mathbf{u} - \mathbf{v}||} \quad (2.14)$$

$$C_{l,\Omega} = 1 - [0.675 + 0.15 (1 + \tanh(0.28(\Omega^* - 2)))] \quad (2.15)$$

$$\mathbf{f}^{mag} = \frac{\pi}{8} d_p^3 \rho_f [C_{l,\Omega}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \times \boldsymbol{\omega}] \quad (2.16)$$

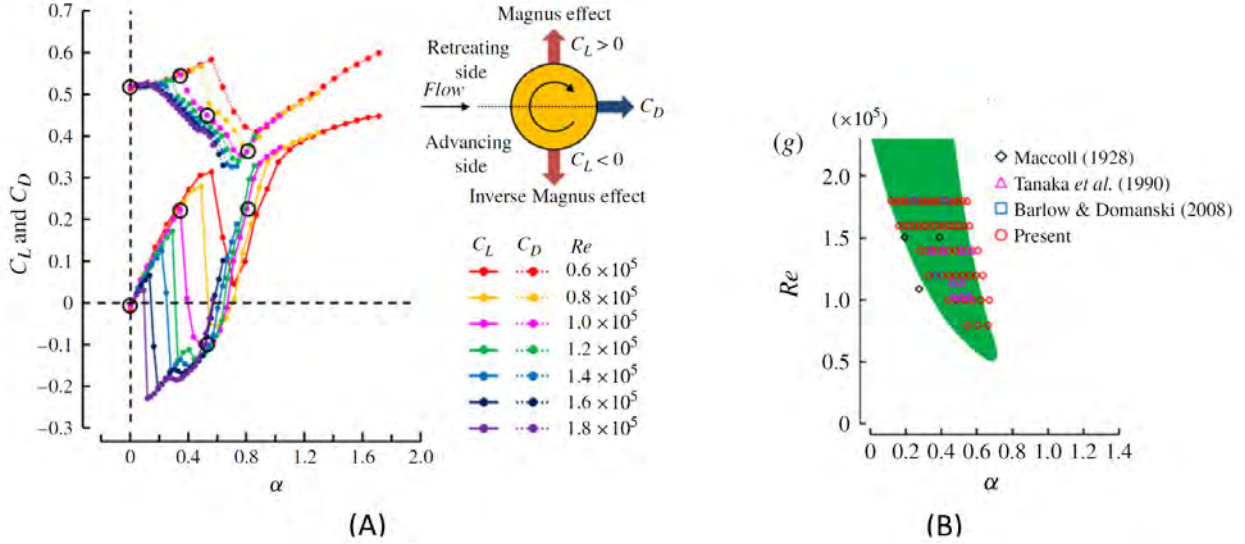


FIGURE 2.6 Évolution du coefficient de traînée moyen ainsi que de la portance moyenne en fonction du nombre de Reynolds et de α . (A) présente la variation du coefficient de traînée et de portance en fonction de α , (B) présente la plage de valeurs de Re et α (en vert) pour lequel l'effet de Magnus s'inverse. Tiré de [52]

Force de masse virtuelle

Cette force provient de l'accélération d'une particule relativement au fluide qui l'entoure. Le fluide à proximité de la particule devant également accélérer, son inertie s'oppose donc à l'accélération de la particule. Cette force est particulièrement dominante dans les cas où la densité du fluide ρ_f est beaucoup plus élevée que celle de la particule ρ_p . La force appliquée sur la particule est donc généralement proportionnelle à la force nécessaire pour accélérer une fraction de la masse de fluide déplacé par la particule. Cette fraction de la masse de fluide déplacé par la particule, que celle-ci doit accélérer, est appelée coefficient de masse virtuelle. La définition de ce coefficient dans le cas d'une sphère peut être obtenue à l'aide d'écoulements potentiels [54, 55]. Pour une particule sphérique isolée, la valeur du coefficient de masse virtuelle est de 0.5. Cette valeur pour la masse virtuelle d'une particule sphérique

a été vérifiée expérimentalement par Kendoush *et al.* [56] et numériquement par Simcik *et al.* [57]. Cette force s'exprime donc par :

$$\mathbf{f}^v = C_m \frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_f \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \quad (2.17)$$

Le coefficient de masse virtuelle (C_m), toutefois, change de valeur à l'approche d'une paroi. Le volume de fluide qui doit être déplacé est modifié en raison de la présence de la paroi. Simcik *et al.* proposent la corrélation suivante pour définir le coefficient de masse virtuelle :

$$C_m = \frac{(C_{pe} - C_{pa})}{2} \cos(2\theta) + \frac{(C_{pe} + C_{pa})}{2} \quad (2.18)$$

$$C_{pe} = 0.5 \left(1 + \frac{3d_p^3}{16h^3} \right) \quad (2.19)$$

$$C_{pa} = 0.5 \left(1 + \frac{3d_p^3}{32h^3} \right) \quad (2.20)$$

Dans les équations (2.18), (2.19) et (2.20), h représente la distance entre le centre de la particule et la paroi, et θ est l'angle entre la normale à la paroi et la direction de l'accélération de la particule. C_{pe} et C_{pa} correspondent respectivement aux coefficients de masse virtuelle associés à une accélération perpendiculaire et parallèle à la disposition de la particule relativement à la paroi.

Force de Saffman

Cette force correspond à la force exercée sur une particule lorsqu'il existe un gradient de vitesse en amont de celle-ci. Elle se manifeste typiquement quand la particule est à proximité d'une paroi ou lorsqu'une couche limite génère un gradient de vitesse dans l'écoulement. Saffman a dérivé en 1965 une expression de cette force pour un écoulement à faible nombre de Reynolds ($Re < 1$) [58] :

$$f^{saf} = 1.61 \sqrt{\mu_f \rho_f} d_p^2 \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| \sqrt{\left| \frac{\partial \|\mathbf{u}\|}{\partial y} \right|} \text{sign} \left(\frac{\partial \|\mathbf{u}\|}{\partial y} \right) \quad (2.21)$$

Dans l'équation (2.21), la force est coaxiale avec le gradient de vitesse de l'écoulement. Pour simplifier, le gradient est considéré coaxial avec l'axe y . Saffman a précisé dans ses travaux que cette force subie par la particule est de nature inertielle et non visqueuse. L'analyse de

cette force est réalisée en supposant que la particule n'est pas en rotation. Toutefois, il est important de noter que cette force est souvent accompagnée par la rotation de la particule lorsqu'elle est libre, en raison du gradient de force visqueuse qui lui est appliqué. De plus, Saffman a souligné que pour un écoulement à faible nombre de Reynolds, cette force est nettement supérieure à la force de Magnus et serait la cause principale de l'écartement d'une particule d'une paroi lorsqu'elle se trouve dans la couche limite de cette dernière.

En complément au modèle proposé par Saffman dans l'équation (2.21), Mei a suggéré deux autres modèles pour la force de portance de Saffman : un applicable aux écoulements avec un nombre de Reynolds inférieur à 40 et un autre pour les écoulements avec un nombre de Reynolds supérieur à 40 [59]. Ces modèles sont définis dans les équations (2.22), (2.23), (2.24) et (2.25).

$$f^{saf} = C_S 1.61 \sqrt{\mu_f \rho_f} d_p^2 \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| \sqrt{\left| \frac{\partial \|\mathbf{u}\|}{\partial y} \right|} \text{sign}\left(\frac{\partial \|\mathbf{u}\|}{\partial y}\right) \quad (2.22)$$

où, pour $Re < 40$

$$C_S = (1 - 0.3314\sqrt{\beta})e^{-\frac{Re}{10}} + 0.3314\sqrt{\beta} \quad (2.23)$$

pour $Re > 40$

$$C_S = 0.0524\sqrt{\beta Re} \quad (2.24)$$

et

$$\beta = \frac{d_p}{2\|\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_i\|} \left| \frac{\partial \|\mathbf{u}\|}{\partial y} \right| \quad (2.25)$$

Force d'histoire

Cette force correspond à la force nécessaire pour accélérer la couche limite d'une particule. Lors de l'accélération d'une particule, la couche limite s'ajuste également. Cet ajustement n'est pas instantané et présente un certain retard. Elle engendre donc l'intégrale de la différence de vitesse entre le fluide et la particule au cours du temps. Cette force a été isolée de manière indépendante pour la première fois par Boussinesq et Basset, respectivement en 1885 et 1888 [60,61]. Leur solution repose sur l'extension de la solution de Stokes pour l'écoulement autour d'une sphère à faible nombre de Reynolds dans le domaine temporel. Cette force et le développement de la couche limite dépendent de l'histoire de l'accélération de la particule par rapport à l'écoulement dans le temps. L'expression de cette force pour un écoulement visqueux et laminaire ($Re < 1$) est donnée par l'équation (2.26) :

$$\mathbf{f}^h = \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \int_0^t \frac{\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t'} - \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t'}}{\sqrt{t - t'}} dt' \quad (2.26)$$

Dans cette équation, t' est une variable muette utilisée pour réaliser l'intégrale sur l'histoire de l'écoulement. Cette variable est un analogue de la variable utilisée pour le temps t . Cette force n'est pas négligeable lorsque l'accélération d'une particule est particulièrement importante et lorsque les forces visqueuses dominent l'écoulement.

Plusieurs auteurs ont travaillé à étendre la définition de cette force à une plus grande gamme de nombres de Reynolds. Notamment, le travail de Mei *et al.* [62] propose d'ajouter un terme à la fonction noyau utilisée dans l'intégrale. Ce terme additionnel introduit une division par une puissance supérieure de $(t - t')$, typiquement de l'ordre de 2. L'annexe B présente un modèle basé sur le travail de Dorgan *et al.* [63] et une implémentation proposée par Parmar *et al.* [64]. Cette implémentation permet de modéliser cette force pour des écoulements ayant un nombre de Reynolds inférieur à 100.

Force d'écoulement non perturbé

Cette force correspond à la force exercée sur une particule due à la présence de phénomènes d'une échelle beaucoup plus grande que la particule (la présence isolée d'une particule n'affecterait en aucun cas l'existence de ce phénomène). Un exemple typique est la présence d'un gradient de pression dans une conduite transportant un liquide. La présence de ce gradient de pression à l'échelle de la conduite est perçue par la particule et exerce une force sur celle-ci. Il en va de même pour les forces visqueuses à une plus grande échelle [39]. Cette force est donc la somme de la force de pression à grande échelle et des forces visqueuses à grande échelle, données respectivement par [65] :

$$\mathbf{f}^{\nabla p} = \frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla p \quad (2.27)$$

$$\mathbf{f}^{\tau} = \frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2.28)$$

2.1.3 Sédimentation d'une particule seule

La dynamique de la sédimentation d'une particule implique la majorité des forces présentées dans la Section 2.1.2. L'étude de ce processus est importante pour de nombreux procédés industriels et environnementaux [66]. Analyser la sédimentation d'une particule isolée est pertinent pour comprendre les forces d'histoire, de masse virtuelle et de traînée. Ce cas est également crucial pour valider des modèles numériques [1]. À titre d'exemple, Ten Cate

et al. ont réalisé des séries d'expériences de sédimentation pour des nombres de Reynolds allant de 1.5 à 32. Ces expériences visaient à déterminer le profil de vitesse de la particule lors de sa sédimentation, donnant des informations clés sur la dynamique du processus. Par exemple, elles permettent de mettre en évidence les effets de masse virtuelle au début de la sédimentation et de comprendre l'interaction de la particule avec le fond du récipient. En 2021, Hagemeyer *et al.* [67] ont étudié la sédimentation de particules dans des gammes de nombres de Reynolds comprises entre 333 et 4012, observant la trajectoire des particules après leur contact avec le fond du récipient. Cela a permis de mesurer l'influence du liquide sur la dynamique de rebond d'une particule. Ils ont également comparé le profil de sédimentation de particules avec des densités relatives $\rho^* = \frac{\rho_p}{\rho_f}$ variant de 1.18 à 6.77, observant l'impact du ρ^* sur les effets de masse virtuelle et sur les forces de portance liées à la formation de tourbillons. De plus, la comparaison entre les trajectoires mesurées expérimentalement et celles prédites par un modèle lagrangien tenant compte des forces de gravité, de la poussée d'Archimède, des forces de traînée et de masse virtuelle a montré que dans certains cas, ces modèles peuvent être très précis.

La dynamique des cas de sédimentation est principalement régulée par le nombre d'Archimède (Ar), défini par l'équation (2.29). Ce nombre prend en compte la plupart des paramètres contrôlables dans un cas de sédimentation. Dans cette équation, g est l'accélération gravitationnelle et V_p le volume de la particule. Le nombre de Reynolds d'une particule lors de sa sédimentation découle du nombre d'Archimède. La vitesse de sédimentation n'est pas contrôlée directement, mais est une conséquence des paramètres qui définissent le nombre d'Archimède.

$$Ar = \frac{gV_p\rho_f(\rho_p - \rho_f)}{\mu_f^2} \quad (2.29)$$

Lorsqu'une particule en sédimentation approche d'une paroi, elle est fortement ralentie par deux forces : la force de lubrification et la force liée à la variation de la masse virtuelle, également appelée force de Meshchersky [68]. La force de lubrification représente l'effort nécessaire pour vaincre la résistance visqueuse et expulser le film de fluide entre la paroi et la particule. La force due à la viscosité pour une particule sphérique proche d'une paroi est donnée par [69, 70] :

$$\mathbf{f}^{lub_w} = \frac{3}{2}\pi\mu_f \frac{d_p^2}{h - \frac{d_p}{2}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_w) \mathbf{n}_w \quad (2.30)$$

Dans cette équation, $\mathbf{n}_w$ désigne la normale unitaire à la paroi et h la position du centre

de la particule par rapport à cette dernière. La force due à la modification de la masse virtuelle résulte de l'augmentation de la masse virtuelle d'une particule sphérique à l'approche d'une paroi. Cette augmentation se traduit par une augmentation de la masse apparente de la particule, ce qui entraîne une diminution de sa vitesse. Une analyse de la quantité de mouvement fournit :

$$\mathbf{f}^m = -\mathbf{v}\rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} \frac{dC_m}{dt} \quad (2.31)$$

Cette équation peut également être dérivée à partir de la théorie énergétique des écoulements de fluide [71].

2.2 Hydrodynamique de plusieurs particules

L'hydrodynamique de plusieurs particules est complexifiée par leurs interactions, car la présence d'autres particules modifie l'écoulement du fluide. Généralement, les forces exercées sur une particule par l'écoulement du fluide sont altérées par la proximité d'une autre particule. Ainsi, l'étude de l'écoulement autour d'un groupe de particules est souvent limitée par la multiplicité des paramètres découlant de l'assemblage de ces particules, la position relative de chacune devant être considérée. Pour cette raison, cette section se divise en deux parties : la première concerne l'interaction entre deux particules, tandis que la seconde aborde l'interaction impliquant plus de deux particules. Il est essentiel de souligner que l'hydrodynamique d'un groupe de particules peut être étudiée sous l'angle où celles-ci sont soit fixes les unes par rapport aux autres, formant un **assemblage** de particules, soit mobiles, les unes par rapport aux autres, constituant alors un **essaim** de particules.

2.2.1 Hydrodynamique de deux particules

Assemblage de deux particules

La modification de l'écoulement autour d'une particule due à la présence d'une autre dans son sillage a été étudiée par Tsuji *et al.* [72]. Ils ont démontré que la structure de vortex dans le sillage de la particule est significativement altérée par la présence d'une seconde sphère dans des écoulements avec un nombre de Reynolds compris entre 220 et 10^3 . Outre le changement dans la structure des vortex, le coefficient de traînée des deux sphères est influencé par la distance adimensionnelle $r^* = \frac{r_{ij}}{d_p}$ les séparant, où r_{ij} représente la distance centre à centre entre les particules. Le coefficient de traînée de la sphère en amont augmente d'environ 10% pour un r_{ij} de 1.5, comparativement à une sphère isolée. Cette augmentation

est quasiment nulle pour un r_{ij} supérieur à 2. Pour la sphère en aval, le coefficient de traînée diminue lorsque r_{ij} est faible, atteignant une réduction d'environ 65% pour un r_{ij} de 1.5. Cette réduction diminue avec l'augmentation de la distance r_{ij} , devenant négligeable au-delà de 10. Ces valeurs varient légèrement avec le nombre de Reynolds de l'écoulement. Ils ont également observé que le nombre de Strouhal associé à la formation de vortex derrière la seconde sphère reste similaire à celui d'une sphère isolée.

Prahl *et al.* ont numériquement étudié les modifications des forces de traînée et l'apparition d'une force de portance en fonction des positions relatives des particules, utilisant la méthode de Boltzmann sur réseau [10]. Leurs écoulements avaient un nombre de Reynolds entre 50 et 200. Ils ont constaté une diminution plus marquée du coefficient de traînée pour une sphère en aval avec l'augmentation du nombre de Reynolds, variant de 60% pour un Reynolds de 50 à 80% pour un Reynolds de 200. Leur étude a également permis d'établir un coefficient de portance pour des particules non alignées avec l'écoulement. Les résultats concernant les modifications des coefficients de traînée et de portance sont présentés dans les figures 2.7 et 2.8. Chen *et al.* [23] ont réalisé une analyse expérimentale similaire, bien que dans une gamme de paramètres légèrement plus restreinte que celle de Prahl *et al.*, avec des résultats généralement concordants.

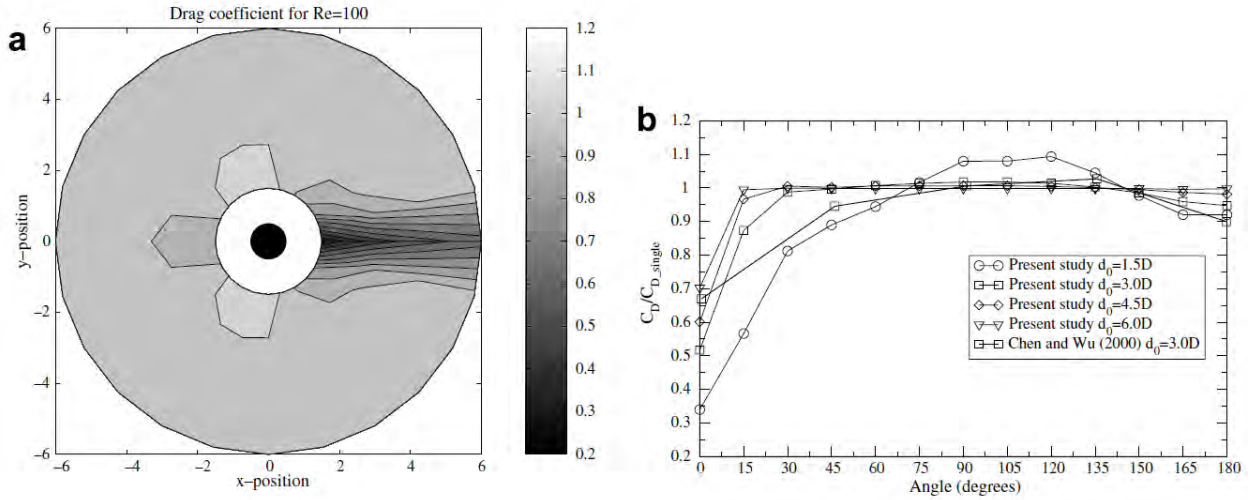


FIGURE 2.7 Modification du coefficient de traînée en fonction de la position du centre de la sphère relativement à une sphère de référence pour un Reynolds de 100. Ici, l'angle fait référence à l'angle entre le vecteur formé par les centroïdes de sphère et la vitesse de l'écoulement. Tiré de [10].

La masse virtuelle d'assemblages de quelques particules a été étudiée expérimentalement par Kendoush *et al.* [56] et numériquement par Simcik *et al.* [57]. Ils ont observé que l'impact de

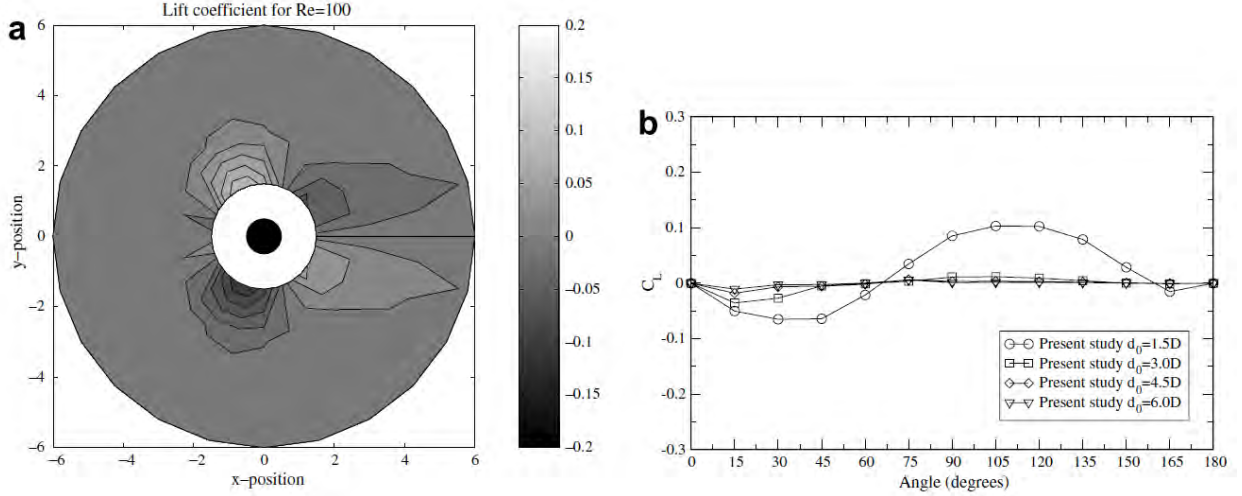


FIGURE 2.8 Modification du coefficient de portance en fonction de la position du centre de la sphère relativement à une sphère de référence pour un Reynolds de 100. Ici, l'angle fait référence à l'angle entre le vecteur formé par les centroïdes de sphère et la vitesse de l'écoulement Tiré de [10].

ces interactions est limité : en effet, pour une distance adimensionnelle r^* supérieure à 5, ils n'ont noté aucune modification significative de la masse virtuelle par rapport à une particule isolée. Ils ont trouvé que le coefficient de masse virtuelle est minimal lorsque deux sphères sont alignées avec leur vecteur d'accélération, environ 0.35, et qu'il atteint son maximum, environ 0.61, lorsque les sphères sont perpendiculaires à ce vecteur et en contact direct.

D'autres chercheurs, comme Simcik *et al.* [57], se sont également intéressés aux interactions au sein d'assemblages de plus de deux particules. Cependant, les configurations étudiées sont restées simples, telles que des configurations en train vertical de particules ou des particules disposées en triangle dans un plan vertical ou horizontal.

Essaim de deux particules

L'interaction entre deux particules en cours de sédimentation proche l'une de l'autre a été le sujet de nombreux travaux. Cette interaction entraîne l'apparition de phénomènes complexes, connus sous le cycle d'interaction *drafting*, *kissing*, et *tumbling* (DKT). Fortes *et al.* [73] ont étudié expérimentalement cette série d'interactions, qui décrit les trois phases successives qu'un couple de particules peut traverser lors de leur sédimentation avant d'atteindre le fond d'un contenant. La réalisation complète de ces phases dépend souvent de la profondeur du contenant. La phase *drafting* se produit lorsque la particule p_1 est dans le sillage de p_2 , réduisant ainsi son coefficient de traînée et accélérant sa vitesse jusqu'au contact avec p_2 ,

marquant la phase de *kissing*. Ce contact est suivi du dépassement de p_2 par p_1 , la phase de *tumbling*. Le processus DKT peut se répéter si le bassin est suffisamment profond et que les particules restent proches. Il a été observé que, après le processus de *tumbling*, p_2 peut entamer à nouveau le processus DKT en rattrapant p_1 . Sun et Chwang [74] ont exploré théoriquement cette dynamique, mais leurs résultats sont mitigés, leur modèle ne reproduisant pas parfaitement la dynamique expérimentale.

Ce processus a aussi été reproduit numériquement. Par exemple, Ghosh et Kumar [75] ont étudié le DKT en 2D en 2020, utilisant une méthode de conditions immergées pour des cylindres de tailles différentes, avec les deux particules initialement verticales et séparées par une distance égale à la taille de la plus grande. Leur étude couvre des nombres de Reynolds entre 20 et 80, montrant que le rapport de taille entre les particules affecte la fréquence et la rapidité du processus DKT. Si le rapport est inférieur à deux, le processus se répète plus fréquemment.

Liu *et al.* [76] ont étudié la sédimentation de deux particules en 3D pour des Reynolds faibles ($Re < 5$) via une méthode de Boltzmann sur réseau. Ils ont trouvé que la trajectoire des particules dépend fortement des conditions initiales, identifiant une configuration relativement stable avec deux particules verticalement collées. Néanmoins, leur étude se limite à cinq configurations initiales pour des essaims de deux particules.

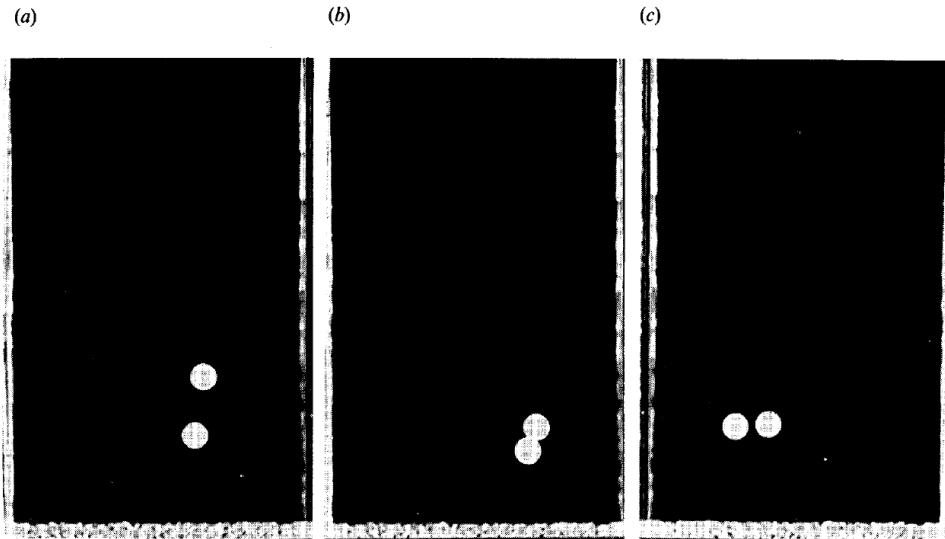


FIGURE 2.9 (a) Processus de *drafting*, (b) le contact des deux particules (*kissing*, (c) l'échange de position des deux particules *tumbling*. Cette expérience est réalisée pour un nombre de Reynolds de 800. Tiré de [73].

Fortes *et al.* [73] ont étudié la stabilité apparente d'une série de sphères en sédimentation,

disposées côte à côte et confinées entre deux à quatre parois parallèles à leur direction de sédimentation. Cependant, les auteurs n'ont pas pu identifier précisément les mécanismes conduisant à la stabilité de ces sphères. Il est à noter que les particules sont contraintes dans un seul plan, ce qui contribue probablement à leur stabilité.

Firouznia *et al.* [77] se sont intéressés à l'interaction de deux particules dans un écoulement cisailant, adoptant une approche expérimentale. Ils ont pu observer la trajectoire relative de la particule p_2 en fonction de sa position par rapport à la particule p_1 lorsqu'elles se croisent dans un écoulement avec cisaillement. Ils ont démontré que, selon la position perpendiculaire à l'écoulement (y) de p_2 par rapport à p_1 , sa trajectoire est plus ou moins modifiée. De plus, les auteurs ont documenté la variation de la position en y de p_2 avant et après le croisement avec p_1 . À noter que ces interactions ont été étudiées pour des nombres de Reynolds très faibles ($Re \approx 10^{-5}$), et que leur travail inclut également l'étude de ces interactions dans des fluides non newtoniens.

Similairement au cas d'une particule seule approchant un mur, la proximité de deux particules introduit deux forces supplémentaires : les forces de lubrification entre les particules et la force due à la modification de la masse virtuelle de la particule. Ces forces sont décrites à la Section 2.1.3, avec l'équation (2.31) représentant la force liée à la modification de la masse virtuelle. La formulation de cette force reste inchangée, que l'interaction concerne une particule ou une paroi, seule la variation du terme $\frac{dC_{vm}}{dt}$ différant dans cette situation. La force de lubrification, quant à elle, est définie en fonction du rayon des deux particules et de leur mouvement relatif. La non-alignement de ces forces avec le centroïde des particules induit également un couple ($\mathbf{T}_i^{lub}$) sur les particules, comme décrit dans les travaux de Cooley et O'Neill [78, 79]. La figure 2.10 présente un schéma des variables qui influencent la force ($\mathbf{f}_i^{lub}$) et le couple ($\mathbf{T}_i^{lub}$) de lubrification.

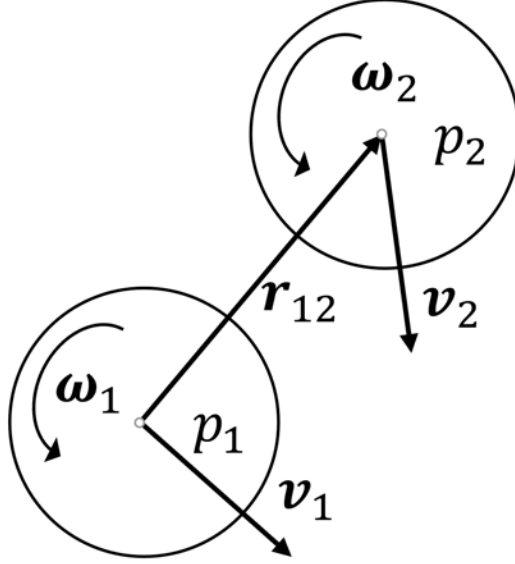


FIGURE 2.10 Schéma des variables propres au mouvement des particules qui influencent la force de lubrification appliquée sur celles-ci.

$$\epsilon = 2 \frac{\|\mathbf{r}_{ij}\| - \frac{d_i + d_j}{2}}{d_p} \quad (2.32)$$

$$\kappa = \frac{d_{p_i}}{d_{p_j}} \quad (2.33)$$

$$\mathbf{e}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \quad (2.34)$$

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i \quad (2.35)$$

$$\omega_{ij} = \omega_j + \omega_i \quad (2.36)$$

$$\mathbf{f}_i^{lubn} = \left(\frac{\kappa^2}{(1+\kappa)^2} \left(\frac{1}{\epsilon} \right) - \frac{\kappa(1+7\kappa+\kappa^2)}{5(1+\kappa)^3} \ln(\epsilon) \right) \cdot 3\pi\mu d_{p_i} \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij} \quad (2.37)$$

$$\mathbf{f}_i^{lubtt} = - \left(\frac{4\kappa(2+\kappa+2\kappa^2)}{15(1+\kappa)^3} \ln(\epsilon) \right) \cdot 3\pi\mu d_{p_i} (\mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij}) \quad (2.38)$$

$$\mathbf{f}_i^{lubtr} = 1.5\pi\mu d_{p_i}^2 \frac{2\kappa^2}{15(1+\kappa)^2} \ln(\epsilon) (\omega_{ij} + 4\kappa^{-1}\omega_i + 4\kappa\omega_j) \mathbf{e}_{ij} \quad (2.39)$$

$$\mathbf{f}_i^{lub} = \mathbf{f}_i^{lubn} + \mathbf{f}_i^{lubtt} + \mathbf{f}_i^{lubtr} \quad (2.40)$$

$$\mathbf{T}_i^{lubtt} = -2\pi\mu d_{p_i}^2 \left(\frac{\kappa(4+\kappa)}{10(1+\kappa)^2} \ln(\epsilon) \right) \mathbf{e}_{ij} \times \mathbf{v}_{ij} \quad (2.41)$$

$$\mathbf{T}_i^{lubtr} = \pi\mu d_{p_i}^3 \frac{2\kappa}{5(1+\kappa)^2} \ln(\epsilon) \left(\left(\omega_i + \frac{\kappa\omega_j}{4} \right) - \left(\omega_i + \frac{\kappa\omega_j}{4} \right) \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij} \right) \quad (2.42)$$

$$\mathbf{T}_i^{lub*} = \mathbf{T}_i^{lubtt} + \mathbf{T}_i^{lubtr} \quad (2.43)$$

Dans les équations (2.32) à (2.43), les indices i et j désignent les indices de deux particules. Les termes $\mathbf{v}_{ij}$ et $\boldsymbol{\omega}_{ij}$ représentent respectivement les vitesses relatives linéaire et angulaire entre les deux particules, tandis que $\mathbf{r}_{ij}$ est le vecteur reliant le centre de la particule i au centre de la particule j .

2.2.2 Hydrodynamique de plus de deux particules

Dans l'industrie, il est assez peu fréquent de s'intéresser spécifiquement à l'écoulement de seulement deux particules. Cependant, l'étude d'un essaim contenant un grand nombre de particules devient rapidement trop complexe pour les raisons évoquées en début de cette section. Pour contourner cette complexité, les méthodes employées s'appuient principalement sur des approximations centrées sur la concentration locale de particules par rapport au fluide, afin d'évaluer les interactions hydrodynamiques entre les particules et le fluide [39]. Les propriétés d'un tel écoulement sont souvent déterminées par le ratio du volume occupé par le fluide au volume total. Cette relation est exprimée par l'équation (2.44), où ϵ_f représente la fraction volumique du fluide dans un écoulement.

$$\epsilon_f = \frac{V_f}{V_{total}} \quad (2.44)$$

Il est généralement nécessaire d'évaluer ϵ_f localement. Cela signifie qu'il faut définir la fraction volumique spécifique à chaque sous-volume utilisé pour étudier un système. La fraction volumique peut être évaluée de plusieurs manières. Dans le cas de particules sphériques, cette valeur peut être évaluée analytiquement [80]. Or, cette évaluation est complexe et coûteuse. Plusieurs approches existent afin d'évaluer de manière plus efficace cette valeur. Une approche simple, mais efficace est de compter le nombre de particules dont le centroïde est contenu à l'intérieur d'un même sous-volume utilisé pour évaluer ϵ_f . L'erreur commise par cette approche est considérée comme négligeable quand le rapport de taille caractéristique entre le sous-volume et la particule est supérieur à 3.82 [81]. Récemment, une nouvelle méthode analytique basée sur des volumes de contrôle sphériques a été développée par El Geitani *et al.* [82]. Cette méthode permet un compromis entre le coût de calcul et la précision de l'évaluation de ϵ_f .

Assemblage de plusieurs particules

L'assemblage de plusieurs particules se retrouve dans de nombreuses applications industrielles. En effet, les processus industriels impliquant des opérations de type *packed-bed* constituent un exemple typique où l'on retrouve un assemblage d'une grande quantité de parti-

cules [39]. Dans ces situations, on s'intéresse généralement à la perte de charge, c'est-à-dire le gradient de pression, à travers le *packed-bed*. Ergun *et al.* [83] ont étudié expérimentalement les pertes de charge à travers des colonnes de particules distribuées aléatoirement. Leurs travaux ont démontré que la perte de pression à travers une colonne de particules varie linéairement avec le débit massique du fluide, les coefficients de cette relation étant principalement définis par la fraction volumétrique de fluide ϵ_f , la viscosité du fluide et la qualité de surface des particules. Rong *et al.* [41] ont également étudié l'écoulement à travers un assemblage de sphères afin de déterminer des corrélations pour représenter la traînée d'un assemblage de plusieurs particules. Leurs résultats ont permis de démontrer que la force de traînée individuelle des particules semble suivre une loi de distribution gaussienne. La figure 2.11 présente une telle distribution de la force adimensionnelle appliquée sur une particule. La force adimensionnelle est obtenue en évaluant le rapport entre une force perçue par une particule individuellement et la force moyenne perçue par l'assemblage. Cette distribution ne semble pas affectée par le nombre de Reynolds ou la fraction volumétrique de fluide. Toutefois, les auteurs notent que des recherches supplémentaires seraient nécessaires pour des nombres de Reynolds plus élevés et pour des fluides non-newtoniens, cette étude étant limitée à des nombres de Reynolds inférieurs à 235.

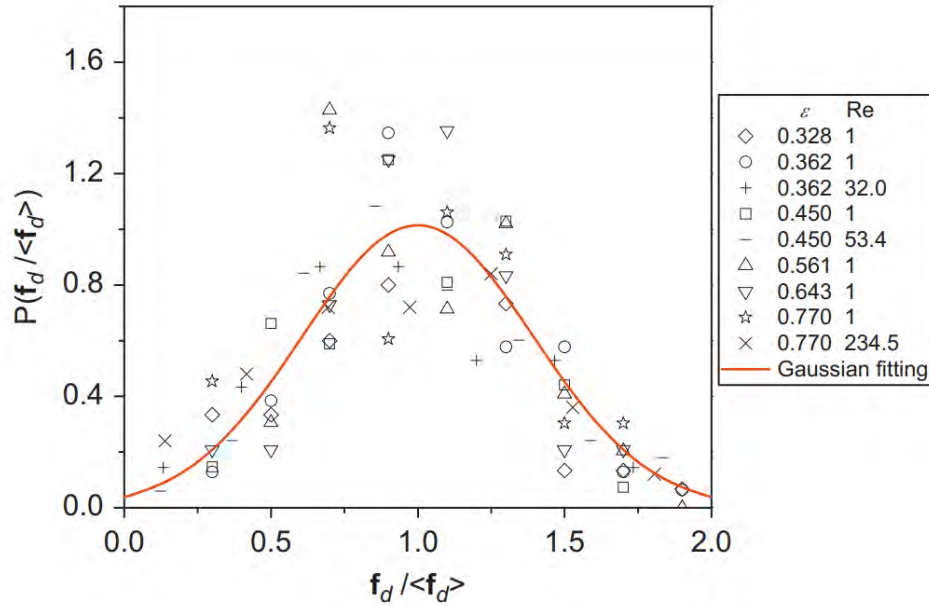


FIGURE 2.11 Densité de probabilité de la force appliquée sur une particule relativement à la force moyenne pour d'un assemblage de particules sphériques. La densité de probabilité semble suivre une loi gaussienne centrée en 1 et avec un écart type de 0.385. Tiré de [41]

Essaim de plusieurs particules

Trois régimes d'écoulement avec un essaim de particules peuvent être observés en fonction de la quantité de particules et de leur taille. Les trois régimes correspondent à l'identification de la dynamique dominante dans le mouvement des particules, c'est-à-dire si la dynamique est principalement contrôlée par l'écoulement de fluide autour d'elles, si elle est principalement définie par leurs contacts, ou si elle correspond à un intermédiaire entre ces deux régimes. Pour déterminer dans quel régime l'écoulement se trouve, il est pertinent d'évaluer combien de temps est nécessaire pour qu'une particule soit accélérée à une vitesse presque identique à celle de l'écoulement, comparé au temps moyen entre deux collisions de particules [39]. Le temps de réponse d'une particule, relativement à l'écoulement qui l'entoure, est donné par le temps de Stokes :

$$\tau_f = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \quad (2.45)$$

Ce temps est celui nécessaire pour qu'une particule initialement au repos atteigne une vitesse équivalente à 63% ($\frac{e-1}{e}$) de la vitesse de l'écoulement (en régime de Stokes). Le temps moyen entre deux collisions de particules est évalué à partir de l'inverse de la fréquence de contact entre elles. Pour une particule, le temps moyen entre deux collisions est donné par l'équation (2.46). Dans cette équation, n correspond au nombre moyen de particules par unité de volume et v_r à la vitesse relative moyenne des particules les unes par rapport aux autres. La définition de v_r n'est pas triviale et implique l'évaluation de l'équation (2.47).

$$\tau_c = \frac{1}{n\pi d_p^2 v_r} \quad (2.46)$$

$$v_r = \overline{\|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\|} \quad (2.47)$$

Abrahamson [84] propose une forme alternative pour la fréquence moyenne de collision d'une particule, basée sur la fluctuation moyenne de la vitesse d'une particule. Cette approche donne lieu à une formulation pour le temps caractéristique des collisions, présentée dans l'équation (2.48). La fluctuation de vitesse v' n'est pas beaucoup plus simple à évaluer que la vitesse relative moyenne. Elle implique l'évaluation de l'équation (2.49), où $\bar{\mathbf{v}}$ correspond à la vitesse moyenne des particules.

$$\tau_c = \frac{1}{4\sqrt{\pi}nd_p^2 v'} \quad (2.48)$$

$$v' = \overline{\|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}\|} \quad (2.49)$$

Ainsi, si le rapport $\frac{\tau_f}{\tau_c}$ est inférieur à 0.1, l'écoulement est principalement dominé par l'écoulement de fluide. En revanche, si ce rapport est supérieur à 10, l'écoulement est principalement dominé par le contact entre les particules. Pour des valeurs de ce rapport avoisinant 1, les deux phénomènes ont une contribution non négligeable à la dynamique de l'écoulement [39].

La présence de particules solides dans un écoulement impacte également les propriétés macroscopiques de l'écoulement, comme la viscosité apparente du fluide. Cette relation est donnée par la relation d'Einstein, définie dans l'équation (2.50) [85]. L'augmentation de la viscosité apparente d'un fluide (μ_f^*) en présence de particules est due à l'occupation d'une partie du volume du fluide par les particules. La relation ainsi définie est toutefois seulement valable pour des écoulements où les particules sont fortement diluées, soit pour $(1 - \epsilon_f) < 0.001$ [39].

$$\mu_f^* = \mu_f \left(1 + \frac{5}{2}(1 - \epsilon_f)\right) \quad (2.50)$$

Plusieurs auteurs ont travaillé à la généralisation de cette équation [86]. Parmi eux, Kynch [87] propose un modèle valable pour des écoulements où la fraction volumique occupée par les particules est plus élevée que celle proposée par Einstein.

$$\mu_f^* = \mu_f \left(1 + \frac{5}{2}(1 - \epsilon_f) + \frac{15}{2}(1 - \epsilon_f)^2\right) \quad (2.51)$$

2.3 Modélisation numérique d'un fluide

La modélisation numérique d'un écoulement de fluide à partir des équations incompressibles de Navier-Stokes (voir les équations (2.1) et (2.2)) est un sujet qui requiert encore beaucoup de développement. Il existe plusieurs approches numériques pour aborder ce problème. Les méthodes les plus fréquemment citées dans la littérature sont : la méthode des éléments finis, la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis et la méthode de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann Method).

L'Unité de Recherche en Procédés d'Écoulements industriels (URPEI) a décidé en 2019 de développer son propre outil de modélisation. Cela a conduit au développement de Lethe [11], un outil qui utilise la méthode des éléments finis et se base sur la bibliothèque de calcul par éléments finis deal.II, bien établie et libre d'accès [88]. L'élaboration de cet outil est en partie motivée par le désir du groupe de recherche de disposer d'un solveur CFD d'ordre élevé. Pour cette raison, seule l'implémentation des équations de Navier-Stokes dans le cadre

de la méthode des éléments finis est détaillée dans cette section. Elle détaillera également le concept et les avantages potentiels des méthodes d'ordre élevé, ainsi que l'application de la méthode des éléments finis à la résolution des équations de Navier-Stokes.

2.3.1 Méthode d'ordre élevé

Les méthodes d'ordre élevé, dont l'ordre de convergence est supérieur à deux, gagnent en popularité pour la résolution des équations de Navier-Stokes. En effet, elles permettent d'obtenir des résultats plus précis pour un temps de calcul équivalent [11, 89]. Un exemple de réduction de l'erreur pour un temps de calcul donné est présenté à la figure 2.12.

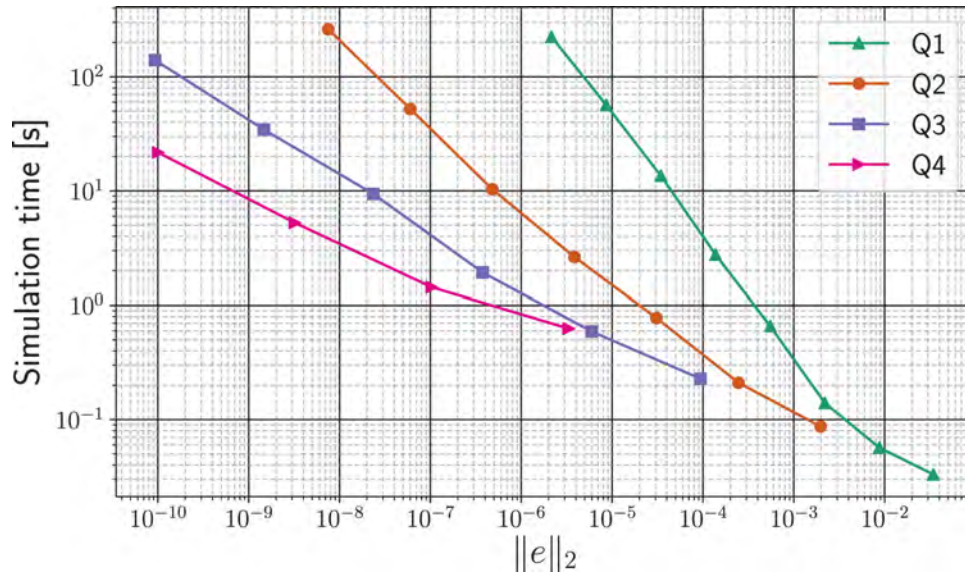


FIGURE 2.12 Illustration de la réduction du temps de calcul nécessaire pour atteindre une précision donnée avec un schéma présentant un ordre de convergence supérieur à deux (schéma utilisant des éléments de type Q2, Q3 et Q4). L'erreur représentée dans cette figure est obtenue par la méthode des solutions manufacturées pour le cas des vortex de Taylor-Green en 2D. Figure extraite de Blais *et al.* [11].

De manière générale, ces méthodes se distinguent par l'utilisation de polynômes d'ordre égal ou supérieur à deux dans la discrétisation spatiale, permettant une convergence d'un champ continu à un ordre $m = p + 1$, où p est l'ordre du polynôme. Elles favorisent ainsi une meilleure résolution des gradients du champ des solutions. En effet, la dérivée d'ordre n d'un champ de solutions convergeant à l'ordre m converge à l'ordre $m - n$. Par conséquent, dans le cadre des équations de Navier-Stokes, le gradient du champ de vitesse est mieux capturé, car il converge alors à l'ordre $m - 1$. Cela permet une évaluation plus précise de la force comparée aux méthodes d'ordre 2, car celle-ci dépendant directement du gradient du champ

de la vitesse.

2.3.2 Méthode des éléments finis

La résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles est reconnue comme étant particulièrement difficile, quelle que soit la méthode numérique utilisée. Il a été rapidement observé que des instabilités numériques apparaissent lorsque ces équations sont implémentées directement dans une méthode finie (volumes finis, différences finies, éléments finis) [90]. Dans le cadre d'une formulation de Galerkin continue, cette oscillation est inévitable sans stabilisation si la formulation des éléments ne satisfait pas la condition de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi (LBB) (aussi appelée condition inf-sup). Cette condition s'applique à la résolution de problèmes mixtes tels que l'équation de Navier-Stokes. Dans ce contexte, elle stipule que l'espace des fonctions de pression doit être choisi de manière à garantir l'existence d'une constante positive liant uniformément les pressions aux vitesses, empêchant ainsi l'oscillation de la solution et garantissant l'existence et l'unicité de la solution. Cela implique, dans le cas de la formulation de Galerkin continue des équations de Navier-Stokes, que l'ordre du polynôme utilisé pour représenter le champ de vitesse doit être supérieur à celui utilisé pour le champ de pression au sein d'un élément [91]. En utilisant l'approche classique de Galerkin, on obtient les équations (2.52) et (2.53) pour la formulation faible des équations de Navier-Stokes incompressibles. Ces équations peuvent ensuite être linéarisées. Dans cette formulation, ϕ_u et ϕ_q sont respectivement les fonctions tests utilisées pour le champ de vitesse et le champ de pression. Ces fonctions tests doivent donc satisfaire la condition LBB.

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \phi_q d\Omega = 0 \quad (2.52)$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f} \right) \cdot \phi_u d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \phi_u d\Omega - \int_{\Omega} \frac{p}{\rho_f} \nabla \cdot \phi_u d\Omega = 0 \quad (2.53)$$

Une alternative à cette formulation est la formulation dite *Galerkin-least-square* (GLS). Cette formulation stabilisée permet l'utilisation d'éléments du même ordre pour la vitesse et la pression. La stabilisation est obtenue en ajoutant un terme correspondant au résidu fort de l'équation classique [90]. Cette formulation aboutit aux équations (2.54) et (2.55) [11].

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \phi_q d\Omega + \sum_K \int_{\Omega_K} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \frac{p}{\rho_f} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{f} \right) \cdot (\tau_u \nabla \phi_q) d\Omega_K = 0 \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f} \right) \cdot \phi_{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \phi_{\mathbf{u}} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{p}{\rho_f} \nabla \cdot \phi_{\mathbf{u}} d\Omega \\
& + \sum_K \int_{\Omega_K} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \frac{p}{\rho_f} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{f} \right) \cdot (\tau_u \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\mathbf{u}}) d\Omega_K = 0
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Où τ_u , le terme de stabilisation, est défini par l'équation 2.56 dans le cas transitoire et par l'équation 2.57 dans le cas en régime stationnaire. Dans ces équations, les termes h_{diff} et h_{conv} sont identiques et définis comme étant le diamètre d'une sphère ayant le même volume que l'élément sur lequel cette équation est appliquée.

$$\tau_u = \left[\left(\frac{1}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{2\|\mathbf{u}\|}{h_{conv}} \right)^2 + \left(\frac{4\mu}{3h_{diff}} \right) \right]^{-1/2} \tag{2.56}$$

$$\tau_u = \left[\left(\frac{2\|\mathbf{u}\|}{h_{conv}} \right)^2 + \left(\frac{4\mu_f}{3h_{diff}} \right) \right]^{-1/2} \tag{2.57}$$

Ce système d'équations étant non linéaire, il est résolu à l'aide d'un algorithme de Newton. La matrice à résoudre est donc le Jacobien de la forme faible. Dans le cas de la formulation GLS présentée précédemment dans les équations (2.54) et (2.55), le Jacobien prend la forme indiquée dans l'équation (2.58). Dans cette équation, la lettre A désigne la matrice représentant la portion associée à la vitesse de la forme faible, tandis que la matrice B se rapporte au bloc associé à l'équation de conservation de masse. La matrice S se réfère quant à elle au bloc provenant de la stabilisation pour la pression, ayant ainsi une diagonale non nulle. Le Jacobien de la formulation classique, présenté dans les équations (2.52) et (2.53), possède la même structure matricielle. Cependant, le terme S est inexistant dans cette formulation et est donc remplacé par une matrice nulle.

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & S \end{bmatrix} \tag{2.58}$$

Dans le cas du Jacobien présenté dans l'équation (2.58), la diagonale est pleine, permettant ainsi l'utilisation directe d'un solveur matriciel itératif. Ces solveurs sont généralement plus rapides pour résoudre des matrices de grande taille, mais requièrent habituellement une diagonale sans valeurs nulles. Comme la matrice n'est pas symétrique, le solveur itératif utilisé est

de type *generalized minimal residual method* (GMRES), accompagné d'un préconditionneur LU incomplet (ILU). Cette méthode peut également être combinée avec un préconditionneur basé sur les *algebraic multigrid methods* (AMG) pour réduire le nombre d'itérations nécessaires à la résolution de la matrice [11]. Dans le cas du solveur Lethe, cette résolution matricielle est gérée par la librairie Trillinos [92].

Si la formulation non stabilisée est utilisée, la présence de zéros sur la diagonale empêche l'utilisation directe d'un solveur itératif. Pour éviter les solveurs directs, qui sont numériquement coûteux, il est généralement recommandé d'opter pour une approche basée sur le complément de Schur. Cette méthode résout le système matriciel en traitant séparément les divers blocs (A et B) de la matrice, sans compromettre la robustesse de l'étape de résolution matricielle [11].

De plus, la méthode des éléments finis offre certains avantages pour l'implémentation des méthodes d'ordre élevé. Contrairement aux volumes finis et aux différences finies, la discrétisation d'une formulation d'ordre élevé par la méthode des éléments finis est assemblée localement sur chaque élément. Cela évite de devoir évaluer la solution dans les cellules voisines du maillage, réduisant ainsi la communication entre les différents processeurs dans un contexte informatique distribué.

2.3.3 Adaptation de maillage

Afin d'optimiser l'utilisation des ressources de calcul, il est souvent avantageux d'obtenir un maillage fin uniquement dans certaines zones d'intérêt ou sujettes à une plus grande erreur numérique [93]. Ce principe, communément appelé raffinement adaptatif, vise à améliorer itérativement la qualité de la solution tout en réduisant le coût de calcul. Généralement, pour identifier les zones à raffiner, on utilise un estimateur d'erreur. À l'aide de cet estimateur, les éléments sont classés selon leur erreur estimée. Ensuite, une fraction ou un nombre prédéfini d'éléments présentant les plus grandes erreurs sont raffinés. Dans le cas de Lethe, l'estimateur d'erreur employé est l'estimateur de Kelly [94], qui se base principalement sur le saut du gradient de la solution aux interfaces des éléments pour estimer l'erreur.

Une fois les cellules à raffiner identifiées, elles sont subdivisées en cellules plus petites pour réduire l'erreur de discrétisation. Il est important de noter que, dans le cas d'un maillage cartésien structuré, cela conduit à des maillages avec des noeuds libres (*hanging nodes*). Ces noeuds nécessitent un traitement particulier pour maintenir les propriétés du schéma d'éléments finis utilisé et pour faciliter leur utilisation dans une architecture distribuée [95]. Le traitement de ces noeuds implique d'imposer la continuité de la solution aux interfaces des éléments qui possèdent des noeuds libres.

2.4 Modélisation de particules immergées

Comme présenté dans l'introduction, il existe trois familles de méthodes pour représenter les interactions entre le fluide et les particules solides : CFD-DEM résolue, CFD-DEM non résolue et les méthodes à deux fluides [40]. Ces méthodes sont respectivement adaptées à des tailles de systèmes microscopiques, mésoscopiques et macroscopiques. L'approche de type à deux fluides représente les particules par une phase continue dont les propriétés sont définies par la théorie des interactions dynamiques des particules [96]. Cependant, cette méthode n'est pas pertinente pour étudier directement l'interaction hydrodynamique des particules, et ne sera donc pas développée davantage.

Les deux approches CFD-DEM sont illustrées à la figure 2.13. Les méthodes de type CFD-DEM résolues se caractérisent par une représentation directe des particules via la discrétisation du fluide. Cela implique que le maillage utilisé pour représenter le fluide a une taille significativement inférieure à celle des particules ($\Delta x < d_p$), comme illustré à la figure 2.13. Chaque particule est suivie individuellement et les forces exercées par le fluide sur celle-ci sont directement obtenues à partir de la modélisation du fluide. Cette approche est la plus précise, car elle ne repose pas sur des modèles de fermeture pour l'interaction entre la dynamique des particules et l'écoulement du fluide. Elle est donc à privilégier pour étudier l'interaction hydrodynamique des particules. Cependant, cette approche est de loin la plus coûteuse numériquement, en raison du grand nombre d'éléments nécessaires à la représentation de l'écoulement de fluide autour d'une particule. Généralement, cette approche est limitée à des cas comportant moins de 1000 particules. La simulation la plus importante de ce type a compté 350000 particules sur une infrastructure informatique conséquente (plus de 24000 coeurs) [12]. L'approche CFD-DEM non résolue modélise la présence de particules dans le fluide directement dans l'équation du fluide à l'aide de ϵ_f . Les particules ne sont donc pas représentées explicitement dans le fluide. Néanmoins, elles sont suivies individuellement, permettant ainsi d'évaluer localement ϵ_f . Dans ce cas, l'interaction entre le fluide et les particules doit être modélisée à l'aide de modèles de fermeture [65]. Un aperçu des modèles de fermeture sera présenté dans la Section 2.4.3. Zhu *et al.* [97] répertorient trois grandes branches d'applications de cette approche de modélisation numérique. Cette approche permet de modéliser des systèmes de bien plus grande envergure que l'approche de type CFD-DEM résolue.

Dans les deux approches de type CFD-DEM, les forces agissant sur les particules sont généralement classées en trois catégories : les forces dues au contact des particules ($\mathbf{f}_{ij}^c, \mathbf{f}_i^w, \mathbf{T}_{ij}^c, \mathbf{T}_i^w$), les forces sans contact ($\mathbf{f}_{ij}^{nc}$) (par exemple, la force de van der Waals) et les forces liées à l'écoulement du fluide ($\mathbf{f}_i^f, \mathbf{T}_i^f$) autour de la particule. En appliquant la deuxième loi de

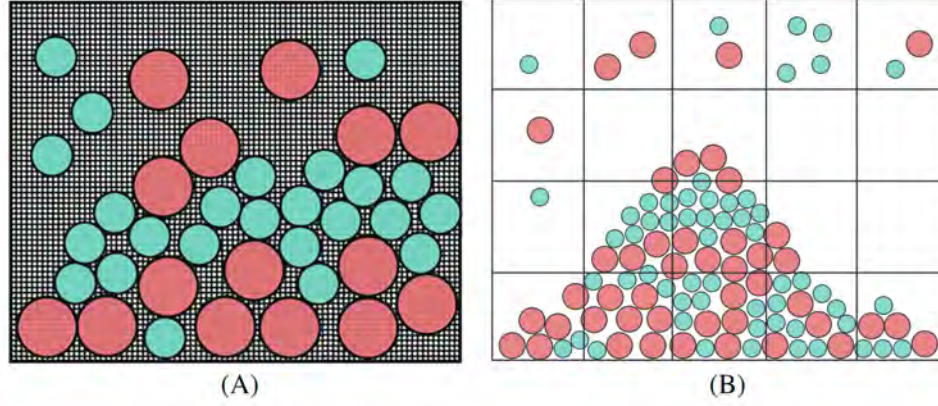


FIGURE 2.13 Comparaison de la discrétisation du fluide utilisé en fonction de l'approche de CFD-DEM utilisé. En (A) l'approche résolue et en (B) l'approche non-résolue. Tiré de [12].

Newton, on obtient :

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{f}_{ij}^c + \mathbf{f}_{ij}^{nc}) + \mathbf{f}_i^w + \mathbf{f}_i^f + \mathbf{g}m_i \right) \quad (2.59)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \frac{1}{I_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{T}_{ij}^c) + \mathbf{T}_i^w + \mathbf{T}_i^f \right) \quad (2.60)$$

Dans l'équation (2.60) le terme I_i correspond à l'inertie angulaire de la sphère. Cette section détaille d'abord les forces représentées de manière commune dans les deux types de modèles, à savoir les forces de contact et les forces sans contact. Ensuite, elle aborde la représentation des particules dans le fluide pour chacune des approches, suivie d'une brève discussion sur la modélisation des forces dues à l'écoulement du fluide ($\mathbf{f}_i^f$).

2.4.1 Force de contact

Pour modéliser les forces dues à un contact entre deux particules, deux approches sont généralement utilisées : l'approche des particules rigides et l'approche des particules molles. Dans l'approche des particules rigides, les collisions sont traitées comme instantanées. Le transfert de quantité de mouvement entre deux particules se produit immédiatement lorsqu'un

contact est détecté et suit une loi de restitution préalablement définie [65]. Les propriétés dynamiques des particules après le contact sont ainsi directement reliées à leurs propriétés avant le contact. Cette approche exige que chaque contact entre particules soit traité individuellement et suppose que les contacts soient relativement rares, avec une faible probabilité de collisions simultanées [98]. Elle est également limitée, car elle ne permet pas d'inclure directement une force due à la proximité de deux particules sans contact direct.

Dans l'approche des particules molles, les particules sont considérées comme déformables. La collision entre deux particules est alors traitée comme un événement où deux objets se déforment, engendrant une force de répulsion due à cette déformation [65]. Bien que cette approche prenne en compte la déformation des particules, leur représentation géométrique reste généralement inchangée. La force de contact dépend de l'ampleur du chevauchement et des propriétés dynamiques des particules, telle que la vitesse de translation et de rotation. Cette force est divisée en composantes normales et tangentielles par rapport au plan de contact. Pour évaluer ces forces, des modèles de contact linéaires et non linéaires sont utilisés. Les modèles non linéaires tiennent compte des variations de la zone de contact en fonction du degré de chevauchement [99], tandis que les modèles linéaires ignorent les variations de la constante de rigidité d'une sphère lors de la déformation. L'équation (2.61) illustre généralement la force de contact dans ces modèles [100], où $\mathbf{n}_{ij}$ représente la normale de la surface de contact, $\mathbf{t}_{ij}$ est le vecteur tangentiel unitaire, k_n, η_n, k_t, η_t sont les constantes du modèle de contact, et d_n, v_n, d_t, v_t représentent le chevauchement et la vitesse de contact dans les directions normale et tangentielle, respectivement.

$$\mathbf{f}_{c_{ij}} = -(k_n d_n + \eta_n v_n) \mathbf{n}_{ij} - (k_t d_t + \eta_t v_t) \mathbf{t}_{ij} \quad (2.61)$$

Lorsqu'un modèle non linéaire est utilisé, les constantes k_n, η_n, k_t, η_t deviennent des fonctions de d_n, v_n, d_t, v_t . Cette équation est applicable lorsqu'il n'y a pas de glissement au point de contact entre les particules. Si un glissement se produit, les forces tangentielles doivent être ajustées pour tenir compte du coefficient de friction cinétique entre les particules.

L'un des avantages de l'approche des particules molles est qu'elle facilite la gestion de collisions multiples et simultanées. Cependant, cette méthode nécessite un pas de temps plus court que le temps de collision pour obtenir des résultats fiables [65, 98]. Étant donné que le temps de collision est souvent très bref pour des particules solides, leur rigidité est ajustée afin qu'elles paraissent plus molles qu'elles ne le sont en réalité, ce qui permet d'utiliser un pas de temps plus long. Il reste néanmoins crucial de s'assurer que le temps de contact demeure nettement inférieur au temps caractéristique associé à l'écoulement du fluide.

2.4.2 Force sans contact

Ces forces font référence aux forces agissant sur deux particules lorsqu'elles sont proches l'une de l'autre, sans pour autant se toucher. Elles incluent les forces de Van der Waals, les forces électrostatiques, ainsi que les forces dues à la capillarité d'une couche de fluide à la surface d'une particule [65, 101]. Cette dernière ne s'applique que si les particules ne sont pas immergées dans un liquide et qu'il y a suffisamment de vapeur pour qu'une couche de liquide se forme à la surface des particules. Ces forces ne seront pas étudiées davantage, étant donné qu'elles n'impactent pas directement l'interaction entre les particules et le fluide dans lequel elles sont immergées.

2.4.3 Modélisation de particules en CFD-DEM non-résolue

Cette approche est utilisée quand le nombre de particules est trop élevé et que leur représentation individuelle dans le fluide n'est pas possible. On représente alors la présence de particules dans le fluide par la fraction volumique qu'elles occupent. La formulation de l'équation de Navier-Stokes s'en trouve alors modifiée [39]. L'équation qui en découle s'appelle l'équation de Navier-Stokes volumiquement moyennée. Deux formulations de cette équation existent, soit l'approche A et l'approche B. Ces approches sont particulièrement utiles pour modéliser les particules sans avoir à les représenter directement dans le fluide. Ces deux approches se distinguent par l'hypothèse faite sur la distribution du champ pression. Dans le cadre de l'approche A, la fraction volumique du fluide d'une cellule s'applique sur la variable de pression et sur les efforts visqueux prenant pour hypothèse que la particule immergée ne contribue pas à conduire la variation de pression dans le fluide directement. Alors que dans l'approche B la variation dans le champ de pression et dans le tenseur de contrainte visqueuse se propage à travers les particules. Gidaspow supporte que l'approche B est mieux posée que l'approche A [102] alors que Feng et Yu supportent que l'approche B offre des résultats plus proches des valeurs obtenue expérimentalement [103]. Pour cette raison, la revue de littérature présentera uniquement la forme B de ce modèle :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_f \rho_f) + \nabla \cdot (\epsilon_f \rho_f \mathbf{u}) = 0 \quad (2.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_f \rho_f \mathbf{u}) + \epsilon_f \rho_f (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_p + \epsilon_f \mathbf{f}_{ext} \quad (2.63)$$

Dans l'équation (2.63), $\mathbf{f}_p$ représente la force de réaction appliquée sur le fluide par les particules. Ce terme est obtenu à l'aide de modèles de fermeture qui vient coupler la dynamique des particules avec celle du fluide.

Modèles de fermeture pour les forces hydrodynamiques

Dans le cadre de l'approche CFD-DEM non résolue, les forces appliquées sur les particules doivent être modélisées à l'aide de modèles de fermeture [12]. Les forces modélisées reprennent généralement l'ensemble des forces présentées dans la Section 2.1.2. Toutefois, en fonction du ratio de masse volumique des particules par rapport au fluide ($\rho^* = \frac{\rho_p}{\rho_f}$) du cas étudié, il est courant de négliger certaines forces liées à l'accélération des particules par rapport au fluide [104]. Typiquement, si ρ^* est très élevé ($\rho > 1000$), les forces de masse virtuelle et les forces d'histoire sont négligées. Les modèles de force présentés dans cette section se distinguent de ceux de la Section 2.1.2 en ce qu'ils prennent en compte la présence d'autres particules, généralement en considérant la fraction volumique de fluide ϵ_f . Parmi les forces présentées dans la Section 2.1.2, seules deux ont des modèles dépendant de la présence d'autres particules : la force de traînée et la force de masse virtuelle [12]. À titre d'exemple, le modèle de force de traînée de Rong *et al.* est présenté [41]. Ce modèle de traînée des particules prend en compte ϵ_f pour définir le coefficient de traînée. Il est valable pour des nombres de Reynolds allant de 1 à 300 et pour une large gamme de fractions volumiques de fluide ($0.37 < \epsilon_f < 1$). Ce modèle est donné par :

$$\mathbf{f}_d = \frac{3}{4} C_{d0} \frac{\rho_f (1 - \epsilon_f) \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|}{d_p} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \epsilon_f^{2 - \beta(\epsilon_f, \text{Re})} \quad (2.64)$$

où

$$C_{d0} = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\text{Re}}}\right)^2 \quad (2.65)$$

et

$$\beta(\epsilon_f, \text{Re}) = 2.65(\epsilon_f + 1) - (5.3 - 3.5\epsilon_f) \epsilon_f^2 e^{-\frac{1.5 - \log(\text{Re}^2)}{2}} \quad (2.66)$$

Ce modèle a été obtenu à partir d'une modélisation d'assemblage de particules utilisant une approche de Boltzmann sur réseau. L'évaluation a été réalisée avec des particules d'une taille environ 20 fois supérieure à celle de la discrétisation. Plusieurs autres modèles ont été développés de manière similaire. Par exemple, celui de Beestra *et al.* [105] utilise une taille de discrétisation légèrement plus fine pour représenter une particule de leur assemblage.

Afin de réduire l'erreur de ces modèles de forces, de nouveaux modèles tentent de prendre en compte non seulement la fraction volumique de fluide, mais aussi la disposition relative des particules. Certains modèles utilisent le gradient de la fraction volumique du fluide [106, 107], tandis que d'autres se basent directement sur le positionnement relatif des particules pour définir la force hydrodynamique agissant sur elles [108, 109].

2.4.4 Modélisation de particules en CFD-DEM résolue

Le défi de représenter des particules dans un écoulement de fluide est d'imposer les conditions frontières nécessaires pour la représentation de la particule dans la modélisation numérique du fluide. Une fois les particules représentées dans le fluide, obtenir la force et le couple appliqués par le fluide sur celles-ci n'est pas compliqué. Cela consiste simplement à intégrer le tenseur des contraintes à la surface des particules.

$$\mathbf{f}_i^f = \int_{\Gamma_{p_i}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_{p_i} \quad (2.67)$$

$$\mathbf{T}_i^f = \int_{\Gamma_{p_i}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \times \mathbf{r}_i \, d\Gamma_{p_i} \quad (2.68)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes.

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho_f (\boldsymbol{\tau} - p^* \boldsymbol{\delta}_{ij}) \quad (2.69)$$

Il n'est généralement pas difficile de définir une discrétisation d'un domaine de calcul Ω pour prendre en compte la présence d'une ou de plusieurs particules statiques. Toutefois, le coût de calcul nécessaire pour redéfinir la discrétisation lorsque ces particules sont en mouvement peut être prohibitif. Cela nécessite donc l'utilisation d'autres stratégies, qui seront détaillées dans cette section. L'approche basée sur la redéfinition de la discrétisation sera tout de même abordée.

Remaillage

La méthode de remaillage, comme son nom l'indique, consiste à remailler le domaine de calcul pour suivre la position de l'objet lors de son déplacement ou de sa déformation. Comme mentionné précédemment, cette approche est numériquement coûteuse. Toutefois, dans certaines circonstances, elle peut s'avérer adaptée, notamment pour les problèmes en 2D. Saksono *et al.* proposent une approche complète (implémentation de l'équation des fluides, définition de l'approche d'intégration en temps et de l'approche de remaillage) pour implémenter ce type de méthode pour l'équation de Navier-Stokes incompressible [110].

Approche par grille chimère

Cette approche consiste à définir un maillage pour chaque objet en mouvement et un maillage principal pour le domaine de calcul Ω . Il est donc possible de définir un maillage pour le domaine de calcul Ω et un maillage non structuré à proximité de chaque objet, comme illustré dans la figure 2.14. Sur chaque maillage ainsi défini, l'équation à résoudre est évaluée. Généralement, cette portion de l'implémentation de cette méthode requiert peu de travail [13]. Toutefois, cette méthode nécessite un échange d'information entre les deux maillages, généralement réalisé de manière itérative. Cela signifie que la solution sur les deux grilles est résolue séquentiellement, avec un échange de la solution entre les deux grilles après chaque étape de résolution. Ces étapes sont répétées jusqu'à la convergence de la solution. Ce processus itératif doit être réalisé à chaque pas de temps, mais s'intègre bien dans le processus itératif pour résoudre la non-linéarité de l'équation de Navier-Stokes. Cette approche devient plus complexe lorsque plusieurs maillages représentant plusieurs particules proches les unes des autres se chevauchent. Le transfert d'information dans ces cas doit être réalisé sur plusieurs maillages simultanément [111]. Il est important de noter que l'interpolation de la solution, nécessaire pour le transfert d'information entre les deux maillages, n'est pas conservative.

Étirement du maillage

Cette approche requiert la définition d'un maillage qui prend en compte la topologie des objets devant être déplacés (maillage conforme). Le maillage est ensuite étiré et déplacé pour suivre l'objet dans son mouvement. Deux approches existent pour déplacer les noeuds du maillage : celles basées sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles (EDP) pour définir le mouvement des noeuds, et celles basées sur l'interpolation du mouvement des noeuds à la frontière en mouvement et des noeuds de référence dans le domaine [112]. L'approche par EDP consiste généralement à résoudre une équation où le maillage est traité comme un matériau déformable, comme le présentent Schreurs *et al.* [113]. Le maillage est alors considéré comme un matériau élastique auquel on impose un déplacement, et le champ de déplacement observé pour le maillage est utilisé pour déplacer les noeuds. Cette méthode ne garantit pas de conserver la qualité du maillage pendant sa déformation, ce qui peut mener à des maillages de mauvaise qualité [112]. Les méthodes par interpolation du mouvement des noeuds sont généralement réalisées en utilisant une fonction d'interpolation, où chaque noeud est déplacé en fonction du mouvement interpolé entre les noeuds à la frontière en mouvement et les noeuds de référence le long des frontières du domaine de calcul [114]. Certaines méthodes forment un hybride entre les approches basées sur les EDP et celles basées sur l'interpolation. Ces approches appliquent une méthode de type EDP sur un maillage grossier, puis interpolent

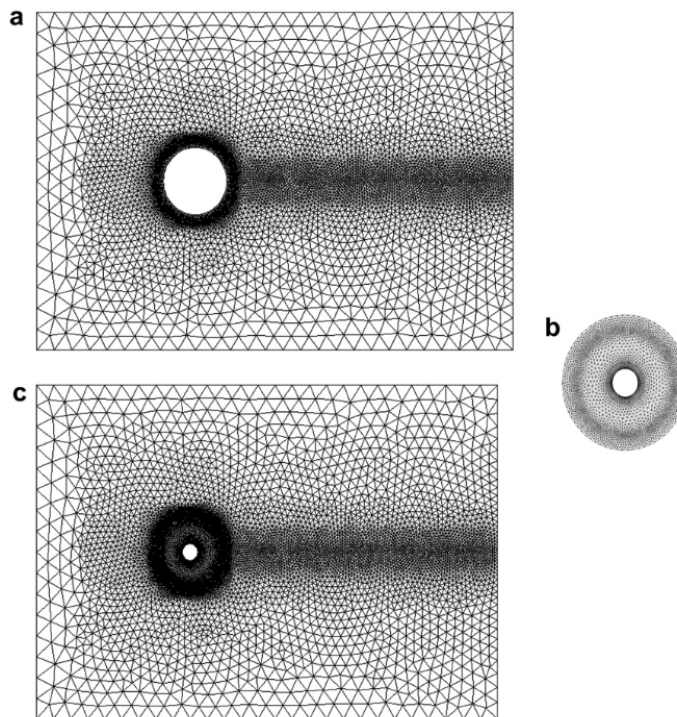


FIGURE 2.14 Présentation des grilles utilisées afin de résoudre l'écoulement autour d'un cylindre à partir d'une grille chimère. (a) la grille principale du domaine de calcul (b) la grille représentant l'objet (c) la grille chimère formée par la superposition des grilles (a) et (b). Tiré de [13]

le déplacement obtenu pour le maillage grossier sur le maillage fin. Cet hybride est moins coûteux que l'approche EDP, étant donné que la déformation du maillage peut être résolue sur un maillage plus grossier [115]. Il est important de noter que ces approches sont généralement utilisées pour modéliser le mouvement de frontières n'ayant pas d'importants déplacements, afin de conserver une bonne qualité de maillage.

Conditions immergées

Les approches de type conditions immergées sont des méthodes d'imposition de conditions frontières développées pour représenter la présence d'un objet quelconque, sans que cet objet soit nécessairement représenté par la discrétisation du domaine Ω . Peskin est le premier à avoir mis en place cette approche en 1972 pour étudier l'écoulement de fluide autour d'une valve dans le cœur humain [116]. Cette approche est maintenant présente sous une forme ou une autre dans l'ensemble des méthodes de modélisation de type fini (différences finies, volumes finis, éléments finis). Deux branches de méthodes sont aujourd'hui dominantes

pour implémenter cette approche [117], à savoir les méthodes continues et les méthodes de reconstruction. Il est important de noter qu'à ma connaissance, les méthodes utilisant les approches de reconstruction n'ont pas été implémentées en éléments finis.

Approches continues Les approches continues visent à imposer que la solution à une position de l'écoulement soit égale à la valeur de la condition immergée. Cela requiert généralement une discrétisation de la condition immergée Γ . Cette approche inclut les méthodes de multiplicateurs de Lagrange proposées par Glowinski [118], l'approche de Nitsche mise de l'avant par Freund *et al.* en 1995 [119], l'approche originellement proposée par Peskin, et les approches de contrôle de Goldstein [120]. Ces approches se distinguent par la manière dont la solution est imposée, mais le principe reste similaire. Cette section détaille l'approche basée sur les multiplicateurs de Lagrange et l'approche basée sur la méthode de Nitsche.

L'approche par multiplicateurs de Lagrange nécessite l'ajout de variables au problème. Pour chaque variable ajoutée (chaque multiplicateur), il est possible de définir une nouvelle équation de contrainte (pour chaque élément de la discrétisation de Γ). Ces équations de contrainte permettent d'imposer la condition frontière désirée à un emplacement ponctuel sur le domaine utilisé pour la résolution du problème (Ω). Dans le cas de l'équation de Navier-Stokes, afin d'imposer une condition de Dirichlet sur la vitesse, la formulation des multiplicateurs de Lagrange prend la forme présentée aux équations (2.70) et (2.71). Cette approche a l'avantage de relier facilement l'imposition d'une condition frontière avec la dynamique de l'objet qu'elle représente. En effet, dans cette équation, le terme $\gamma^t \boldsymbol{\lambda}$ correspond à la quantité de mouvement fournie au fluide par l'objet immergé. Ce terme peut être réutilisé pour définir la force appliquée à l'objet en question. Toutefois, cette méthode nécessite la définition d'un nombre précis de multiplicateurs de Lagrange en fonction du maillage. En effet, si trop de multiplicateurs de Lagrange sont contenus dans un même élément de la discrétisation, cela peut mener à une matrice singulière.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \mathbf{u}) + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_{ext} + \gamma^t \boldsymbol{\lambda} \quad (2.70)$$

$$\gamma \mathbf{u} = f(x) \text{ sur } \Gamma \quad (2.71)$$

L'approche de Nitsche, quant à elle, utilise une formulation faible pour imposer la condition immergée. Étant donné qu'il s'agit d'une formulation faible, cette forme d'imposition de la condition de Dirichlet ne nécessite pas l'ajout d'équations supplémentaires au système matriciel. Cela permet d'éviter d'obtenir une matrice singulière lors de la résolution matricielle d'un problème. Toutefois, la formulation faible génère une erreur à la frontière, constituant ainsi un

compromis. Voici un exemple de la formulation de Nitsche pour l'équation de Navier-Stokes se trouve aux équations (2.72) et (2.73) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \mathbf{u}) + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_{ext} + \boldsymbol{\gamma} \quad (2.72)$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \alpha(\mathbf{u}_\Gamma - \mathbf{u}) \text{ sur } \Gamma, 0 \text{ autrement} \quad (2.73)$$

Dans les équations (2.72) et (2.73), α est une constante servant à contrôler la pénalisation d'une erreur sur la représentation de la condition frontière $\mathbf{u}_\Gamma$ par $\mathbf{u}$. Toutefois, ce type d'approche de conditions immergées présente des limites. En effet, les méthodes de discrétisation pour les méthodes finies requièrent un support continu à l'intérieur d'une cellule ou d'un élément utilisé pour la discrétisation. Cela implique que la solution et sa dérivée doivent être continues de part et d'autre de Γ pour un élément coupé par une condition immergée. Cela engendre une erreur importante sur la dérivée de la solution d'une équation différentielle à l'emplacement de Γ . En effet, à l'exception de quelques cas très spécifiques, la dérivée de part et d'autre d'une condition frontière de type Dirichlet ne possède pas un gradient continu. Cela implique que, peu importe la méthode utilisée pour résoudre l'équation différentielle, ces méthodes seront restreintes à un ordre de convergence de 1 au bord de la condition immergée.

Approches de reconstruction L'approche par reconstruction, également appelée approche à interface nette, en anglais *sharp interface method* ou *sharp edge method*, consiste à reconstruire la condition de Dirichlet imposée sur Γ en imposant une condition de Dirichlet aux nœuds de la discrétisation à proximité de la condition immergée. Cette définition de la condition de Dirichlet au nœud est réalisée à partir de l'information sur la solution se trouvant uniquement d'un côté de Γ à la fois. Cela permet d'avoir un gradient discontinu à l'emplacement de Γ . Cette approche vient donc lever la limitation de l'ordre de convergence des approches continues décrites précédemment. La première méthode suivant cette approche a été proposée par Mohd *et al.* [121]. Aujourd'hui, des méthodes plus raffinées existent pour implémenter cette approche. La méthode *Ghost-cell* proposée par Mittal [122], ainsi que la méthode d'interface proposée par Linnick *et al.* [123], sont de bons exemples de l'implémentation de cette approche. En 2018, Das *et al.* [124] ont également appliqué cette approche à un ordre élevé pour résoudre des problèmes de transfert de chaleur.

Comme mentionné précédemment, ces méthodes visent à reconstruire la condition frontière. Cela signifie que ces méthodes visent à représenter la présence d'une condition de Dirichlet $g(\mathbf{x}_\Gamma)$ sur Γ en imposant une condition de Dirichlet $g'(\mathbf{x}_i)$ aux nœuds de la discrétisation se trouvant à proximité de Γ . Cela est généralement réalisé en utilisant une approche d'in-

terpolation entre la condition frontière à Γ et la solution de part et d'autre de la condition immergée. Cette interpolation est généralement effectuée à l'aide d'un polynôme de Lagrange. $g'(\mathbf{x})$ est alors imposé comme étant la solution de cette interpolation entre $g(\mathbf{x}_\Gamma)$ et les nœuds n'étant pas directement à proximité de Γ .

Les différentes méthodes d'implémentation de cette approche varient principalement dans la sélection des points utilisés pour former l'interpolation. De plus, dans de nombreuses situations, on s'intéresse principalement à un seul côté de la condition immergée. En effet, lorsque les conditions immergées sont utilisées pour représenter un objet dans un écoulement de fluide, l'intérêt se porte généralement non pas sur l'écoulement à l'intérieur de l'objet, mais uniquement à l'extérieur. À titre d'exemple, la méthode *Ghost-cell* définit seulement la solution à l'extérieur de l'objet [122].

Cette approche a l'avantage de ne pas nécessiter la modification de l'équation de Navier-Stokes implémentée. Il est donc possible d'utiliser directement l'équation de Navier-Stokes ((2.1) et (2.2)). Toutefois, ces approches présentent une lacune lorsqu'il s'agit de déplacer la condition frontière Γ . En effet, des oscillations de pression peuvent être observées lorsque la condition immergée change de cellule. Cela est dû au changement brusque du support d'interpolation utilisé pour imposer la condition frontière. Ces oscillations ont été étudiées par Lee *et al.* [125]. Leurs travaux démontrent que la variation de pression observée lorsque les conditions immergées sont en mouvement est proportionnelle à l'erreur commise sur le champ de vitesse, divisée par la taille du pas de temps. Cette relation entre l'erreur commise due à un changement ponctuel de la position de Γ par rapport au maillage, l'oscillation de pression, la taille caractéristique du maillage (Δx) et le pas de temps (Δt) est présentée à l'équation (2.74). Dans cette équation, n est l'ordre de convergence en espace du schéma utilisé pour obtenir le champ de vitesse $\mathbf{u}$, A_f est l'amplitude de la variation de la force subie par une particule associée à l'erreur sur la pression.

$$A_f \sim \|\nabla p\| \sim \left\| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\| = \frac{1}{\Delta t} O(\Delta x^n) \quad (2.74)$$

Cette relation découle du fait que, lors du changement de cellule, la condition frontière change de support d'interpolation utilisé pour représenter la condition immergée. Ce changement engendre un saut dans les valeurs imposées aux nœuds à proximité de Γ . Ce saut est proportionnel à l'erreur en espace du schéma utilisé pour représenter le fluide.

En maintenant constante la condition de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), les oscillations de pression dues à l'utilisation de ce type de conditions immergées convergent donc à l'ordre 1 pour un schéma en espace d'ordre 2. L'historique des valeurs des degrés de liberté, lorsqu'ils passent de l'intérieur d'une particule à l'extérieur, n'est pas toujours clairement défini.

Cependant, Lee *et al.* soutiennent que ce changement de nature est aussi une des causes des oscillations de pression dans les schémas de type prédicteur-correcteur pour l'intégration en temps des équations de Navier-Stokes. L'impact de ce changement de nature pour des schémas implicites n'est pas mentionné dans la littérature.

Approche par coupure de cellule

Cette approche, principalement utilisée dans le cadre d'une méthode par éléments finis, propose d'ajouter des degrés de liberté à l'intersection entre la condition immergée et la discrétisation, comme illustré dans la figure 2.15. Cette méthode a la possibilité de maintenir l'ordre de convergence pour des méthodes d'ordre 2 [14, 126, 127]. En effet, étant donné que cette méthode redéfinit un maillage qui prend en compte la présence de la frontière immergée, elle peut maintenir l'ordre de convergence de la méthode utilisée. Toutefois, cette méthode est particulièrement complexe à implémenter pour des éléments qui ne sont pas des simplexes (triangles ou tétraèdres) ou pour des éléments d'ordre élevé. Pour cette raison, cette approche ne sera pas détaillée davantage.

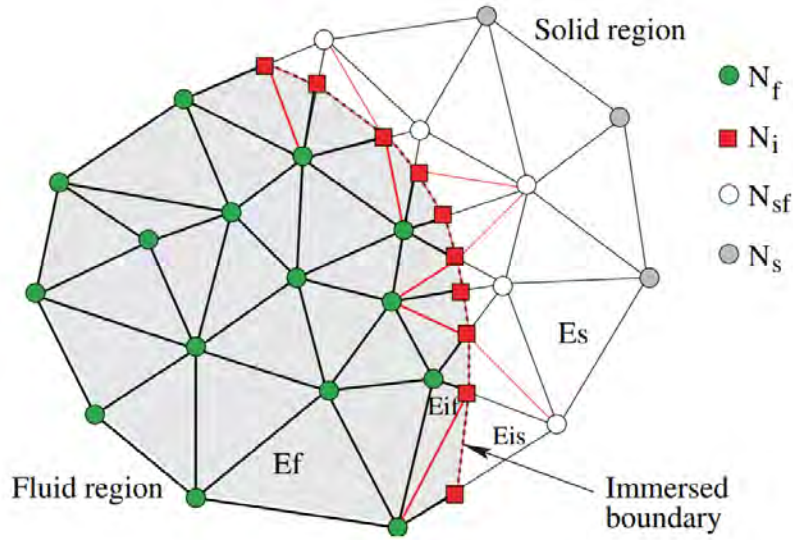


FIGURE 2.15 La méthode *cut-cell* ajoute des degrés de liberté à l'intersection entre la condition immergée et les éléments. Les éléments coupés sont par la suite redéfinis en plusieurs sous-éléments. Tiré de [14]

2.4.5 Couplage entre la CFD et la DEM pour une approche de CFD-DEM résolue

Le couplage entre la CFD et la DEM comporte certaines difficultés, comme discuté dans la Section 2.4.1. Le contact entre deux particules se produit à des échelles de temps très petites (10^{-6} s) relativement aux échelles de temps associées à la dynamique du fluide. Si l'approche de particule molle est utilisée, il est nécessaire de séparer la résolution temporelle de la DEM et de la CFD [100]. Cela signifie que la résolution de la DEM et de la CFD doit être couplée à une certaine fréquence.

Le couplage des forces inertielles du fluide (par exemple, la force de masse virtuelle) avec la dynamique des particules peut être inconditionnellement instable avec un couplage explicite dans certaines conditions. Dans le cadre de l'approche CFD-DEM, où les forces inertielles du fluide découlent naturellement de l'imposition de la condition de non-glissement à la surface de la particule, il est donc nécessaire de considérer cette limitation. La limite exacte de stabilité pour un cas précis n'est pas simple à déterminer en raison de la force d'histoire. Toutefois, une borne inférieure existe sur le ratio de masse volumique de la particule par rapport à la masse volumique du fluide. Cette borne inférieure correspond au coefficient de masse ajoutée (C_m) de la particule [128].

$$C_m \leq \frac{\rho_p}{\rho_f} \quad (2.75)$$

Afin d'éviter les limitations provenant de cette condition, il est nécessaire d'utiliser une approche de couplage implicite pour la vitesse des particules. Le couplage implicite de la dynamique des particules requiert la résolution implicite de l'écoulement du fluide. Pour coupler implicitement la dynamique des particules, deux catégories de méthodes existent. D'abord, l'approche monolithique implique la résolution d'un seul système matriciel qui inclut le champ de vitesse et de pression du fluide ainsi que la vitesse des particules. Ce système est alors résolu à l'aide de la méthode de Newton. Cette approche est numériquement complexe à implémenter étant donné que les équations reliées à la vitesse de la particule peuvent impliquer un grand nombre de degrés de liberté associés aux champs de vitesse du fluide. Pour cette raison, cette approche est très rarement utilisée. L'alternative est d'utiliser une approche de point fixe pour résoudre implicitement la dynamique des particules [128, 129] en parallèle avec les itérations de Newton utilisées pour résoudre le champ de vitesse et de pression. Cette approche, combinée à un choix adéquat d'un coefficient de relaxation pour la méthode de point fixe, permet une convergence du système sans nécessiter l'implémentation

d'une approche monolithique.

CHAPITRE 3 OBJECTIFS DE RECHERCHE

Ce chapitre introduit d’abord une critique de la revue de littérature. À partir de cette critique, l’objectif principal de cette thèse est défini puis détaillé en sous-objectifs spécifiques. Finalement, l’organisation de la thèse est présentée.

3.1 Critique de la revue de littérature

Cette section propose une analyse critique de la recherche actuelle dans le domaine des modèles CFD-DEM résolus, mettant en lumière trois sujets d’importance. Initialement, elle souligne le manque de solveurs CFD-DEM résolus d’ordre élevé. Ensuite, elle aborde les questions de stabilité liées au couplage fluide-solide. Finalement, cette section s’intéresse à une application spécifique et essentielle : le développement d’une modélisation approfondie des interactions hydrodynamiques pour des paires de particules, un domaine où les recherches actuelles n’ont pas encore abouti à un modèle de force hydrodynamique universel. Ces éléments, pris collectivement, mettent en évidence les améliorations nécessaires dans l’étude des écoulements multiphasiques.

3.1.1 Absence de méthode d’ordre élevé appliquée à la CFD-DEM résolue

À ce jour, aucune méthode d’ordre élevé n’a été utilisée dans les solveurs de type CFD-DEM résolu. Un tel modèle requiert une méthode de représentation des particules (IB, grille chimère, remaillage) qui permet de maintenir l’ordre du schéma numérique employé et un schéma qui permet également d’atteindre un ordre de convergence élevé. Or, les méthodes de conditions immergées en éléments finis sont principalement fondées sur des méthodes continues ou *cut-cell*, comme illustré dans la Section 2.4.4. Ces méthodes sont limitées à un ordre de convergence de 1 ou s’avèrent particulièrement complexes à mettre en œuvre pour des éléments d’ordre élevé et/ou pour des éléments qui ne sont pas des simplexes. Cependant, des méthodes de conditions immergées d’ordre élevé existent dans le cadre des approches de volumes finis et de différences finies. Toutefois, leur application en combinaison avec un schéma de discrétisation d’ordre élevé pour représenter des frontières en mouvement n’a pas encore été réalisée. Cela est principalement dû au fait que ces solveurs sont rarement implémentés de façon à permettre l’ordre élevé en raison de la complexité de leur programmation pour une implémentation dans une architecture informatique massivement distribuée. De plus, le changement de nature des degrés de liberté (du passage de l’intérieur à l’extérieur d’un objet)

lorsqu'une condition est en mouvement a un impact qui est mal défini sur la convergence en temps des méthodes d'ordre élevé.

3.1.2 Stabilité du couplage fluide-solide des modèles de type CFD-DEM résolus

Dans les modèles de type CFD-DEM résolus, le couplage explicite des forces inertielles (force de masse ajoutée et force d'histoire) et de la dynamique des particules peut conduire à des instabilités sous certaines conditions. Cependant, le couplage implicite de la dynamique des fluides numériques (CFD) avec celle des particules présente des défis spécifiques, comme le choix d'un coefficient de relaxation approprié lors de l'utilisation de la méthode de point fixe. Ce paramètre est crucial non seulement pour diminuer le nombre d'itérations nécessaires à la convergence, mais aussi pour garantir la stabilité du processus de résolution. Le coefficient de relaxation doit être ajusté spécifiquement pour chaque cas, et son calibrage repose généralement sur des facteurs tels que le coefficient de masse virtuelle et le rapport de densité entre la particule et le fluide. La détermination d'un coefficient universellement optimal reste une question peu abordée dans la littérature scientifique. D'un autre côté, l'approche monolithique est souvent délaissée en raison de sa grande complexité computationnelle et des défis associés à la gestion des degrés de liberté liés à la résolution de la dynamique des fluides, ce qui rend son utilisation peu pratique dans des environnements informatiques parallèles et distribués.

3.1.3 Modélisation de l'interaction d'une paire de particules

Les études sur l'interaction entre deux particules capables de se déplacer l'une par rapport à l'autre se sont principalement concentrées sur des cas spécifiques de sédimentation et ont été limitées à certaines conditions, telles que la position initiale le nombre d'Archimède et le ratio de densité des particules. Pour les particules fixes, des recherches approfondies ont été menées à l'aide de méthodes numériques et expérimentales. Cependant, ces études n'ont pas abouti à la création de modèles de force hydrodynamique utilisables pour prédire les interactions entre particules mobiles. L'élaboration d'un tel modèle pourrait simplifier l'analyse des interactions dans un fluide en évitant de résoudre le comportement du fluide autour des particules.

3.2 Objectif principal

**Développer une approche de type CFD-DEM résolue d'ordre élevé afin
d'identifier les mécanismes d'interaction hydrodynamique de particules en
mouvement dans un écoulement incompressible.**

3.3 Objectifs spécifiques

3.3.1 Objectif spécifique 1

Développer une méthode de conditions immergées d'ordre de convergence contrôlable (2, 3 ou 4) pour la représentation d'assemblages de particules sphériques.

L'utilisation de conditions immergées afin de représenter des assemblages de particules est particulièrement intéressante étant donné qu'elle permet d'éviter le processus de maillage de ces assemblages et permet l'utilisation de maillages cartésiens structurés qui sont reconnus pour la qualité des résultats qu'ils permettent d'obtenir. Toutefois, les méthodes de conditions immergées dans le contexte de la méthode des éléments sont principalement limitées à un ordre de convergence de 1. Cette situation est particulièrement limitante dans les cas où la quantité d'intérêt principale est la force appliquée sur une particule. En effet, la force appliquée sur une particule dépend de la dérivée du champ de vitesse qui n'est pas nécessairement bien posée pour des méthodes d'ordre 1. Définir une méthode qui est capable de garantir un ordre de convergence quelconque permettra de bénéficier du potentiel des méthodes d'ordre élevé discuté dans la section 2.3.

3.3.2 Objectif spécifique 2

Développer un solveur de type CFD-DEM résolu implicite d'ordre contrôlable (2 ou 3) basé sur l'utilisation des méthodes de conditions immergées.

Les approches de conditions immergées permettent de représenter avec précision des particules en mouvement, sans nécessiter des manipulations importantes du maillage. Cette approche est donc parfaitement adaptée à l'étude de l'hydrodynamique d'essaims de particules. La combinaison de cette approche avec une méthode de couplage implicite avec la dynamique des particules permettrait d'avoir un solveur profitant des avantages des méthodes d'ordre élevé pour l'évaluation de la force à la surface des particules, tout en étant numériquement stable pour des particules de faible masse volumique par rapport au fluide dans lequel elles sont immergées. L'utilisation d'un schéma d'ordre élevé (2 ou 3) pourrait aussi permettre de réduire le temps de calcul nécessaire pour atteindre un niveau de précision donné. La réduction de l'ordre de convergence relativement à l'objectif 3.3.1 est due au couplage entre la CFD et la DEM. La réalisation de cet objectif permettrait de créer le premier modèle de type CFD-DEM résolu d'ordre contrôlable.

3.3.3 Objectif spécifique 3

Définir un modèle de force hydrodynamique pour la sédimentation d'une paire de particules et caractériser la capacité prédictive de ce modèle.

La création d'un modèle de force hydrodynamique pour l'interaction d'une paire de particules permettra d'étudier leurs mécanismes d'interaction. La comparaison des résultats de ce modèle avec ceux d'un modèle de type CFD-DEM résolu, utilisé comme référence, permet également l'étude de l'impact des hypothèses prises lors de la création d'un modèle de force hydrodynamique (par exemple, l'hypothèse d'écoulement pleinement développé utilisée dans les modèles de force de traînée). Le cas de la sédimentation de deux particules permettra d'identifier la plage de validité de certaines hypothèses et de définir des limitations sur leur applicabilité. Cette étude sera réalisée pour une gamme de nombres d'Archimède $Ar \in [20, 3000]$ et de rapports de masse volumique particule-fluide $\rho^* \in [1.5, 1000]$. Cette gamme a été déterminée afin d'obtenir des nombres de Reynolds compris entre 1 et 50, couvrant ainsi les écoulements de type liquide solide ainsi que ceux de type gaz solide. Cette gamme de nombres de Reynolds a été sélectionnée, car elle permet d'éviter l'apparition d'effets chaotiques dus à une traînée instationnaire des particules, tout en se situant en dehors du régime de Stokes. Les résultats de cette comparaison entre la dynamique obtenue à partir d'un modèle de force et celle obtenue à partir du modèle de type CFD-DEM résolu permettront, potentiellement, d'identifier des voies d'amélioration des modèles de force hydrodynamique.

3.4 Organisation de la thèse

Les chapitres suivants de cette thèse présenteront le travail réalisé afin de parvenir à la réalisation des sous-objectifs et de l'objectif principal. D'abord les outils méthodologiques communs à la réalisation de l'ensemble des objectifs sont présentés dans le Chapitre 4. Ce chapitre introduit Lethe, le logiciel dans lequel le solveur développé dans cette thèse a été implémenté.

Par la suite, cette thèse présentera la réalisation de trois articles, respectivement associés aux trois sous-objectifs de recherche. Chaque article sera accompagné d'une contextualisation ainsi que d'une discussion portant sur les limitations et sur d'autres aspects méthodologiques n'ayant pas été abordés dans l'article.

De plus en annexe, deux articles issus de collaborations réalisées durant ma thèse sont présentés. La méthodologie exposée dans ces articles a été partiellement reprise pour la rédaction de l'article 3 du Chapitre 7. Le premier article, rédigé par ma collègue Valérie Bibeau, porte

le titre : *Artificial Neural Network to predict the power number of agitated tanks fed by CFD simulations* (Annexe D). Cet article établit la méthodologie employée au Chapitre 7 pour la réalisation d'une régression des données de simulation au moyen de réseaux de neurones. Le second article, rédigé par ma collègue Carole-Anne Daunais, est intitulé : *An Extensive Study of Shear Thinning Flow Around a Spherical Particle for Power-Law and Carreau Fluids* (Annexe E). Cet article décrit la méthodologie adoptée au Chapitre 7 afin de constituer une base de données de forces hydrodynamiques sur des sphères à partir de résultats de simulation, incluant notamment les procédures pour la définition du maillage, le choix des éléments finis et la dimension minimale requise pour le domaine de calcul.

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

Cette section présente les outils utilisés au cours de la réalisation de cette thèse. Tout d’abord, elle décrit les deux plateformes logicielles employées : Lethe et le modèle en Python. Ensuite, elle expose la stratégie d’implémentation des modèles numériques, incluant les méthodes de vérification et de validation mises en oeuvre. L’objectif de cette section est de regrouper les éléments méthodologiques communs aux différents sous-objectifs. Cependant, la méthodologie spécifique à chaque sous-objectif est détaillée dans le chapitre qui lui est consacré.

4.1 Plateformes logicielles

Deux plateformes logicielles sont utilisées dans le cadre de cette thèse. D’abord le logiciel Lethe, dans lequel la méthode CFD-DEM résolue est implémentée, puis un code Python utilisé pour définir un modèle simplifié de la dynamique de sédimentation de deux particules.

4.1.1 Lethe

Lethe est un logiciel libre d’accès (*open-source*) conçu pour la modélisation d’écoulements spécifiques au domaine du génie chimique (écoulements avec particules ou à plusieurs phases). Lethe est maintenu sur la plateforme Github [130]. Écrit en C++, il s’appuie sur la bibliothèque deal.ii pour la méthode des éléments finis [131], également écrit en C++. À travers cette bibliothèque, Lethe utilise Trilinos pour la résolution des systèmes matriciels [92], et p4est pour le partitionnement des problèmes sur une architecture informatique distribuée et le raffinement adaptatif de maillage [132]. Ce logiciel peut fonctionner avec plus de 1000 processeurs simultanément [11]. Il contient divers modules pour la modélisation d’écoulements où plusieurs phénomènes physiques peuvent interagir. Dans le contexte de cette thèse, deux modules sont particulièrement intéressants : le module de CFD avec conditions immergées (Lethe-fluid-sharp) et le module DEM (Lethe-particles).

La définition des cas étudiés dans n’importe quel solveur de Lethe est réalisée à travers un fichier de paramètres de type `.prm`. Ce fichier de paramètres contient diverses sous-sections, chacune contrôlant un aspect spécifique de la simulation, tels que le maillage, les propriétés physiques du fluide, la résolution non linéaire, la résolution des systèmes linéaires, etc.

Lethe-fluid-sharp

J’ai développé ce module de Lethe pour répondre aux sous-objectifs 1 et 2. Ce solveur repose sur l’implémentation du solveur CFD de base de Lethe, nommé Lethe-fluid, qui résout les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible. L’implémentation de ces équations et l’approche de résolution employée par ce solveur sont identiques à la formulation GLS monolithique présentée à la Section 2.3.2. Ce solveur se distingue de Lethe-fluid par l’intégration d’une approche de conditions immergées. Les détails de la méthode de conditions immergées implémentée sont exposés au Chapitre 5. Ce solveur est également capable de gérer l’adaptation de maillage autour des objets représentés par les conditions immergées.

Lethe-particles

Ce module implémente la méthode des éléments discrets (*Discrete Element Method*, DEM) avec une approche de particule molle [133]. Il permet de modéliser de grands systèmes granulaires et bénéficie de l’architecture distribuée de Lethe grâce à l’utilisation de la bibliothèque p4est. Plusieurs modèles de force de contact sont implémentés, y compris les modèles de forces de contact linéaires et non linéaires (modèle de Hertz). Pour cette thèse, seul le module d’évaluation des forces de contact de ce solveur est utilisé, la dynamique des particules étant résolue directement dans le module de couplage entre la CFD et la DEM.

Couplage

Le module de couplage spécifique à la méthode CFD-DEM résolue est intégré au sein du solveur Lethe-fluid-sharp. Ce module utilise les deux modules précédents (Lethe-fluid-sharp et Lethe-DEM) pour résoudre de manière implicite la dynamique des particules. La méthodologie de couplage, qui est au coeur de la réalisation du sous-objectif de recherche 2, est détaillée dans le Chapitre 6 consacré à cet objectif.

4.1.2 Modèle dynamique en Python

Le modèle dynamique réduit (*Reduced Order Model*, ROM) de l’interaction de deux particules est implémenté en Python. Ce code se divise en deux parties : la première est un outil de régression utilisant un réseau de neurones artificiels (*Artificial Neural Network*, ANN), et la seconde concerne le module dynamique qui intègre les modèles des forces hydrodynamiques. L’outil de régression pour les ANN emploie la bibliothèque TensorFlow [134] et se base sur la méthodologie proposée par Bibeau *et al.* pour définir le ANN [135], dont l’article est inclus dans l’annexe D. Le modèle dynamique résout l’équation différentielle ordinaire résultant des

modèles de force. Ce modèle utilise la bibliothèque NumPy [136] pour la mise en oeuvre des fonctions mathématiques et le calcul vectoriel.

4.2 Méthodologie d'implémentation

Pour prévenir ou identifier les erreurs pendant le développement du code nécessaire à l'accomplissement des objectifs de recherche, plusieurs outils sont mis en oeuvre. Le code est tout d'abord versionné à l'aide d'un système de gestion de versions (GitHub). De plus, des méthodes de vérification et de validation sont appliquées pour assurer la précision, la qualité et la conformité des algorithmes implémentés [137]. Cette section décrit ces outils.

4.2.1 Gestion de versions

La majeure partie du développement de code effectué dans le cadre de cette thèse a été intégrée dans la branche principale de Lethe. Les versions de Lethe sont conservées dans un dépôt GitHub [130]. Chaque modification du code nécessaire à l'implémentation des algorithmes développés au cours de cette thèse a été intégrée progressivement dans cette branche. Pour apporter des modifications à la branche principale de Lethe, une procédure spécifique doit être respectée. Cette procédure garantit la qualité générale du code et minimise les risques d'introduction d'erreurs logicielles. Les étapes sont les suivantes :

1. Implémenter les changements de code nécessaires à une nouvelle fonctionnalité sur une branche distincte de Lethe. Cette branche dispose de sa propre gestion de version, ce qui permet de revenir en arrière si des erreurs sont commises lors du développement de cette fonctionnalité.
2. Vérifier que les modifications au code n'ont pas altéré les fonctionnalités de Lethe de manière inattendue.
3. Soumettre une demande d'intégration (*pull request*) à la branche principale de Lethe. Cette demande doit inclure une description des changements effectués et, si nécessaire, l'ajout de tests pour la nouvelle fonctionnalité.
4. Faire réviser le code par des pairs. Chaque changement apporté à la branche principale de Lethe doit être examiné par au moins deux autres contributeurs.
5. Après une révision et l'obtention de l'approbation des réviseurs, le code peut être fusionné (*merged*) dans la branche principale de Lethe.

4.2.2 Vérification de code

La vérification de code assure que l'équation que l'on désire résoudre est correctement résolue par les différents solveurs et que le schéma de résolution appliqué présente les propriétés de convergence escomptées. Deux outils principaux sont utilisés pour la vérification : le contrôle de l'indépendance galiléenne des solveurs et la méthode des solutions manufacturées [137].

Indépendance galiléenne

L'évaluation de l'indépendance galiléenne vise à confirmer que les solveurs fournissent la même solution, indépendamment de la position initiale et de l'orientation du système de référence du problème. Pour mener à bien cette vérification, il suffit de formuler un même problème dans différents systèmes de référence et de vérifier que la solution obtenue est identique dans chaque cas. Cette procédure est généralement effectuée dès les premières étapes du développement du code pour s'assurer que les transformations nécessaires à la résolution des équations sont correctement mises en oeuvre. Par exemple, cette méthode a permis de détecter plusieurs erreurs liées à l'orientation des vecteurs employés dans le calcul des forces exercées sur les particules.

Méthode des solutions manufacturées

La méthode des solutions manufacturées, en anglais *method of manufactured solutions* (MMS) consiste à vérifier que le solveur converge vers la solution d'un problème pour lequel on a préalablement défini la solution. Dans la majorité des cas, il est nécessaire de définir un terme source qui dépend de la solution choisie afin de satisfaire les équations que l'on désire résoudre avec le solveur. Dans le cas de l'équation de Navier-Stokes, on définit un champ de vitesse $\mathbf{u}_a$ et de pression p_a , puis on définit un terme source $\mathbf{S}$ afin de préserver la validité de l'équation. Si $\mathbf{u}_a$ n'est pas à divergence nulle, alors il est nécessaire de définir également un terme source de masse pour satisfaire l'équation de continuité. Cela donne :

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \mathbf{u}_a}{\partial t} + (\mathbf{u}_a \cdot \nabla) \mathbf{u}_a + \nabla p_a - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_a \quad (4.1)$$

$$\boldsymbol{\tau}_a = \frac{\mu}{\rho_f} \left(\nabla \mathbf{u}_a + (\nabla \mathbf{u}_a)^T \right) \quad (4.2)$$

Dans Lethe, un terme source peut être directement ajouté au problème à partir d'une section dédiée du fichier de paramètres. Selon la solution de référence utilisée ($\mathbf{u}_a$ et p_a), la définition du terme source $\mathbf{S}$ peut être très complexe et laborieuse. Afin de simplifier la définition du

terme source $\mathcal{S}$, le moteur de calcul symbolique SymPy [138] est utilisé. L'application de cette méthode de vérification est détaillée lors de son utilisation au travers des chapitres de cette thèse.

4.2.3 Validation

La validation consiste à s'assurer que les résultats des simulations réalisées avec les modèles développés dans le cadre de cette thèse sont adéquats pour modéliser la physique du monde réel. Cela est généralement réalisé en reproduisant numériquement des expériences réalisées en laboratoire, puis en comparant les résultats obtenus. Toutefois, dans certains cas, il n'y a pas de résultats expérimentaux fiables pour valider certaines propriétés du solveur. Dans ces cas, si certaines expériences numériques ont été répétées avec plusieurs autres solveurs, les résultats de ces simulations peuvent servir de référence pour valider le solveur. Dans le cadre de cette thèse, les résultats qui ont servi de référence à la validation proviennent de plusieurs sources, principalement de publications présentant des expériences adéquatement répétables, d'expériences réalisées en laboratoire et, dans certains cas, d'expériences numériques reproduites par plusieurs groupes de recherche utilisant divers solveurs.

4.3 Analyse des données

Les modèles numériques développés dans cette thèse produisent une grande quantité de données qui doivent être analysées et souvent visualisées. Cette section présente brièvement les outils utilisés pour réaliser l'analyse des données ainsi que la visualisation des résultats de simulation.

4.3.1 Post-traitement des données

Le post-traitement des données de simulation à des fins d'analyse est généralement réalisé en Python, à l'aide des librairies NumPy [136] et Matplotlib [139]. Ces outils permettent de manipuler facilement les données de simulation obtenues ainsi que de produire les graphiques nécessaires à leur analyse.

4.3.2 Visualisation

La visualisation des résultats de la CFD est réalisée à l'aide du logiciel ParaView [140]. Cet outil permet de visualiser facilement les écoulements de fluides ainsi que de produire des visualisations servant à l'analyse des résultats.

CHAPITRE 5 ARTICLE 1: DEVELOPMENT OF A HIGH-ORDER CONTINUOUS GALERKIN SHARP-INTERFACE IMMERSED BOUNDARY METHOD AND ITS APPLICATION TO INCOMPRESSIBLE FLOW PROBLEMS

Lucka Barbeau, Stéphane Étienne, Cédric Béguin, Bruno Blais

Contribution de Lucka Barbeau: Conceptualisation, Méthodologie, Logiciel, Rédaction - version originale, Validation, Rédaction - révision & édition, Visualisation, Analyse formelle.

Publié dans Computers & Fluids, volume 239, article 105415, 25 Mars 2022

5.1 Contexte de l'article

Cet article vient directement répondre au sous-objectif de recherche 1 présenté à la Section 3.3.1. Il détaille l'implémentation d'une méthode de conditions immergées permettant de conserver l'ordre de convergence du schéma d'éléments finis utilisés. Cette méthode est par la suite vérifiée et validée. Cet algorithme permettra donc une représentation précise des particules dans le fluide. Suivant la présentation de l'article, ce chapitre introduit certains éléments de méthodologies complétant le travail présenté dans cette publication.

Abstract: The sharp-interface immersed boundary method is a strategy to impose boundary conditions on complex geometries while simplifying the meshing process. This method can offer a high-order of accuracy. Most sharp-interface methods have been developed in the context of finite volume or finite difference methods. In this paper, we introduce, verify, and validate a novel high-order sharp-interface immersed boundary method in the context of the finite element method. We apply this method to the incompressible Navier–Stokes equations using a pressure-stabilizing/Petrov–Galerkin (PSPG) stabilization. We verify that we obtain a high order of convergence through Taylor-Couette flow simulations. We validate the results obtained for the drag, lift, and Strouhal number of the flow behind a cylinder at $Re = 200$. We investigate the flow around a sphere at $Re = 100$ and compare the drag force and the characteristics of the recirculating zones with experimental and numerical results obtained in the literature. Finally, the sharp-interface method is used to study a packing of 10 spheres at $Re = 50$. The results are compared to those obtained with a conformal mesh. It is shown that the sharp-interface immersed boundary method preserves the high-order of the finite element scheme and accurately predicts the steady-state and transient flow around particles, including the evaluation of the particle-fluid forces.

5.2 Introduction

Immersed boundary methods (IBM) are a well-established approach to impose boundary conditions on non-matching domains. This strategy was originally introduced by Peskin in 1972 [116] and was used to analyze the blood flow around a valve within the human heart. This method has the great advantage of allowing the implementation of the boundary condition of a complex immersed (or embedded) topology on a Cartesian structured mesh. This allows the simulation of moving boundaries on a fixed computational domain. Additionally, it also allows the simulation of numerous, possibly deforming, objects that are embedded in the computational domain. Consequently, these methods not only greatly reduce the complexity of the mesh, thus simplifying the meshing process but also opening up a large range of possibilities for the simulation of moving and/or deforming domains. Even though IBM were mostly developed in the context of fluid–structure interaction (see [117] for an extensive review), they have also been applied to heat-transfer problems [141, 142] and mass-transfer problems [143].

Multiple formulations of IBM have appeared over the years since the early work of Peskin. IBM have been applied and refined in all the classical finite numerical methods (finite difference, finite volume, and finite element methods (FEM)) and are used in numerous engineering fields. Two main categories of IBM have emerged over the years: forcing (or continuous) and reconstruction (e.g. sharp-interface) methods [117]. Methods based on forcing function work by locally defining source terms at the boundary or within the immersed object. In fluid–structure interaction, the source term represents the momentum transferred to the fluid by the object immersed in it. The original method defined by Peskin in 1972 [116] falls in this category, as well as the feedback approach proposed by Goldstein *et al.* in 1993 [120], or the Nitsche methods exposed by Freund *et al.* in 1995 [119]. The Lagrange multiplier method presented by Glowinski *et al.* in 1999 [118] also falls into this category. In contrast, the sharp-interface method relies on reconstructing the boundary condition at the position of the degree of freedom (DOF) around the immersed boundary. The B-spline method proposed by Mohd-Yusof in 1997 [121] falls in this category and is, to our knowledge, the first usage of this kind of method. The sharp interface method defined using ghost-cells by Mittal *et al.* in 2008 [122] also follows this approach. A method that could also be grouped in this category is the ghost fluid method proposed by Fedwik *et al.* [144] in 1999, where the method is used to impose the discontinuity of properties between two fluids at the location of their interface.

The two main approaches defined previously have their limitations. The continuous methods are generally limited to low order of convergence as the solution (and its gradient) must be continuous at the boundary. This implies that the gradient is not properly defined at the

location of the immersed boundary. As for the sharp methods, they allow a discontinuity in the gradient of the variables and, consequently, enable a higher order of convergence. However, they suffer from limitations when the boundary is moving since the nodes change from being subject to the fluid equation to being a boundary condition. This may lead to issues regarding pressure continuity in time, which, in turn, leads to spurious pressure oscillations on the boundary [125].

In recent years, there has been an increasing interest in the development of high-order methods as they may increase the precision obtained for the same amount of computation time [11, 145]. Most immersed boundary methods in the literature are limited to first or second-order of convergence, and only a few allow for higher order [146, 147]. Methods with a high-order of convergence are mostly available in the context of the finite difference and finite volume methods. In FEM, most methods used to represent immersed boundaries are based on forcing functions since they can be naturally introduced [119, 148]. These are generally first-order methods if applied directly. Two other approaches were found in the literature to preserve the order of convergence of the underlying FEM scheme: the unfitted FEM approach and the shifted interface method.

The unfitted FEM approach has mostly been applied to the Poisson equation to take into account discontinuities in the material properties [149]. However, the same approach can be used to impose Dirichlet boundary conditions. This method relies on the duplication of an element when it is cut by an immersed boundary. Each new element is associated with a side of the boundary. Nitsche’s method is used to maintain the continuity of the solution at the boundary between the two elements. It requires the definition of a penalty parameter associated with Nitsche’s method and the use of stabilization terms at the location of the boundary. It allows the element to have a discontinuous gradient when it is cut by the immersed boundary. A more in-depth description of this approach is given by Burman *et al.* [150, 151]. Burman *et al.* also showed that this approach is compatible with high-order methods.

The shifted interface method proposed by Li *et al.* [152] is also based on Nitsche’s method. In this case, the boundary condition is weakly imposed on a surrogate boundary composed of the faces of the mesh cut by the immersed boundary. Using a Taylor expansion on the variable of interest and the value of the boundary condition at the boundary location, it is possible to define a new boundary condition at the location of the surrogate boundary. As in the unfitted FEM approach, this method requires a penalty parameter.

There are also a few methods that rely on cut cells and element enrichment to represent the immersed boundary directly [14, 126, 127]. The latter maintains second-order accuracy, but

their implementation at higher-order or for elements that are not simplices (e.g. triangles or tetrahedrons) is highly challenging.

To our knowledge, the sharp-interface method remains unused in the context of FEM. However, FEM has attractive properties; notably, it easily allows for the use of higher order elements, is very suitable for the simulation of viscous flows, and can easily be coupled with dynamic mesh (h) or order (p) adaptation.

In this article, we extend the work of Peller *et al.* [153] and Das *et al.* [124] to allow an application of the sharp interface IBM in the framework of the finite element method within the open-source CFD code Lethe [11], which is based on the deal.II library [154]. This method can also be seen as an extension of the method proposed by Li *et al.* [152] to the Navier–Stokes equations using strongly, instead of weakly, imposed boundary conditions. Compared to the unfitted FEM approach, our method does not require additional degrees of freedom or the use of a penalty parameter and still maintains the order of convergence of the underlying scheme. Even though the method can be used to implement Dirichlet boundary conditions for most partial differential equations (PDE), we limit our application to the case of the incompressible Navier–Stokes equations and, in particular, to the flow around an assembly of static or rotating circles (in 2D) or spheres (in 3D). First, we present the sharp-edge immersed boundary approach as a general approach to impose Dirichlet boundary conditions on immersed objects. Then, we introduce the SUPG/PSPG stabilized incompressible Navier–Stokes formulation with which the sharp-interface IBM is paired. This results in an immersed boundary scheme for which the order can be controlled at run time. This scheme is verified and validated in 2D using a Taylor–Couette flow and von Karman vortex street and in 3D using the flow around a single sphere or an assembly of spheres. We show that the sharp-edge approach introduced therein this work can reach high accuracy and can be used not only to predict the flow around spherical particles, but also precisely calculate the forces and torque acting on them.

5.3 Sharp-interface immersed boundaries

The objective of the sharp-interface IBM is to allow the solution of the immersed boundary problem to have a discontinuous gradient on either side of the immersed boundary on which a Dirichlet boundary condition is to be imposed. This enables the solution to have a higher order of convergence than traditional approaches. To achieve this, the interpolation function of the solution must be removed on cells cut by the boundary as it would enforce a continuous gradient at the location of the immersed boundary. After the cells cut by the boundary are identified, the contribution of these cells to the problem is removed. This disconnects both

sides of the problem. The method then replaces the equation of the DOFs located in each cell cut by the boundary with an extrapolation function. The extrapolation function depends on the properties of the immersed boundary (velocity, shape, etc.).

We introduce the following notation:

- We define Ω as the domain in which the PDE is solved using the finite element method.
- We define $\Gamma \in \Omega$ as the immersed body on which a Dirichlet boundary condition is to be imposed.
- We define Ω_γ as a cell cut by the interface and Ω_Γ as the union of all cells which are cut by the interface.
- We define the effective domain Ω_E as the domain in which the finite element problem is not affected by Γ such that $\Omega_E = \Omega - \Omega_\Gamma$.
- We define d as a DOF that lies on the boundary of the effective domain Ω_E for which we want to define a sharp-interface boundary condition :
 - Let $\mathbf{x}_d$ be the location of d .
 - Let $\mathbf{n}$ be a vector normal to the boundary Γ that passes through $\mathbf{x}_d$. The definition of the magnitude of $\mathbf{n}$, $\|\mathbf{n}\|$, will be discussed when the sharp-interface method is explained.
 - Let $\mathbf{x}_\gamma$ be the intersection point of $\mathbf{n}$ with Γ and u_γ the value of the Dirichlet boundary condition at that location.
 - Let Ω_n be the cell which contains d and the point $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_\gamma + \mathbf{n}$.
 - Let e_i be the other degrees of freedom that are owned by Ω_n .
 - Let $s(\mathbf{x}) = \sum_i \phi_i(\mathbf{x})u_i$ be the function for a field u calculated using the interpolation function ϕ_i within the element Ω_n .

Figure 5.1 presents the domain Ω and the various subdomains as well as their relation to each other.

The solution process is defined by the following step:

1. Define the finite element formulation of each cell of Ω_E using the weak formulation of the differential equation to be solved.
2. If the cell is cut by the immersed body (Γ), modify the finite element problem using the sharp-interface method.
3. Solve the modified system of, possibly non-linear, equations.

As depicted in Figure 5.2, the sharp-interface method only changes the problem formulation for the cells cut by Γ . Consequently, the finite element problem is formulated as usual on Ω_E . The sharp-interface modification is applied on top of the system matrix obtained by a regular assembly. This linear system is solved and yields the solution to the problem directly

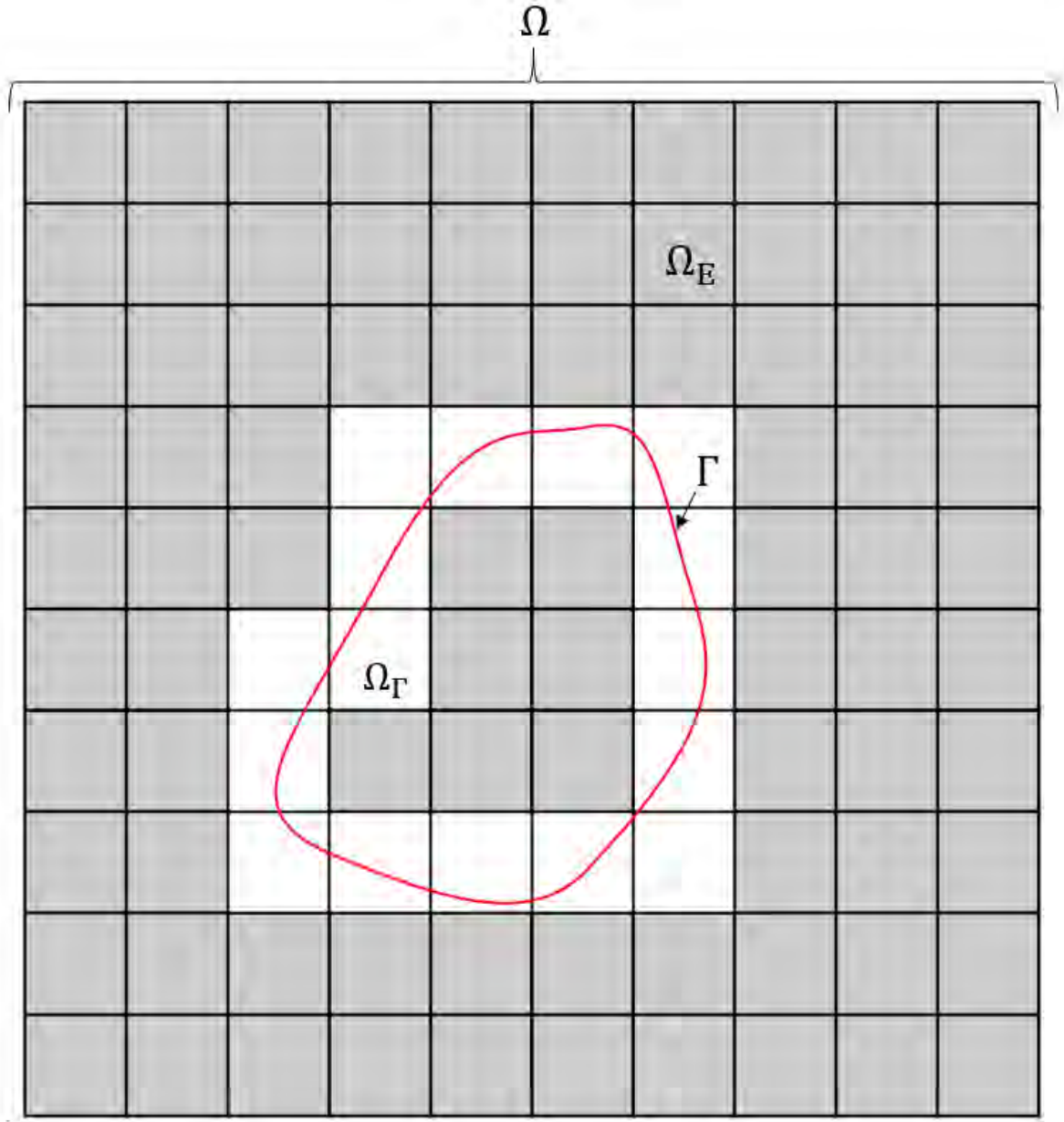


Figure 5.1 Representation of the domain Ω , the domain on which a PDE is solved, and its constituents: Ω_Γ the cells intersected by the immersed boundary Γ and $\Omega_E = \Omega - \Omega_\Gamma$ the effective domain.

if the problem is linear or using an iterative process (e.g., Newton's method) in the case of a non-linear system of equations. In the case of a non-linear problem, the sharp-edge procedure must be carried out at each matrix assembly.

5.3.1 Algorithm for the sharp-interface method

For the elements in Ω_Γ , we apply the sharp-interface procedure.

For each d we:

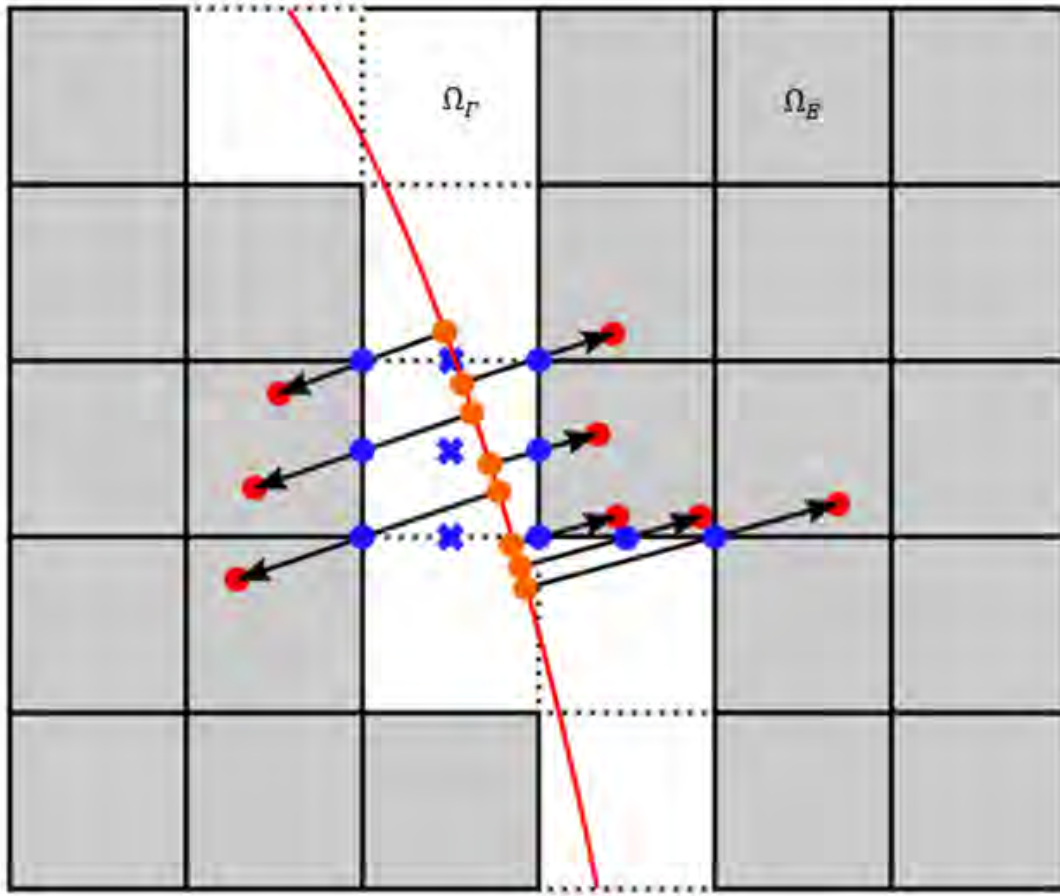
1. Define the vector $\mathbf{n}$ that is normal to Γ and passes through $\mathbf{x}_d$ (the DOF location).
2. Find Ω_n using $\mathbf{x}_n$.
3. Define $s(\mathbf{x})^*$ as an approximation of $s(\mathbf{x})$ along $\mathbf{n}$ using $s(\mathbf{x})$.
4. Clear any equation already associated with the DOF d . Similarly to a standard Dirichlet boundary condition, the test function is assumed to be zero at the location of the DOF d .
5. Use $s(\mathbf{x})^*$ to define the constraint on the value associated with d using u_γ .

The only exception to this process is when d lies directly on Γ . In this case, the value of d is imposed to be equal to u_γ , and the sharp-interface modification is neglected for this DOF. All the other DOFs of Ω_Γ that do not satisfy the definition of d have their equation replaced by an identity equation, fixing their value to a constant. Henceforth, we refer to those DOFs as dummy DOFs since they do not affect the problem to be solved, and they are essentially discarded.

In the following section, we describe in detail each step of the aforementioned procedure to establish the sharp-interface boundary method.

5.3.2 Definition of the vector normal to the boundary and finding $\mathbf{x}_n$

Using a vector normal to the boundary allows the use of one-dimensional extrapolation functions. These functions are simpler to implement and can appropriately be used to define a Dirichlet boundary condition [122, 155]. Defining a vector normal to a boundary and passing through a specific point is often not trivial since, in some cases, there are multiple acceptable vectors. Multiple methods can be used to define the vector $\mathbf{n}$. This choice depends on the strategy used to describe Γ . The most commonly used approaches to describe Γ in the case of immersed boundaries are unstructured meshes [122] and level-set functions [126, 156]. When an unstructured mesh is used to describe the boundary, the normal is found using a search algorithm to find the closest cell to $\mathbf{x}_d$. As for the level-set method, the gradient of the



- $\mathbf{n}$: Vector normal to the boundary passing trough the DOFs
- Γ : Immersed boundary
- d : DOFs with boundary condition
- Ω_E : Cells part of the effective domain
- Ω_F : Cells intersected by Γ
- ✕ Dummy DOFs
- $\mathbf{x}_\gamma$: The intersection point of $\mathbf{n}$ and Γ where u_γ is evaluated
- $\mathbf{x}_n$: The point used to define Ω_n

Figure 5.2 Representation of a Q2 element being cut by an immersed boundary Γ . Present the normal to the boundary and d the DOFs that form the boundary of the effective domain. The boundary value of those DOFs allows the proper representation of the Boundary Γ that lies outside of the effective domain Ω_E .

distance function gives the orientation of the normal of the immersed boundary at any given point. In the present work, we are interested in the flow of *spherical* particles (circles in 2D, spheres in 3D). In this case, the orientation of the normal vector is directly defined using the center of the circle/sphere. After the orientation of the vector is established, $\mathbf{x}_\gamma$ can be found easily, as it is the intersection point of the line parallel with $\mathbf{n}$ and the surface Γ . From there, it is important to fix the norm of $\mathbf{n}$. The vector's norm is constrained by two factors: the point $\mathbf{x}_n$ must be found in a cell that contains d and must be greater than $\|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_\gamma\|$. The following definition of $\mathbf{n}$ satisfies these requirements:

$$\mathbf{n} = (\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_\gamma)(1 + \varepsilon_n) \quad (5.1)$$

The maximum value of ε_n is specific to each mesh element. In this study, we restrict ourselves to a Cartesian mesh using continuous Galerkin elements. This allows ε to be bound by the following inequality :

$$0 < \varepsilon_n \leq \frac{1}{2}\delta_q \quad (5.2)$$

where δ_q is the smallest distance between the DOFs. For example, in the case of Lagrange's polynomials built with equidistant points, δ_q is equal to $1/m$ with m the order of the element. In our case, the polynomials are built either using Lagrange polynomials with equidistant (degree up to 2) or Gauss–Lobatto (starting from degree 3) support points [157]. Choosing ε_n and, consequently, $\mathbf{n}$ in this fashion ensures that $\mathbf{x}_n$ lies in a cell that contains d if the mesh is sufficiently structured, meaning that the aspect ratio of the elements is close to 1.

Once $\mathbf{n}$ is defined, $\mathbf{x}_n$ can be defined trivially, and it is possible to find Ω_n using a simple search algorithm around the cells that contain d .

5.3.3 Definition and use of $s(\mathbf{x})^*$

As previously defined, $s(\mathbf{x})^*$ is the approximation of $s(\mathbf{x})$ along $\mathbf{n}$. Since the objective of the sharp-interface method is to conserve the order of the underlying FEM scheme, we constrain the order of $s(\mathbf{x})^*$ to be equal or higher to that of the finite element interpolation. Since the Lagrange elements used in this work are defined as the tensor product of polynomial functions Q_m , we use a Lagrange polynomial of the same order (m). We note that alternative extrapolation schemes could be used without altering what follows as long as this constraint is satisfied. We also consider the case where an extrapolation with a higher order of accuracy than the underlying scheme is used to impose the sharp-interface boundary.

In this case, the Lagrange polynomial $s(\mathbf{x})^*$ is defined using $m + 1$ points along $\mathbf{n}$ comprised

within the interval $[\mathbf{x}_d, \mathbf{x}_n]$. Here we define $\mathbf{x}_s^j$ as the j th sample point, with $j \in [1, m + 1]$. From the solution at $s(\mathbf{x}_s^j)$ and its associated weight, a_s^j , we get the linear combination of the solution for $s(\mathbf{x}_\gamma)^*$.

The coefficients a_s^j can be obtained from the formulation of $\mathbf{n}$ and the Lagrange polynomial approximation of $s(\mathbf{x})$ to generate $s(\mathbf{x})^*$. Figure 5.3 presents an example of the relationship between $\mathbf{x}_\gamma$, $\mathbf{x}_d$, $\mathbf{x}_n$ and the sampling point $\mathbf{x}_s^j$. As an example, Table 5.1 gives the a_s^j for $\varepsilon_n = \frac{1}{8}$. In this table, the sampling points are numbered from the closest to $\mathbf{x}_d$ to the farthest and it is assumed that the sampling points are uniformly distributed between $\mathbf{x}_d$ and $\mathbf{x}_n$. This value of ε_n is chosen since it is sufficiently small to allow for elements of interpolation order up to four.

Another option would be to use the finite element interpolation function of the cell $s(\mathbf{x})$ directly and impose that its extrapolation be equal to the boundary value at $\mathbf{x}_\gamma$. In this case, the support function of the cell is evaluated at the boundary, and the solution at the boundary is set equal to u_γ . This means that $s(\mathbf{x})^* = s(\mathbf{x})$. For quadrilateral elements in 2D and hexahedral elements in 3D, the support function along any vector that does not lie on a face is described by a polynomial function of order $m * \dim$ where $\dim$ is the number of spatial dimensions in which the problem is solved. Since the order of the polynomial that defines $s(\mathbf{x})^*$ is much higher than the polynomial order of the scheme, $s(\mathbf{x})^*$ can be subject to Runge oscillations. Using a polynomial function that is susceptible to Runge oscillation for an extrapolation could affect the convergence and the stability of high-order elements.

Both formulations can be used to define $s(\mathbf{x})^*$, and we assess the impact of this choice within the present work.

Once $s(\mathbf{x})^*$ is defined, it can be used to impose the boundary condition at the location of the boundary $\mathbf{x}_\gamma$. To impose a Dirichlet boundary condition, we use the boundary value u_γ

Coefficient	Lagrange polynomial order for $s(\mathbf{x})^*$			
	1	2	3	4
a_s^1	9	153	2925	58905
a_s^2	-8	-288	-8424	-228480
a_s^3		136	8100	332640
a_s^4			-2600	-215424
a_s^5				52360

Table 5.1 Coefficients a_s^j that form $s(\mathbf{x})^*$ when n is defined based on Equation (5.1) with $\varepsilon_n = 1/8$. The coefficients are given for a polynomial approximation of $s(\mathbf{x})^*$ of order lower than or equal to 4.

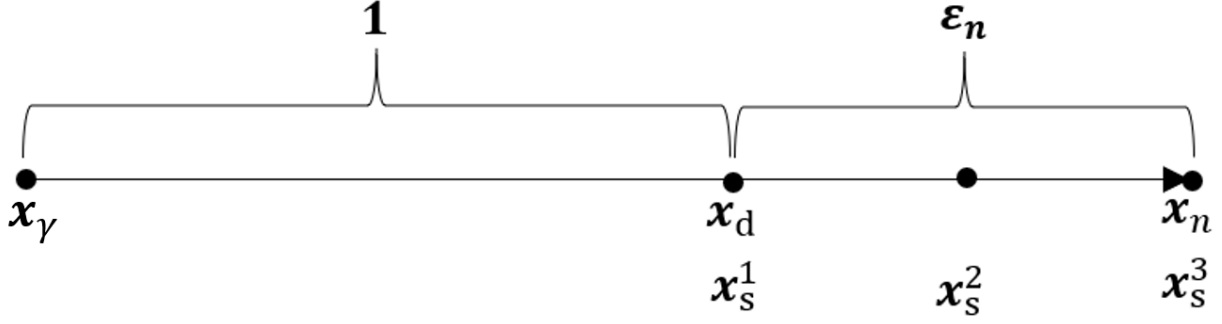


Figure 5.3 Representation of $\mathbf{n}$ and the key points along it. Here a second order Lagrange approximation of $s(\mathbf{x})$ is used to define $s(\mathbf{x})^*$. This function will then be used to define the boundary condition applied on d .

and impose the following :

$$u_\gamma = s(\mathbf{x}_\gamma)^* \quad (5.3)$$

Since $s(\mathbf{x})^*$ can be expressed as a linear combination of e_i and d , the formulation of the boundary condition takes the following form:

$$u_\gamma = \sum_{i=1}^{n_{dof}-1} a_i e_i + a_d d \quad (5.4)$$

where n_{dof} is the number of degree of freedom and a_i is the weight of the DOF e_i in $s(\mathbf{x})^*$ at the location of $\mathbf{x}_\gamma$. The value of a_d is defined in the same way but is linked to the DOF d . In the case where $s(\mathbf{x})^* \neq s(\mathbf{x})$ we have :

$$a_i = \sum_{j=1}^m \phi_i(\mathbf{x}_s^j) a_s^j \quad (5.5)$$

In the case where $s(\mathbf{x})^* = s(\mathbf{x})$ we have :

$$a_i = \phi_i(\mathbf{x}_\gamma) \quad (5.6)$$

This equation is then used for d and, consequently, becomes the boundary condition for the domain Ω_E .

5.4 Application to the incompressible Navier–Stokes equations

This section links the sharp-interface immersed boundary method defined in Section 5.3 to its application to the incompressible Navier–Stokes (INS) equations. We recall the incompressible Navier–Stokes equations subject to a Dirichlet boundary condition on an immersed (or embedded) domain Γ :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p^* + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (5.8)$$

with

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \left((\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (5.9)$$

and

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\gamma(\mathbf{x}, t) \text{ on } \Gamma \quad (5.10)$$

where $\mathbf{u}$ is the velocity vector, $p^* = \frac{p}{\rho_f}$ with p the pressure and ρ_f the density, $\boldsymbol{\tau}$ the deviatoric stress tensor, ν the kinematic viscosity, $\mathbf{f}$ a body force, Γ the immersed boundary on which a Dirichlet boundary condition of value $\mathbf{u}_\gamma(\mathbf{x}, t)$ is imposed. In what follows, $\mathbf{u}_\gamma(\mathbf{x}, t)$ will simply be noted $\mathbf{u}_\gamma$.

The implementation of the immersed boundary method is done using a stabilized PSPG/SUPG approach as it allows the use of equal order finite elements for the pressure and the velocity components [11, 158, 159]. This results in the following weak formulation for the INS equations:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \phi_q d\Omega + \sum_K \int_{\Omega_K} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p^* - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{f} \right) \cdot (\tau_u \nabla \phi_q) d\Omega_K = 0 \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f} \right) \cdot \phi_u d\Omega + \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \nabla \phi_u d\Omega - \int_{\Omega} p^* \nabla \cdot \phi_u d\Omega \\ & + \sum_K \int_{\Omega_K} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p^* - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{f} \right) \cdot (\tau_u \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_u) d\Omega_K = 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

The stabilization parameter τ_u can take 2 forms which depend on whether the problem is stationary or transient. For the transient situation, we get Eq. (5.13) and for the stationary case, we get Eq. (5.14).

$$\tau_u = \left[\left(\frac{1}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{2|\mathbf{u}|}{h_{conv}} \right)^2 + \left(\frac{4\nu}{3h_{diff}} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (5.13)$$

$$\tau_u = \left[\left(\frac{2|\mathbf{u}|}{h_{conv}} \right)^2 + \left(\frac{4\nu}{3h_{diff}} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (5.14)$$

where Δt is the time step, h_{conv} and h_{diff} are the sizes of the element related to the convective transport and diffusion mechanisms, respectively [158, 160]. In Lethe, both element size (h_{conv} and h_{diff}) are set to the diameter of a sphere of a volume equivalent to that of the cell [11, 159, 161].

Since the cells that are cut by Γ are not assembled, the weak formulation of the problem is not applied to those cells. This ensures that even when we replace the equation for the velocity DOF, the pressure on both sides of the immersed boundary is not linked through the pressure-stabilizing/Petrov–Galerkin (PSPG) stabilization. Consequently, both sides of the boundary are treated as two separate problems. The pressure DOF that are only part of the cells cut are neglected and are treated as dummy DOFs as they have no impact on the problem. If the boundary is closed, a pressure reference must be given inside the domain delimited by the immersed boundary Γ .

One interesting use of IBM is to model the fluid-structure interaction. This implies that it is often interesting to obtain the force on the boundaries that are represented by Γ . The calculation of flow properties at the location of Γ is not trivial since the solution of the velocity field, and the pressure field at the location of the boundary are not properly defined. This is because they lie within cells that are cut, and consequently, the support function for these cells is not the finite element interpolation. As the boundary is defined by the extrapolation of the neighboring cell on either side of it, a natural solution is to use those same cells to evaluate the solution at the location of the boundary through extrapolation. This allows the reconstruction of the pressure and the velocity gradient on the immersed boundary. The boundary is then discretized and sampled at multiple locations. Once the evaluation points are established, the normal to the boundary at these evaluation points is defined. Along the normal, the solution is sampled on the effective domain Ω_E . From those sampling points, it is possible to get an approximation of the solution at the boundary evaluation point and calculate the local force acting on the immersed object.

The steps to calculate the force/torque acting on an immersed object are:

1. Discretize the boundary Γ into points $\mathbf{x}_\gamma$ that represent a part of Γ .
2. Find $\boldsymbol{\gamma}_n$ a vector normal to the boundary for each of the $\mathbf{x}_\gamma$.
3. Step in the direction of $\boldsymbol{\gamma}_n$ until the point $\mathbf{x}_\gamma^n = \mathbf{x}_\gamma + \boldsymbol{\gamma}_n$ is found in Ω_E .
4. Sample the solution in the direction of $\boldsymbol{\gamma}_n$ the required number of times for the ex-

trapolation function used.

5. Use the solution obtained for each of the $\mathbf{x}_\gamma$ to obtain the desired derived quantity.

This method does not use the same vector normal to Γ and the same associated points $\mathbf{x}_\Gamma$ that are used to define the sharp-edge boundary condition. This is due to the non-uniformity of their distribution on the boundary. Determining the surface area represented by a sampling point on the boundary when the distribution is not uniform is computationally inefficient. It is much more effective to discretize Γ into sampling points and to define the solution at those sampling points.

It is also important to note that the error made when evaluating properties at the location of Γ will be a function of the discretization used for the evaluation points $\mathbf{x}_\gamma$ and the approximation function used to evaluate the solution at those points.

The sharp-interface immersed boundary methods and the stabilized formulation of the INS equations are implemented in Lethe, an open-source computational fluid dynamics (CFD) software based on the deal.II library [157]. The full definition of the methods and capability of this CFD solver, notably regarding the linear and non-linear solvers used to solve the INS equations are detailed in [11].

5.5 Applications examples

We now demonstrate the capacity of the GLS sharp-interface method by applying it to the study of various test cases. The goal is to verify the order of convergence of the proposed IBM and to validate the results obtained by comparing them to reference values in the literature obtained either through experimental means or other numerical simulations.

5.5.1 Taylor–Couette flow in 2D

The Taylor–Couette flow, or flow between two-concentric cylinders, is a well-established test case for immersed boundary conditions because the geometry is not aligned with the mesh, and such flow possesses an analytical solution that is sufficiently rich. In the present case, we consider two co-axial cylinders of radii $R_i = 0.25$ and $R_o = 0.5$, with the inner cylinder rotating. The resulting Taylor number is $Ta = \frac{1}{256}$, which is much smaller than the critical $Ta_c \approx 1708$, ensuring that the solution does not present Taylor vortices. The cylinders are both discretized using the immersed boundary method on a square domain $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$. Assuming that the flow is laminar, the azimuthal velocity profile

between the two cylinders is given by [162]:

$$u_{\theta}(r) = \omega_i \kappa R_o \frac{\left(\frac{R_o}{r} - \frac{r}{R_o}\right)}{\left(\frac{1}{\kappa} - \kappa\right)} \quad (5.15)$$

where $\kappa = \frac{R_i}{R_o}$

Since we have access to a non-trivial analytical solution, we can use it to demonstrate the order of convergence of the velocity field and the force evaluation. Both the inner and outer cylinders are defined by immersed boundaries. This problem is solved for the following finite element interpolation order for velocity–pressure: Q1-Q1, Q2-Q1, Q2-Q2, Q3-Q2, Q3-Q3. As a reminder, the expected convergence order p_f for a finite element scheme is a function of the polynomial order used for the elements’ support function and follows $p_f = m + 1$ where m is the polynomial order. For each cell, two stencil formulations are used and compared. They are noted S_n where n is the order of the Lagrange polynomial used for the sharp-interface stencil. The non-linear equations are solved until the residual is inferior to 10^{-10} . The viscous force evaluation is realized for elements of order equal or lower to Q2-Q2 because the stencil used for force evaluation is limited to the second order of convergence. The mesh size used for all of these cases are: 32×32 , 64×64 , 128×128 , 256×256 elements. Figure 5.4 illustrates the norm of the velocity field for one of the solutions obtained on a 256×256 mesh. Also, Figure 5.5 a comparison of the azimuthal velocity observed on the 64×64 mesh using Q1-Q1 S1, Q2-Q1 S2, Q3-Q2 S3 elements, and the analytical solution. As we can see, the error is relatively small for all of these cases, and the results are in good agreement with the analytical solution.

This leads to the results presented in Tables 5.2 and 5.3. These tables present the L2 norm of the error of the velocity for the various element types and mesh sizes. This table also presents the average convergence order observed and the convergence order of the last refinement, as it is theoretically the closest to the asymptotic region. From these results, we draw two main conclusions.

First, the average convergence order observed for Q1-Q1, Q2-Q1 and Q2-Q2 elements are within 10% of the expected convergence order. This is considered acceptably close to the theoretical convergence order [137]. If we look at the best, last convergence order observed for each of the elements, all of them, except Q2-Q1, present a satisfactory convergence order for the velocity field. This means that almost all of the elements have a result that is acceptably close to the expected convergence order. We can conclude that the IBM presented conserves the expected convergence order of the underlying finite element scheme.

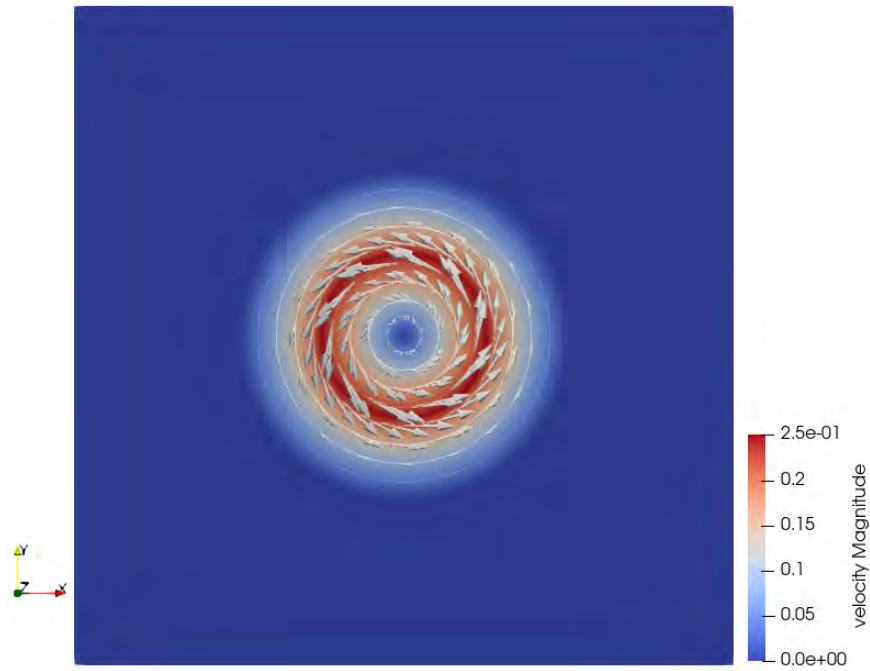


Figure 5.4 Norm of the velocity field for the Taylor–Couette flow in 2D using 2 sharp immersed boundaries. The flow is solved on both sides of the immersed boundary for both cylinders using meshes of the domain of 32X32 to 256X256. The cylinder radius is $R_i = 0.25$ and $R_o = 0.5$ which gives a Taylor number $Ta = \frac{1}{256}$.

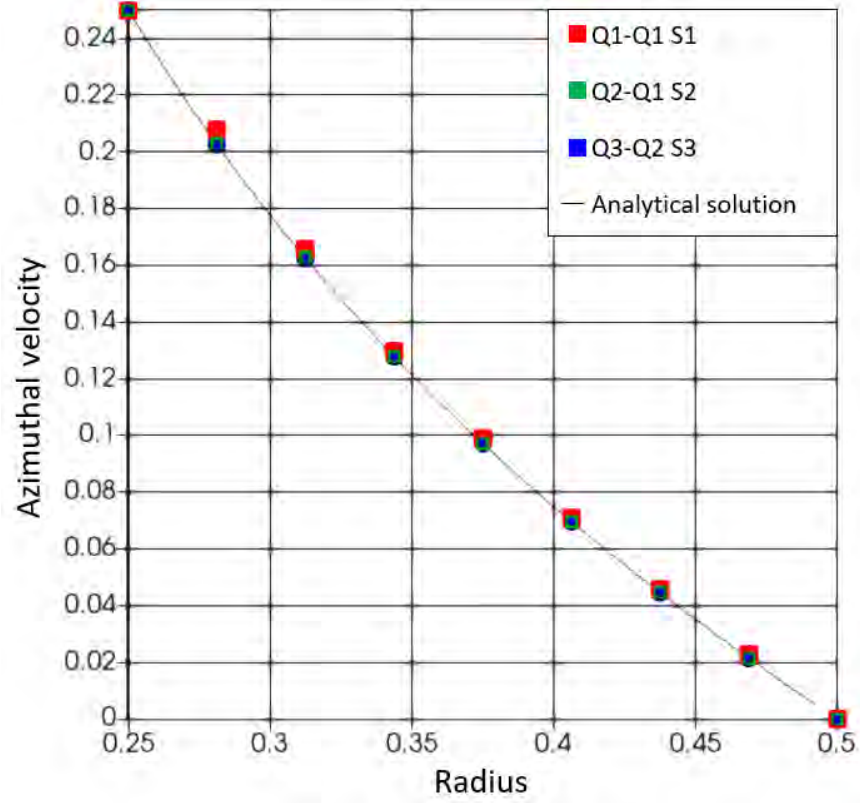


Figure 5.5 Comparison between the analytical solution and some simulation results of the azimuthal velocity in function of the radius of the Taylor–Couette case. The mesh used for comparison is 64×64 , and the simulation results presented are Q1-Q1 S1, Q2-Q1 S2, and Q3-Q2 S3. Note: the Q3-Q2 S3 simulation results are difficult to distinguish from those of the Q2-Q1 S2 simulation since they both coincide with the analytical solution.

Second, the choice of stencils used can have an impact on the error. When using the lower bound for the stencil order, the scheme tends to converge to a slightly lower order of convergence than expected. Q1-Q1 elements present significantly better results using a stencil of higher order. This indicates that the bi-linear interpolation function of the finite element interpolation has a significant impact on the accuracy due to its higher isotropy. However, for Q2-Q1 and Q2-Q2 elements, the smallest error is extremely close between both stencils used. The convergence order was better for both of these elements when using the high-order stencil. Q3-Q2 and Q3-Q3 elements both present a smaller error when using the lower-order stencil. The convergence order seems to reach the asymptotic region faster while using a higher-order stencil for both Q3-Q2 and Q3-Q3 elements. The best last convergence order was obtained using the high-order stencil. Results show that high-order stencils lead to higher errors for coarse meshes than lower-order stencils but have a convergence order that reaches the asymptotic region faster. Indeed, only the Q1-Q1 elements present a lower error for the 32×32 mesh when using a high-order stencil. The error difference between the low-order stencil and the high-order stencil increases with the element order.

It is important to note that the order of the polynomial increases rapidly with the dimension and the element order when using the direct extrapolation of an element (stencil of order higher or equal than $dim * m$). This can lead to Runge oscillations which create instability in the non-linear resolution process. As an example, major instabilities were observed when using Q4-Q3 and Q4-Q4 elements with a stencil of order 8. This is why the results of these two elements were not presented in this work.

The solution for the torque acting on the inner cylinder can also, be obtained analytically

Mesh	Q1-Q1		Q2-Q1		Q2-Q2	
	S1	S2	S2	S4	S2	S4
32X32	5.73E-3	4.53E-3	6.37E-4	1.49E-3	7.72E-4	2.70E-3
64X64	1.72E-3	1.19E-3	1.41E-4	1.27E-4	1.75E-4	2.43E-4
128X128	4.67E-4	3.04E-4	2.16E-5	2.08E-5	2.74E-5	2.45E-5
256X256	1.29E-4	7.57E-5	3.48E-6	3.39E-6	4.48E-6	3.53E-6
Average convergence order	1.82	1.96	2.51	2.92	2.47	3.19
Last convergence order	1.85	2.00	2.63	2.62	2.61	2.79

Table 5.2 Error on the velocity field for the Taylor–Couette cases evaluated in the L2 norm for Q1-Q1, Q2-Q1 and Q2-Q2 elements, using both formulation of $s(\mathbf{x})^*$ given in Section 5.3.3.

Mesh	Q3-Q2		Q3-Q3	
	S3	S6	S3	S6
32X32	2.61E-4	7.56E-4	1.62E-4	1.05E-3
64X64	1.85E-5	1.11E-4	1.93E-5	1.37E-4
128X128	2.14E-6	7.48E-6	8.21E-6	9.37E-6
256X256	1.75E-7	5.70E-7	3.12E-7	7.29E-7
Average convergence order	3.51	3.46	3.01	3.49
Last convergence order	3.61	3.71	4.72	3.68

Table 5.3 Error on the velocity field for the Taylor–Couette cases evaluated in the L2 norm for Q3-Q2, Q3-Q3 elements, using both formulation of $s(\mathbf{x})^*$ given in Section 5.3.3

from the expression of the velocity field [162]:

$$T_z = -4\pi\omega_i\mu\frac{R_o^2}{\kappa^{-2} - 1} \quad (5.16)$$

Using this solution, we now analyze the capacity of the sharp-interface IB to predict the torque acting on the cylinder accurately. The torques were obtained using the procedure described in Section 5.4. The number of sampling points on the boundary used to evaluate the viscous torque was increased until the solution obtained was independent from it. Table 5.4 presents the error made on the torque evaluation on the inner cylinder. First, we observe that we obtain the proper convergence order for the torque for Q1 elements. For Q2 element, we observe a slightly lower-than-expected convergence rate (1.7 instead of the expected 2). The approximation function uses a three-point stencil with a non-uniform distribution of the points to retrieve the gradient at the boundary.

5.5.2 Vortex shedding behind a cylinder

The flow around a cylinder is an interesting case to study since it leads to the generation of complex transient flow patterns known as von Karman vortex if the Reynolds number is sufficiently high [163, 164]. The details of the geometry used in this case are described in Figure 5.6. We study the evolution of both components of the force (lift and drag) acting on the cylinder at $Re = 200$. We can relate the frequency of vortex shedding to the Strouhal (St) number using the following:

$$St = \frac{fD}{u_\infty} \quad (5.17)$$

Mesh	Q1-Q1		Q2-Q1		Q2-Q2	
	S1	S2	S2	S4	S2	S4
32X32	2.00E-1	1.76E-1	1.12E-1	7.76E-2	1.17E-1	4.50E-2
64X64	1.01E-1	7.95E-2	3.70E-2	2.86E-2	4.02E-2	2.08E-2
128X128	5.52E-2	4.03E-2	1.09E-2	8.55E-3	1.19E-2	7.49E-3
256X256	2.94E-2	1.95E-2	3.28E-3	2.48E-3	3.46E-3	2.42E-3
Average convergence order	0.92	1.05	1.70	1.65	1.69	1.40
Last convergence order	0.91	1.04	1.73	1.78	1.78	1.63

Table 5.4 Error on the torque evaluation, for the Taylor–Couette cases, on the inner cylinder for Q1-Q1, Q2-Q1 and Q2-Q2 elements, using both formulation of $s(\boldsymbol{x})^*$ given in the Section 5.3.3. The analytical solution for this specific case is $T_z = -\frac{\pi}{3}$

with u_∞ the upstream velocity, D the diameter of the cylinder, and f the frequency of the shedding.

The values found for the Strouhal number as well as the drag and lift coefficient, are compared with similar studies done with other numerical methods and by a large array of authors. This flow is studied in transient using a second-order backward differentiation formula (BDF2) time-stepping scheme and a constant time step 0,05 s for 200 s. The mesh is defined by a structured mesh of 128 by 64 cells, with 3 orders of refinement in a radius 1.5 times larger than the cylinder. This gives a total of 11396 elements. We use Q2-Q2 elements and a fourth-order stencil to impose the sharp-interface immersed boundary.

This yields the $C_D - C_L$ evolution presented in Figure 5.7. The evolution of the drag and lift is relatively standard. We see a decrease in the drag coefficient while the flow establishes itself, and as the instability starts to appear, the drag increases and oscillates around a fixed value. The lift coefficient is constant and null at first but starts oscillating around zero with increasing amplitude until it reaches a stable oscillation pattern once the von Karman alley is fully formed.

In Figure 5.8, we used the last 100 s of the simulation to define the Strouhal number using a fast Fourier transform on the lift coefficient. Table 5.5 presents some of the various results found in the literature for the C_D , C_L , and S_t and compares the value of these results to what we obtained using the sharp-interface methods described here. The results obtained are comparable to the results found in the literature for both the Strouhal number and the force applied to the cylinder. The results obtained using the sharp-interface approach are also very close to the results obtained using a conformal mesh with Lethe.

Study	C_D	C_L	S_t
Lethe sharp interface IBM	1.395 ± 0.047	± 0.71	0.200
Lethe Conformal mesh	1.37 ± 0.05	± 0.69	0.200
Braza <i>et al</i> [163]	1.40 ± 0.05	± 0.75	-
Bhalla <i>et al</i> [165]	1.39	-	0.2
Choi <i>et al</i> [164]	1.36 ± 0.048	± 0.64	0.191
He <i>et al</i> [166]	1.356	-	0.198
Bergmann <i>et al</i> [167]	1.35 ± 0.05	-	0.198
Henderson <i>et al</i> [168]	1.341	-	0.197
Wright <i>et al</i> [169]	1.33 ± 0.04	± 0.68	0.196
Russel and Wang <i>et al</i> [170]	1.29 ± 0.022	± 0.5	0.195

Table 5.5 Comparison table of C_L , C_D , and S_t found in various numerical studies of flow around a cylinder at Reynolds = 200.

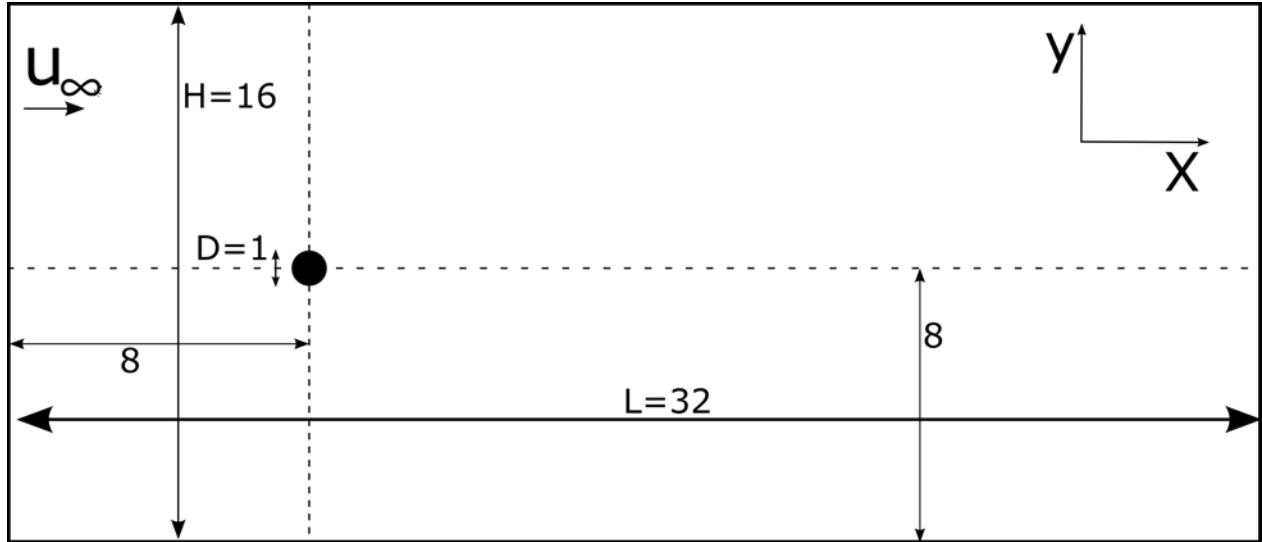


Figure 5.6 Geometry of the domain for the von Karman vortex analysis around a cylinder at $Re = 200$. Adapted from [15].

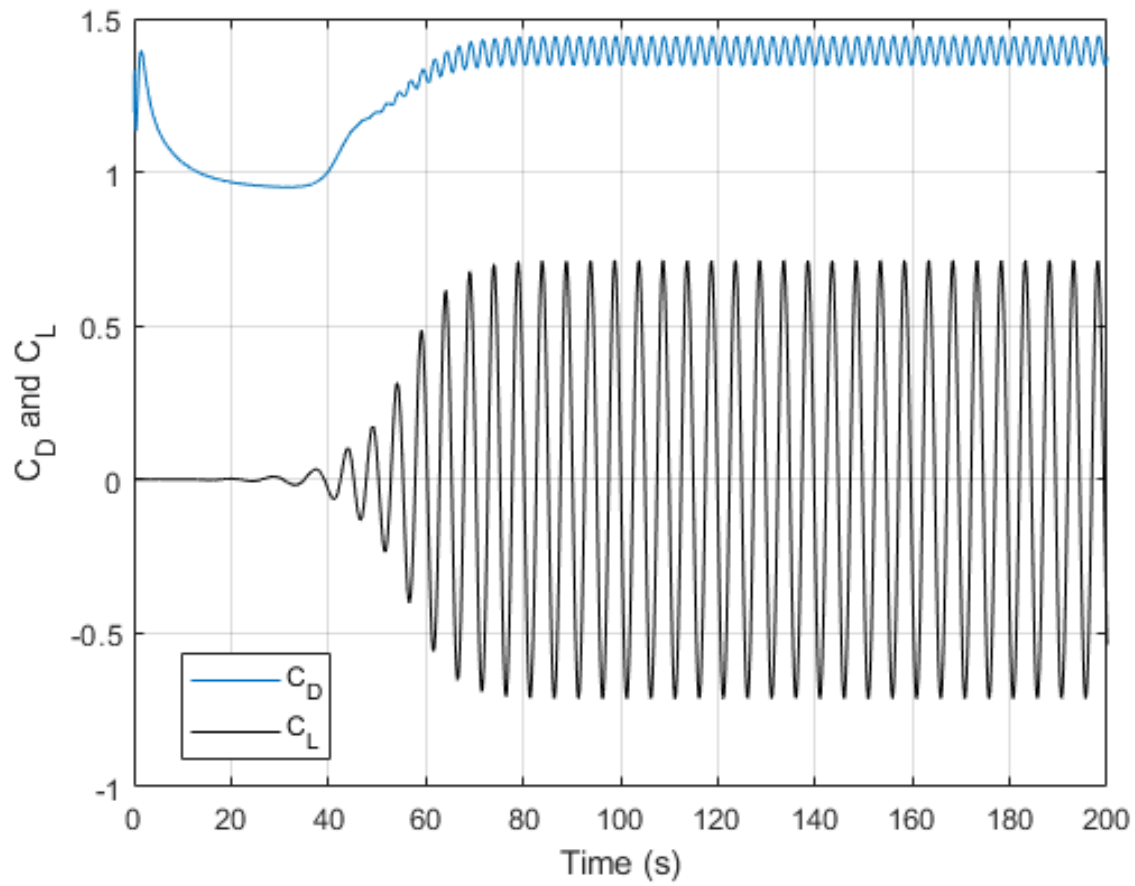


Figure 5.7 Evolution of the drag and lift coefficient for the vortex shedding cases behind a cylinder. The flow has a Reynold number $Re = 200$ and is simulated over 200 s.

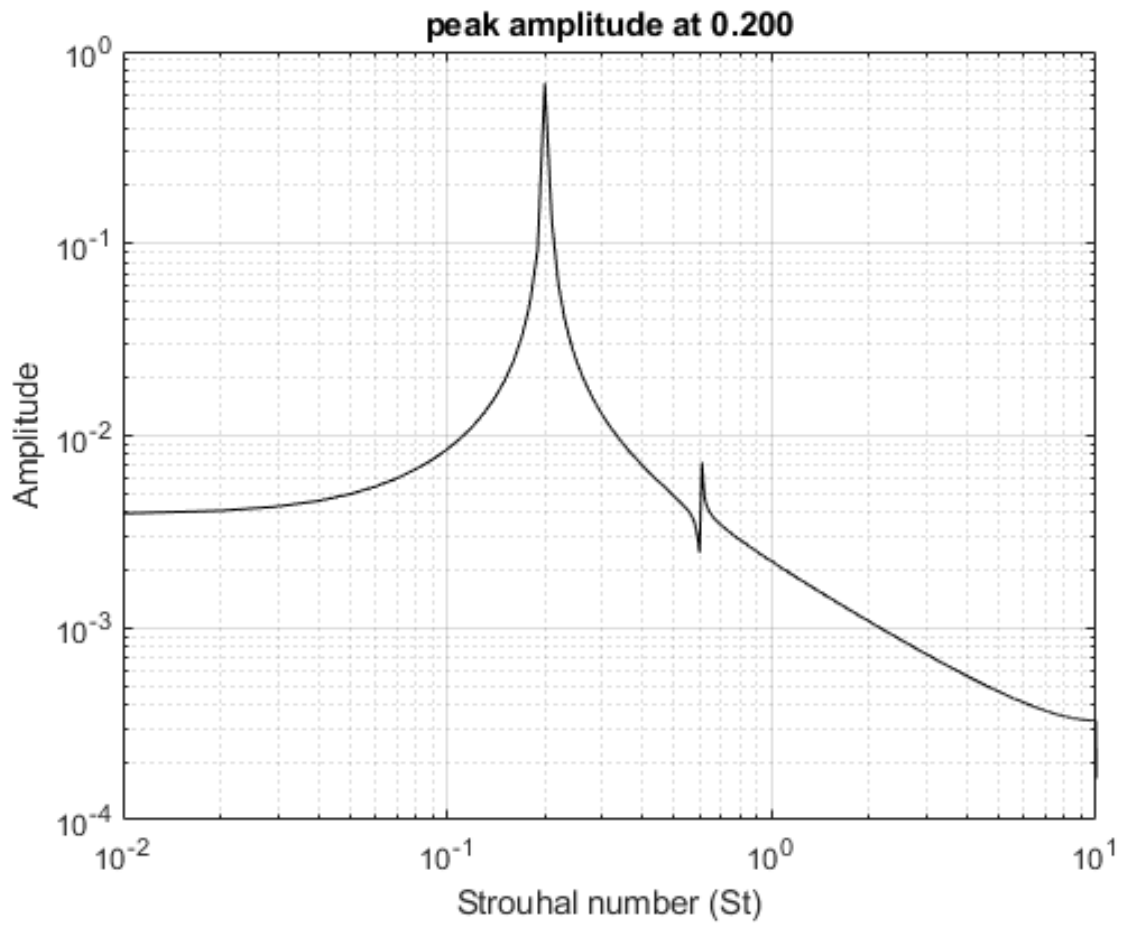


Figure 5.8 Strouhal number associated with the vortex shedding behind a cylinder obtained using a fast Fourier transform of the lift coefficient in the last 100 s of the simulation.

5.5.3 Flow around a sphere

Similarly to the case of the flow around a cylinder in 2D, the flow around a sphere in 3D has been extensively studied (e.g [36, 171]). We investigate the flow behavior at $Re = 100$, which is sufficiently low to ensure that the solution remains steady. The geometry of the domain is a 3D extension of the domain presented in Figure 5.6. This gives us a hyper-rectangle domain defined by the diagonal points $(-8, -8, -8)$ and $(24, 8, 8)$ with a sphere of radius 0.5 centered at $(0, 0, 0)$. The solution is obtained using an adaptive mesh based on a Kelly error estimator [94]. The problem was solved using both Q1-Q1 and Q2-Q2 elements. The final meshes have respectively 451702 Q1-Q1 elements (1806808 DOFs) and 50437 Q2-Q2 elements (1797024 DOFs). The characteristic length of the elements for the Q1-Q1 and Q2-Q2 meshes are, respectively $\frac{1}{64}$ and $\frac{1}{32}$ of the diameter of the sphere. The number of DOF for both meshes is relatively close. The number of forces evaluations on the surface of the boundary was increased until the solution obtained for the drag coefficient was independent.

The flow pattern obtained is presented in Figure 5.9. The values measured for the center of the recirculation zone and the drag are in agreement with the values found in the literature as can be seen in Table 5.6. We observed that the results obtained through the use of Q2-Q2 elements are slightly more in agreement with the value of the drag coefficient found in the literature. This demonstrates the ability of the sharp-interface IBM to describe 3D curved geometries using a Cartesian mesh accurately.

5.5.4 Flow through a packing of spheres

The flow-through assembly of particles is highly relevant to numerous engineering applications related to mass and energy transfer that occurs in unit operations such as packed bed reactors. Mesh generation for such cases is often troublesome because of the necessity of meshing the gap between the particles.

We consider an assembly of 10 spheres. Table 5.7 presents the disposition of the spheres in a rectangular domain defined by the diagonal points $(-6, -3, -3)$ and $(6, 3, 3)$. The spheres have a radius of 0.5. The Reynolds number is set to 50 using a unit speed at the inlet (Y, Z plane at $x = -6$). The flow is solved using Q1-Q1 element in steady state. We solve the following case on a conformal mesh and use the sharp interface IBM on a structured and unstructured mesh. The conformal mesh is unstructured and has 647 488 cells with a minimal characteristic length around a sphere of 0.05. The immersed boundary case on a structured mesh contains 407 710 cells with a minimal cell length of 0.046875. The immersed boundary case on an unstructured mesh contains 477 017 cells with a minimal characteristic length of

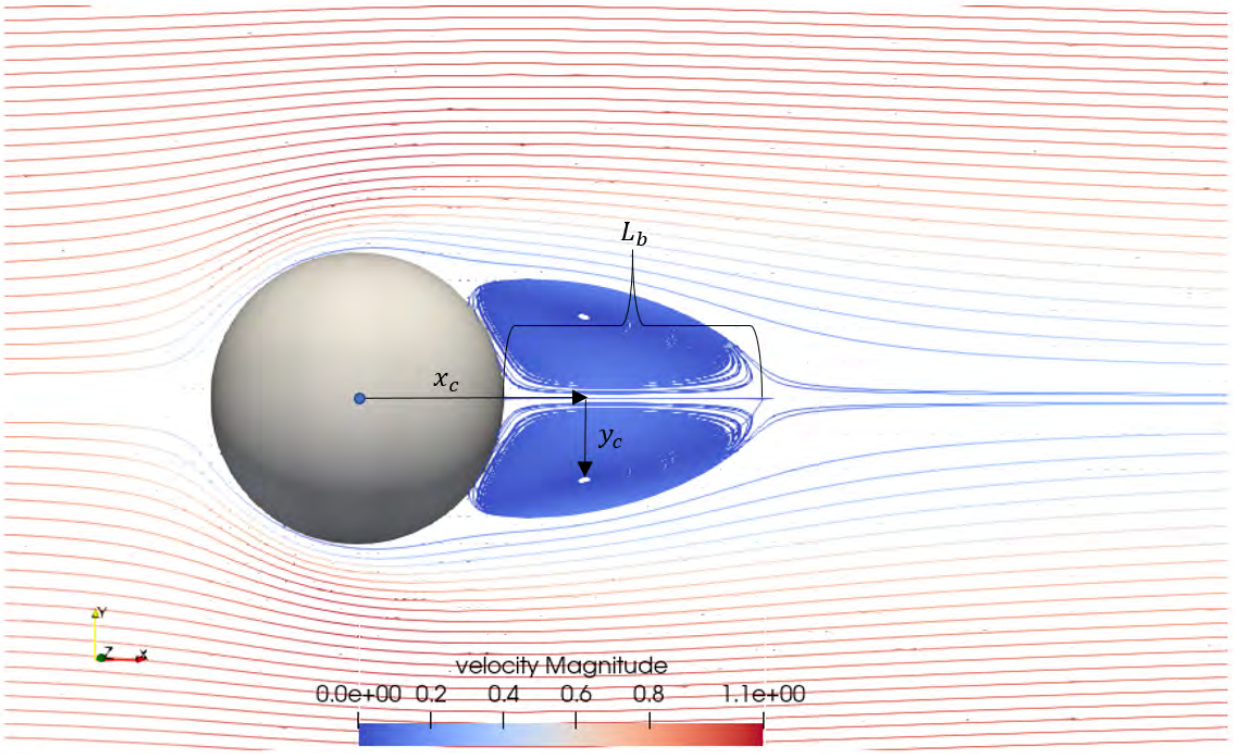


Figure 5.9 Streamlines for the flow around a sphere at $Re = 100$. Also, presents the key variable for the geometry of the re-circulation zone.

Study	method	x_c/d	y_c/d	L_b/d	C_d
Present	NIB	0.78	0.28	0.88	1.07
Mittal (1999) [171]	NCM	-	-	0.87	1.09
Bagchi et al [172]	NCM	-	-	0.87	1.09
Johnson and Patel [36]	NCM	0.75	0.29	0.88	1.09
Marella et al [173]	NIB	-	-	0.88	1.06
Mittal (2008) [122]	NIB	0.742	0.278	0.84	-
Cliff et al [29]	EXP	-	-	-	1.09
Hao Zhang et al [174]	NCM	-	-	-	1.10

Table 5.6 Table of key results for a flow around a sphere at $Re = 100$, Methods used are classified as follows: simulation with a conformal mesh (NCM), simulation with immersed boundary (NIB), experimental (EXP).

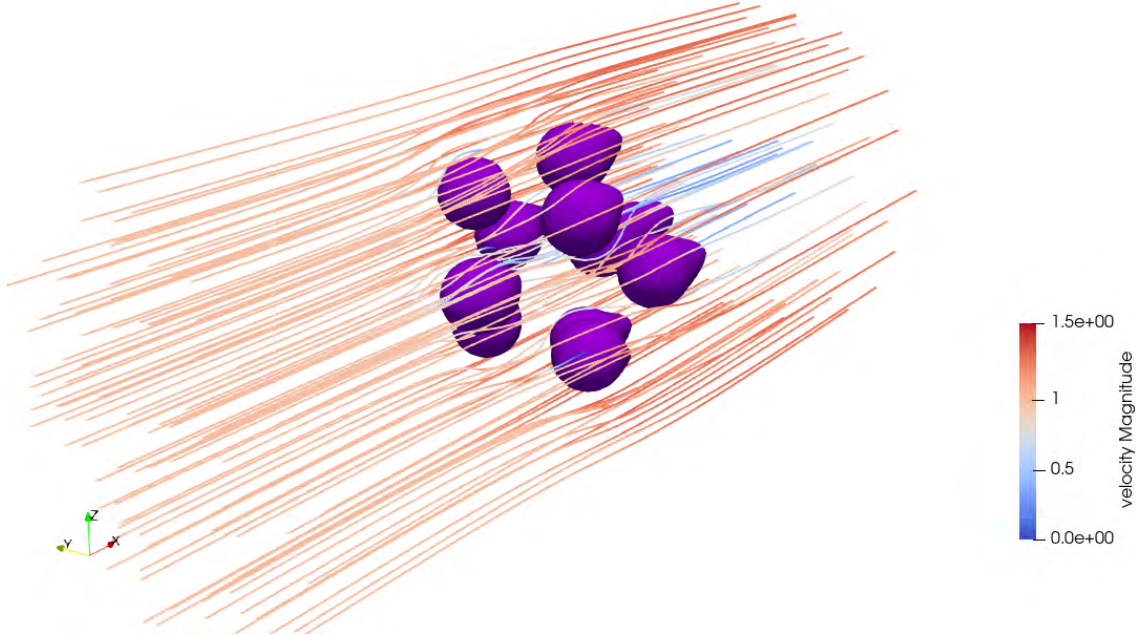


Figure 5.10 Streamline of a flow through the packing of 10 spheres at $Re_p = 50$. The purple surface is obtained based on the iso-surface of the norm of the velocity field at $\|u\| = 0.05$.

0.05.

Figure 5.10 presents the results obtained using the sharp interface IBM. In this figure, the purple surface represents the isosurface at 5% of the upstream velocity. It demonstrates the ability of this method to represent the presence of multiple objects in a flow without the need to define a complex mesh.

From these results, we can analyze the force obtained on each of the particles and compare it to the results obtained using immersed boundaries. This case presents a symmetry on each side of the X, Z and X, Y planes. This allows us to look for symmetries in the results for the force. For example, spheres 2 and 5 should have equal and opposite forces in the Y, Z plane.

Table 5.8 presents the force obtained with the conformal mesh, and the IBM applied on a Cartesian structured mesh and an unstructured mesh. We observe that the solutions agree, and there is no significant difference in the results obtained. The solution from the IBM on a Cartesian structured mesh preserves the symmetries of the problem. The symmetry of the problem is affected for both cases where an unstructured mesh is used. The loss of the symmetric properties of the problems is significant for the IBM on an unstructured mesh. We see a higher discrepancy between the force applied on particles that should have equal and opposite force in the YZ plane. For example, the force on spheres 2 and 5 are equal and opposite to two decimal places, which is not the case for the results obtained using a conformal

unstructured mesh and the IBM on an unstructured mesh. Thus, the symmetry-conserving properties of the IBM are dependent on the use of a Cartesian structure mesh.

Sphere ID	P_x	P_y	P_z
1	-1	0	0
2	0	1	1
3	0	-1	1
4	0	1	-1
5	0	-1	-1
6	1	1.414	0
7	1	0	1.414
8	1	0	-1.414
9	1	-1.414	0
10	1.5	0	0

Table 5.7 Position of the center of the spheres of radius $R = 0.5$ for the case of a flow throw the packing of 10 spheres .

Sphere ID	f_x			$f_y \cdot 10^{-2}$			$f_z \cdot 10^{-2}$		
	CM	IB US	IB S	CM	IB US	IB S	CM	IB US	IB S
1	0.64	0.65	0.63	0.03	1.02	0.00	0.01	0.20	0
2	0.78	0.79	0.78	9.35	9.57	9.44	9.37	9.36	9.51
3	0.78	0.79	0.78	-9.15	-10.41	-9.37	9.18	9.71	9.51
4	0.78	0.79	0.78	9.28	8.86	9.43	-9.36	-10.19	-9.51
5	0.78	0.78	0.78	-9.28	-9.90	-9.44	-9.29	-10.07	-9.51
6	0.73	0.74	0.73	8.55	9.32	8.88	0.04	0.7	0
7	0.72	0.73	0.73	0.15	1.10	0	8.68	8.80	8.83
8	0.72	0.74	0.73	-0.04	0.6	0.02	-8.52	-8.92	-8.86
9	0.72	0.74	0.74	-8.60	-9.56	-8.88	0.09	1.2	0
10	0.52	0.54	0.55	-0.04	-0.45	0	0	-0.10	0

Table 5.8 Comparison of the force on each sphere from Table 5.7 using a conformal mesh (CM) the sharp interface immersed boundary method on an unstructured mesh (IB US) and the sharp interface immersed boundary method on a structured mesh (IB S)

5.6 Conclusion

In this work, we presented a sharp-interface immersed boundary method in the context of the continuous Galerkin finite element method. This method was implemented in a GLS formu-

lation of the incompressible Navier–Stokes equations within the open-source CFD software *Lethe*. Multiple cases were studied and analyzed in order to verify and validate the model. As can be seen in the previous section, the sharp-interface IBM developed is able to reach a high order of convergence. The results obtained using different stencils for the extrapolation function were compared. Using a high-order stencil formulation for the extrapolation function enables reaching the asymptotic region of the convergence order faster (i.e. using a coarser mesh) but leads to higher error for coarser meshes.

The validation case demonstrated that using a sharp-interface immersed boundary method gives results that are in agreement with the results found in the literature both in the case of unsteady 2D flow and 3D steady flow. The implementation in 3D also demonstrated that the method was easily generalized to higher dimensions. We demonstrated that this method can also lead to simplification in the mesh generation process in the case where multiple particles need to be represented.

The sharp-interface method presented in this work has a few limitations.

Two different immersed boundaries cannot be contained in two adjacent elements or in a single cell as it leads to an over-constraint of the system and a singular matrix. There are a few solutions to this problem. The simplest approach would be to prioritize one of the boundaries and only implement the equation related to this boundary in cells that are in conflict. Thus, this is only a limitation of the implementation and is not inherent to the method.

In this work, we focused on cases where the immersed boundaries are stationary. Even though there are multiple applications for stationary immersed boundaries in cases where the mesh generation can be complex, moving immersed boundaries are also relevant to multiple applications. However, pressure continuity in time poses additional challenges when the immersed body is in motion. We consider that the static sharp-interface approach is highly relevant for numerous engineering applications. Its extension to moving geometries will be the main topic of future work done on this method by our research group.

5.7 Discussion

Cette publication présente une méthode pour l'imposition d'une condition immergée d'ordre contrôlable sur une frontière sphérique Γ dans le cadre de la méthode des éléments finis. Elle inclut la vérification de la méthode proposée ainsi que plusieurs cas de validation démontrant la capacité et la validité de la méthode. Cependant, certains éléments méthodologiques nécessaires à l'implémentation de ce type d'algorithme n'ont pas été détaillés dans la publication.

De plus, certaines limitations de la méthode proposée n'ont pas été discutées. Cette section présente les éléments méthodologiques qui n'ont pas été abordés, puis adresse quelques limitations observées.

5.7.1 Complément d'éléments méthodologique

Certains éléments méthodologiques nécessaires à l'implémentation de ce type d'algorithme n'ont pas été détaillés, étant donné qu'ils sortent du cadre de recherche de l'article. Cette section aborde les divers éléments méthodologiques qui n'ont pas été présentés dans l'article, à savoir : la définition de la surface de la particule, la définition des coefficients du stencil associé au polynôme de Lagrange utilisé dans l'imposition des conditions immergées ($s(\mathbf{x})^*$) et l'ajout de précisions concernant l'intégration des contraintes à la surface des conditions immergées.

Définition de la surface des particules

La méthode de condition immergée présentée nécessite uniquement la définition du point à la surface de la particule ($\mathbf{x}_\gamma$) et de la normale à cette surface $\mathbf{n}$. Cette simplicité permet à la méthode décrite d'être applicable à d'autres types de géométries, à condition que ces deux éléments puissent être facilement définis. Pour cette raison, la description de la surface repose sur l'utilisation de fonctions de distance signée. Ces fonctions définissent une géométrie de manière implicite en établissant la surface de l'objet comme étant les zéros de ces fonctions. Tout autre point dans l'espace a une valeur correspondant à sa distance par rapport au zéro le plus proche. Ces fonctions sont définies par $\Phi(\mathbf{x})$. Il s'ensuit que :

$$\Gamma = \{\mathbf{x} | \Phi(\mathbf{x}) = 0\} \quad (5.18)$$

et

$$\mathbf{n} = \nabla \Phi(\mathbf{x}) \quad (5.19)$$

Pour le cas d'une sphère de diamètre d_p centré au point $\mathbf{p}_0$, $\Phi(\mathbf{x})$ est défini par:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{p}_0\| - \frac{d_p}{2} \quad (5.20)$$

Plusieurs autres géométries simples, telles que le cylindre, le cube, la pyramide, etc., ont une

fonction de distance associée. Les fonctions de distance peuvent également être combinées par des opérations booléennes [150]. Toutefois, la généralisation des fonctions de distance signée pour d'autres géométries sort du cadre de ce projet.

Stencil des polynômes de Lagrange

Les coefficients α_s^i utilisés pour une approximation polynomiale de $s(\mathbf{x}_\gamma)$ sont définis à partir du polynôme de Lagrange d'ordre m passant par les $m + 1$ points d'échantillonnage. En reprenant la notation utilisée dans la section 5.3.3, on définit $\mathbf{V}$ comme étant la matrice de Vandermonde de taille $m + 1$ suivante :

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1 & \|\mathbf{x}_s^1 - \mathbf{x}_n\| & \|\mathbf{x}_s^1 - \mathbf{x}_n\|^2 & \dots & \|\mathbf{x}_s^1 - \mathbf{x}_n\|^m \\ 1 & \|\mathbf{x}_s^2 - \mathbf{x}_n\| & \|\mathbf{x}_s^2 - \mathbf{x}_n\|^2 & \dots & \|\mathbf{x}_s^2 - \mathbf{x}_n\|^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \|\mathbf{x}_s^{m+1} - \mathbf{x}_n\| & \|\mathbf{x}_s^{m+1} - \mathbf{x}_n\|^2 & \dots & \|\mathbf{x}_s^{m+1} - \mathbf{x}_n\|^m \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

En utilisant l'inverse de cette matrice de Vandermonde ($\mathbf{V}^{-1}$), les coefficients α_s^i associés aux $m + 1$ points $\mathbf{x}_s^i$ sont définis par :

$$\alpha_s^i = \sum_{j=1}^{m+1} \mathbf{V}_{ji}^{-1} \|\mathbf{x}_\gamma - \mathbf{x}_n\|^{j-1} \quad (5.22)$$

De plus, pour une série de points d'échantillonnage $\mathbf{x}_s^i$ et un point d'évaluation $\mathbf{x}_\gamma$ donné, toute transformation affine de la distribution des points d'échantillonnage retrouve les mêmes coefficients α_s^i . Cela permet d'utiliser les mêmes coefficients pour un ϵ_n donné.

Intégration du tenseur de contrainte à la surface des conditions immergées

L'évaluation du tenseur de contraintes à la surface de la particule est nécessaire pour évaluer la force appliquée sur les particules. La Section 5.4 présente la méthode pour obtenir une évaluation du tenseur de contraintes à la surface de la particule basée sur l'extrapolation de la solution à proximité de la frontière. Il est mentionné que cette évaluation doit ensuite être intégrée en utilisant une méthode d'intégration qui permet d'obtenir une surface de référence associée au point d'évaluation du tenseur. Cette section propose d'utiliser une discrétisation uniforme de la surface de l'objet afin de définir la surface associée à chaque point d'évaluation

de la contrainte. Dans le cadre d'une sphère, cela correspond à une discrétisation polaire uniforme. La surface associée aux points d'intégration est alors définie directement à partir de l'aire couverte par chaque élément surfacique de cette discrétisation, cette aire pouvant être définie analytiquement. Le même principe s'applique pour d'autres géométries, bien que la définition d'un maillage uniforme peut-être plus complexe et nécessite une stratégie de discrétisation différente pour chaque géométrie. Pour cette raison, dans le Chapitre 5, une approche reposant sur un échantillonnage non uniforme des contraintes à la surface est présentée. Cette approche a l'avantage d'être plus générale et de pouvoir être facilement appliquée, peu importe la forme de la géométrie.

5.7.2 Limitations

Cette publication aborde certaines limitations de la méthode proposée. Cette section approfondit ces limitations, notamment l'impact sur la stabilité de l'algorithme à l'ordre élevé et l'imposition de la solution sur les cellules sûres contraintes. De plus, cette section discute de l'impact que l'utilisation d'une extrapolation polynomiale comme méthode d'imposition de conditions immergées a sur la conservation de la masse à la frontière des particules.

Stabilité de la résolution linéaire à l'ordre élevé

Dans le cadre de la publication, il est mentionné que les effets de Runge peuvent affecter la convergence de la méthode si les stencils utilisés sont d'ordre suffisamment élevé. Pour cette raison, dans le cadre de la publication, les polynômes sont d'ordre 6 ou inférieur. Or, cela n'est pas la seule limitation liée à l'utilisation de polynômes d'ordre plus élevé. Il a été observé que la convergence du solveur linéaire itératif utilisé (GMRES) est grandement détériorée par l'ordre du polynôme utilisé ainsi que par les points d'échantillonnage utilisés. La cause de cette détérioration de la convergence du solveur linéaire n'est pas parfaitement comprise. Toutefois, cette détérioration est très probablement liée à la modification des valeurs propres de la matrice causée par les stencils utilisés. Pour cette raison, dans les cas où des éléments de type Q3 sont utilisés, un solveur matriciel direct est employé. Par contre, l'utilisation d'un tel solveur matriciel pour de larges cas en 3D est souvent numériquement trop coûteuse.

Imposition des cellules surcontrainte

Cet article mentionne le fait que, lorsque deux particules sont proches l'une de l'autre, il est nécessaire de prioriser l'imposition de l'une des deux particules afin d'éviter d'obtenir une matrice singulière. Or, cette approche impacte l'ordre de convergence du schéma. En effet,

ce type de modification n'impose pas la vitesse en utilisant une approximation basée sur la solution au bord de la particule, ce qui résulte en un schéma d'ordre 1 pour la vitesse. De plus, la même procédure doit être appliquée au degré de liberté associé à la pression, ce qui peut affecter l'évaluation de la force.

Conservation de la masse

L'approche de condition immergée présentée dans cet article ne garantit pas la conservation de la masse à la surface d'une frontière immergée. Cette approche utilise une extrapolation du champ de vitesse à proximité de la frontière de la particule afin d'imposer la condition frontière. Toutefois, le champ de vitesse extrapolé par un polynôme n'est pas garanti d'être à divergence nulle. Cette non-conservation de la masse à la frontière diminue avec la taille du maillage.

La convergence de la conservation de la masse à la surface de la particule est vérifiée pour un cas avec des conditions de Dirichlet sur toutes les faces du domaine rectangulaire. Le domaine rectangulaire est défini par la diagonale allant de $(-1, -1, -1)\text{cm}$ à $(11, 1, 1)\text{cm}$, la particule est centrée en $(2, 0, 0)\text{cm}$, la particule a un diamètre de $d_p = 1\text{cm}$, la vitesse du fluide en amont est de 1cm s^{-1} et une viscosité dynamique de $1\text{cm}^2\text{s}^{-1}$. Les frontières sont prescrites telles que montrées dans la figure 5.11. Afin de prescrire une pression de référence dans l'équation, un nœud de pression du domaine est imposé à 0.

Ce cas est résolu avec des maillages allant de $\frac{\Delta x}{8}$ à $\frac{\Delta x}{64}$ pour des éléments Q1-Q1 et de $\frac{\Delta x}{4}$ à $\frac{\Delta x}{32}$ pour des éléments Q2-Q1, où Δx est la taille du maillage. Pour chaque raffinement, la divergence de la vitesse dans le domaine est rapportée dans la Figure 5.12. Ces résultats démontrent la convergence de la conservation de la masse à la surface de la particule aussi bien pour les éléments de type Q1-Q1 que pour les éléments de type Q2-Q1. Toutefois, on observe une surconvergence de la conservation de la masse pour les éléments Q2-Q1. La raison de cette surconvergence n'a pas été établie. Il est toutefois possible que la convergence de la conservation de la masse soit liée à l'ordre du schéma d'intégration du volume du domaine et donc à la quadrature utilisée pour l'intégration des éléments, et non uniquement au schéma d'extrapolation utilisé pour l'imposition de la condition frontière.

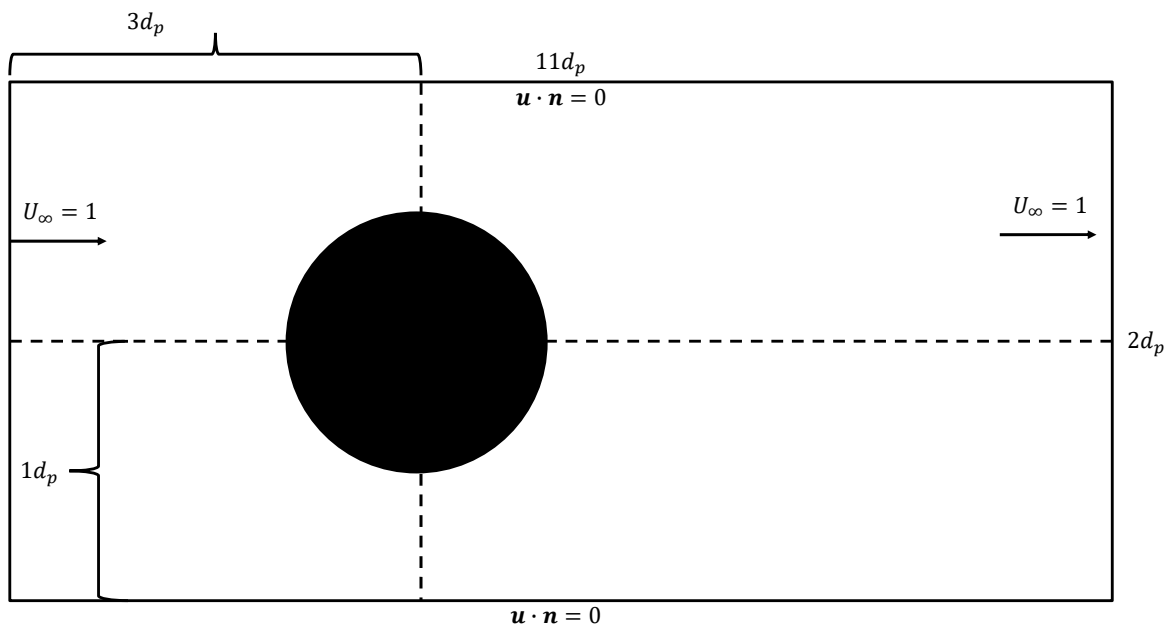


Figure 5.11 Vue de coupe du domaine utilisé pour évaluer les propriétés de conservation de la masse de la méthode de condition immergée présentée dans le Chapitre 5

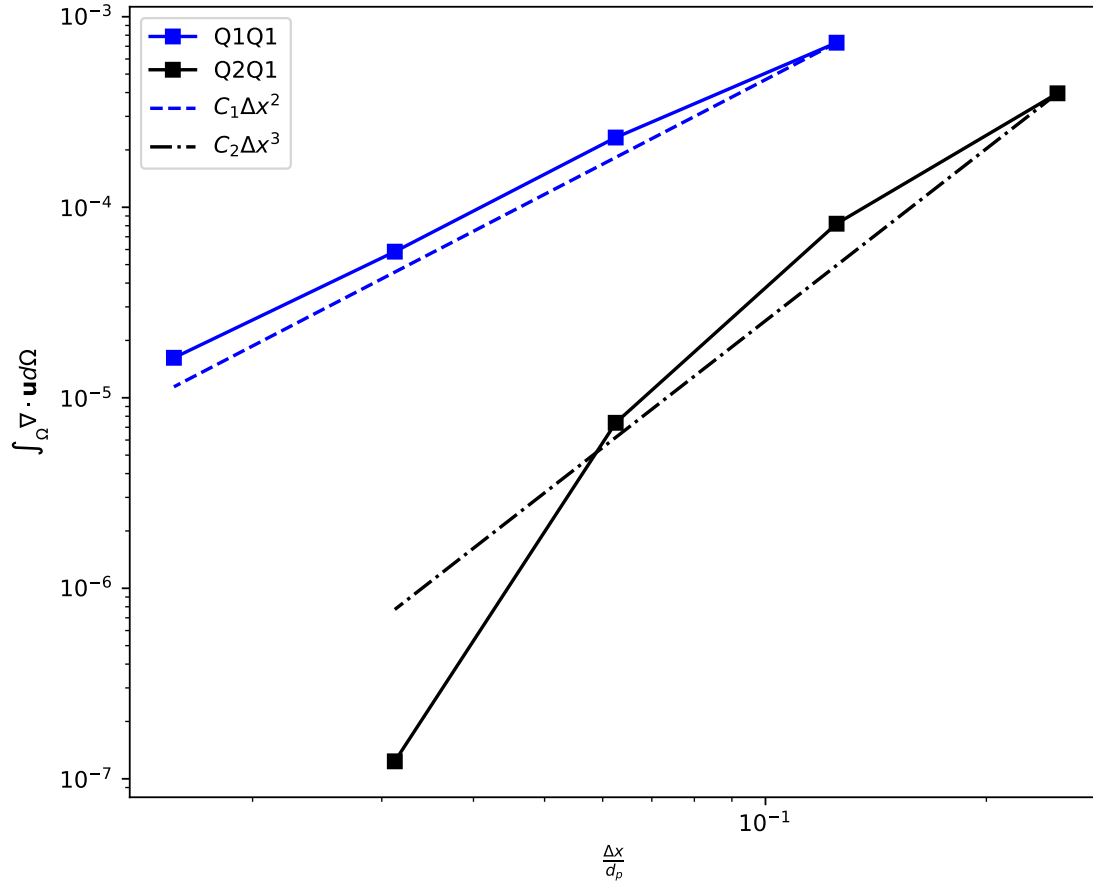


Figure 5.12 Convergence de la conservation de la masse à la surface de la particule en fonction de la taille du maillage et de l'ordre des éléments utilisés. Les éléments Q1-Q1 présentent une convergence qui suit l'ordre du schéma, alors que les éléments Q2-Q1 présentent une surconvergence par rapport à l'ordre du schéma.

CHAPITRE 6 ARTICLE 2: HIGH-ORDER MOVING IMMERSSED BOUNDARY AND ITS APPLICATION TO A RESOLVED CFD-DEM MODEL

Lucka Barbeau, Shahab Golshan, Jieyao Deng, Stéphane Étienne, Cédric Béguin, Bruno Blais.

Contribution de Lucka Barbeau: Conceptualisation, Méthodologie, Logiciel, Validation, Analyse formelle, Rédaction - version originale, Conservation des données, Visualisation.

Publié dans Computers & Fluids, volume 268, article 106094, 30 Octobre 2023

6.1 Contexte de l'article

Ce chapitre présente le second article de cette thèse, qui poursuit le travail réalisé dans le Chapitre 5 afin de réaliser le deuxième sous-objectif présenté à la Section 3.3.2. La méthode de conditions immergées développée est donc étendue à des géométries en mouvement. L'article introduit également un nouvel algorithme de couplage implicite entre la dynamique des particules et le fluide, garantissant la stabilité du couplage et le maintien des propriétés du schéma utilisé. Cette combinaison de représentation d'ordre élevé des particules avec la dynamique des particules, ainsi que le schéma de couplage entre le fluide et les particules, permet d'obtenir le premier solveur de type CFD-DEM résolu d'ordre élevé. Les propriétés de ce solveur sont alors vérifiées et validées. L'efficacité de la résolution à l'aide d'un schéma d'ordre élevé est comparée à celle du schéma d'ordre 2. Finalement, ce chapitre élabore sur la validation de ce solveur pour des fluides non newtoniens et discute d'alternatives afin de coupler la dynamique des particules avec la dynamique du fluide.

Abstract: The sharp interface immersed boundary method (IBM) is a powerful tool to simulate the flow around moving objects. This paper extends this method to simulate the motion of particles immersed in a fluid. We introduce a new implicit coupling scheme between the solid and fluid phases, verify the high order of convergence of the scheme, and validate it using four cases. The fluid dynamics is simulated using a streamline upwind Petrov–Galerkin and pressure-stabilizing Petrov–Galerkin (SUPG/PSPG) stabilizations. The particles' dynamics and contact are solved using Newton's second law of motion and a soft sphere contact model that is derived from the discrete element method. The first validation case is the sedimentation of a lone particle with a Reynolds number smaller than 32. The second validation case is the rise of a positively buoyant particle at a high Reynolds number (2500). The third valida-

tion case demonstrates the stability of the scheme when particles are in contact and exhibit the classical drafting, kissing, and tumbling (DKT) behavior. Finally, we use the scheme to study the Boycott effect with a larger number of particles (64) to show the stability of the scheme in cases with numerous particle-particle and particle-wall contacts.

6.2 Introduction

Particulate flows play an important role in the chemical industry. They are used in reactors (e.g., fluidized beds, spouted beds), in the transport of material (e.g., slurry transport and pneumatic conveying), separation operation (e.g., cyclone separators), and atomization operation (e.g., spray drying) to name a few [39]. Measuring key variables (e.g., the hydrodynamic force acting on particles, flow patterns, pressure distribution) of these systems experimentally is difficult. Simulations can predict these variables. Among available models, some leverage the coupling of computational fluid dynamics (CFD) and the discrete element method (DEM) to formulate a coupled CFD-DEM strategy. These models allow particle-particle and particle-wall contacts [100, 175, 176]. When a closure model is used to calculate the hydrodynamic forces (for instance, the drag force), we call these models unresolved CFD-DEM [12]. Alternatively, if the hydrodynamic forces are obtained directly through the imposition of a no-slip boundary condition in the CFD, we call these models resolved CFD-DEM [12, 40]. Hence, in unresolved CFD-DEM, the grid size is usually larger than the particle diameter, while in resolved models, the grid size must be significantly smaller than the particle diameter. Closure models used in unresolved CFD-DEM calculate the average of the hydrodynamic forces applied to a cluster of particles. This averaging decreases the precision at the particle scale (e.g., the drag force applied on one particle) [41, 177]. Resolved CFD-DEM predicts particle-fluid interactions at the micro-scale without any closure model. Often, the closure models used in unresolved CFD-DEM and two-fluid models are derived from resolved CFD-DEM simulations or fix particles bed simulation [5]. Resolved CFD-DEM is computationally intensive since the mesh must be sufficiently fine to capture the fluid flow in the vicinity of the particles. Currently, it cannot simulate an industrial-scale system [12]. Reducing the computational cost to achieve a given accuracy level would increase this model's range of applications. Previous research supports that high-order schemes (defined as having an order of convergence higher than two) can reach high precision in less computational time than second-order schemes [11, 145] and are a promising avenue to decrease the computational cost while maintaining the same level of accuracy in resolved CFD-DEM simulations.

The main challenge in developing a resolved CFD-DEM solver is the coupling between the motion of particles (DEM) and the imposition of the no-slip boundary condition at the surface

of the particle in the CFD. There are three main categories of solid-fluid coupling approaches: explicit coupling, three-stage coupling, and implicit coupling. The explicit approach uses the flow field and forces on the particles at the previous time step to calculate the particles' velocity and position at the next time step. Hu *et al.* [128] showed that an explicit coupling scheme is unstable if the virtual mass of a particle (the mass of fluid that needs to be accelerated with the particle) is higher than its mass. Due to their simplicity, the explicit coupling schemes were used in the work of Uhlmann [178] and Kriebitzsch *et al.* [177,179] within the framework of the finite difference method. More recently, this approach was used in the work of Nguyen *et al.* and Washino *et al.* [180,181] in a three-phase resolved CFD-DEM solver.

The three-stage coupling, proposed by Shirgaonkar *et al.* [182], splits the coupling into three stages.

1. Update the CFD without taking into account the immersed particles
2. Update the particle position with the DEM results
3. Correct the CFD results to preserve the continuity equation that may have been broken when the particle position was updated.

This approach is reputed to be less sensitive to numerical instability than the explicit approach [182]. The same approach was also adopted by Hager *et al.* [183] where they coupled the CFD solver OpenFOAM [184] with the DEM solver LIGGGHTS [185].

The implicit approach was introduced by Hu *et al.* in 1992 [128] to avoid the stability issue of the explicit approach. They proposed an explicit-implicit coupling scheme between the particles and the CFD. They explicitly solve the position of the particles at the beginning of a time step. Then, implicitly solve the velocity of the particles with an iterative method using a fixed point approach with a relaxation parameter. They found that doing one iteration on the velocity of the particles once for each Newton iteration of their implicit Navier-Stokes solver is an effective way to couple the two solvers and is not significantly more expensive than the explicit coupling. Glowinski *et al.* [118] have proposed an implicit monolithic approach in FEM where the solid-fluid coupling was done using the Lagrange multipliers immersed boundary method.

Such resolved CFD-DEM coupling approaches require an appropriate strategy to represent moving particles in the CFD. Multiple approaches exist to represent moving boundary problems. To name a few: re-meshing [110], chimera grid [13,186] and immersed boundary method (IBM) [116,118,122]. The IBM has several advantages when it comes to resolved CFD-DEM. It avoids the cost of re-meshing when the particles are in motion and generalizes well to mul-

multiple particles. The two main categories of IBMs are the momentum forcing (continuous) approach and the reconstruction approach (sharp interface). A detailed review of these categories and their application has been given by Kim *et al.* [117]. The reconstruction approach is the only category of methods that enables a high order of convergence for the scheme. The reconstruction approach is not without some inconveniences; the motion of IB relative to a fixed Cartesian grid is subject to spurious pressure oscillations [125, 178, 187]. Lee *et al.* have described the nature of these oscillations and identified their sources in the context of the finite volume method. The sources they have identified are the time discontinuity of the velocity field and the spatial discontinuity of the pressure field [125].

Most resolved CFD-DEM schemes presented previously have limitations on their order of convergence. None of these approaches can reach high-order of convergence in space (Most are, in fact, limited to first-order accuracy). Besides, all explicit approaches have a lower bound on the density ratio between the particles and the fluid (0.5 for a single particle) due to the effect of the virtual mass [128]. In this work, we extend the high-order sharp interface IB [16] to develop a new high-order resolved CFD-DEM solver. The solver presented in this article is implemented in the open-source CFD solver Lethe [11]. Lethe is based on the well-established deal.II library [154]. Lethe is parallel and works on distributed computer architectures. It uses the MPI communication protocol to support dynamic mesh adaptation in a distributed environment through the p4est library. First, we present the soft-sphere DEM component based on Lethe-DEM [175]. We briefly discuss the sharp-interface solver for the incompressible Navier–Stokes equation [16]. We propose a new implicit coupling scheme between the DEM and the CFD. The proposed coupling strategy is compatible with backward differentiation formulas (BDF1 and BDF2 are analyzed in this work). This coupling scheme is not prone to instability even when the particles are significantly less dense than the fluid. This results in a high-order resolved CFD-DEM solver that can simulate a wide range of particle-to-fluid density ratios. We analyze the sources of spurious pressure oscillation described by Lee *et al.* [125] and discuss the impact of these oscillations in the current FEM framework. We introduce a new verification case built using the method of manufactured solution (MMS) to verify convergence in time and space of the scheme when a particle is in motion. We show that we reach high-order convergence in space and that the convergence order of the BDF2 schemes is preserved. We validate our solver using the well-known Ten Cate *et al.* [17] sedimentation case. We introduce a new validation case, a positively buoyant particle at a Reynolds number of 2500 for which experimental data is available. Finally, we show the sedimentation of multiple particles (64) at different angles relative to gravity to demonstrate the large-scale capabilities of the method. This case highlights the Boycott effect, which is an increase in the sedimentation velocity when the container is at an angle

with gravity.

6.3 Model formulation

The resolved CFD-DEM solver has three components: The DEM solver that resolves the particles' dynamics and contacts (see Section 6.3.1), the representation of the particles in the CFD that is performed using the sharp interface immersed boundary (see Section 5.4), and the coupling between the DEM and the CFD which is performed using a new implicit scheme (see Section 6.3.3).

6.3.1 Particle dynamics

The particle dynamics is solved using Newton's second law of motion and the soft-sphere DEM to model particle-particle and particle-wall contacts. We integrate the particle motion using the following equations:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{f}_{ij}^c + \mathbf{f}_{ij}^{lc}) + \mathbf{f}_i^w + \mathbf{f}_i^f + \mathbf{g}m_i \right) \quad (6.1)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \frac{1}{I_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{T}_{ij}^c) + \mathbf{T}_i^w + \mathbf{T}_i^f \right) \quad (6.2)$$

where $\mathbf{v}_i$ is the velocity of particle i , m_i is the mass of the particle i , n_b is the number of particles, $\mathbf{f}_{ij}^c$ is the contact force between particle i and j , $\mathbf{f}_{ij}^{lc}$ is the lubrication force correction between particle i and j , $\mathbf{f}_i^w$ is the particle-wall contact force, $\mathbf{f}_i^f$ is the fluid force applied on particle i and $\mathbf{g}$ denotes the gravitational acceleration. In Equation (6.2), $\boldsymbol{\omega}_i$ is the angular velocity of the particle i , I_i is the rotational inertia of the spherical particle, $\mathbf{T}_{ij}^c$ denotes the torque applied on particle i due to the contact with particle j , $\mathbf{T}_i^w$ is the particle-wall contact torque, $\mathbf{T}_i^f$, is the fluid torque applied on particle i .

Contact force models

The soft-sphere model solves the contact dynamics by allowing the particles to overlap each other and by applying a repulsive force which is a function of the overlap of the particles

and their mechanical properties. The contact force between the particles ($\mathbf{f}_{ij}^c$) is decomposed into normal ($\mathbf{f}_{ij}^{c_n}$) and tangential ($\mathbf{f}_{ij}^{c_t}$) components:

$$\mathbf{f}_{ij}^{c_n} = -k_n \boldsymbol{\delta}_n - \eta_n \mathbf{v}_{ij}^n \quad (6.3)$$

$$\mathbf{f}_{ij}^{c_t} = -k_t \boldsymbol{\delta}_t - \eta_t \mathbf{v}_{ij}^t \quad (6.4)$$

In Lethe-DEM, several linear (a.k.a. Hookean) and non-linear (a.k.a. Hertzian) contact models have been implemented. In the linear contact models, k_n , η_n , k_t , and η_t are constant, while in non-linear models, these parameters are functions of the normal ($\boldsymbol{\delta}_n$) and tangential overlaps ($\boldsymbol{\delta}_t$). The tangential component of the force is limited by the Coulomb limit. We refer the reader to Golshan *et al.* [175] for more detail on the definition of these parameters and for information on the various contact force models implemented in Lethe, all of which are compatible with the current resolved CFD-DEM model. Although, in the current work, only the non-linear model is used.

To evaluate the particle-wall contact force ($\mathbf{f}_i^w$) and torque ($\mathbf{T}_i^w$), we applied the same calculation as particle-particle contact, although we consider that the second particle has a radius that tends to infinity [175].

Fluid force and torque

In resolved CFD-DEM, the fluid force and torque applied on each particle come from the imposition of the no-slip boundary condition on the particle surface. The force is evaluated directly by integrating the stress tensor ($\boldsymbol{\sigma}$) at the surface of the particle (Γ_{p_i}). Hence:

$$\mathbf{f}_i^f = \int_{\Gamma_{p_i}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_{p_i} \quad (6.5)$$

$$\mathbf{T}_i^f = \int_{\Gamma_{p_i}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \times \mathbf{r}_i \, d\Gamma_{p_i} \quad (6.6)$$

where $\boldsymbol{\sigma}$ is the stress tensor

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho (\boldsymbol{\tau} - p^* \boldsymbol{\delta}_{ij}) \quad (6.7)$$

with $\boldsymbol{\delta}_{ij}$ the Kronecker delta and $\boldsymbol{\tau}$ the deviatoric stress tensor:

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \left((\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (6.8)$$

where $\mathbf{u}$ is the velocity vector, ν is the kinematic viscosity, $\mathbf{n}$ is the normal vector of the surface of the particle Γ_{p_i} , $p^* = \frac{p}{\rho}$ where p is the pressure and ρ the density. Finally, $\mathbf{r}_i$ is the radial vector between the boundary Γ_{p_i} and the center of mass of the particle p_i . Section 6.3.2 discusses how the stress tensors are integrated on the particle's surface within the sharp interface IBM.

Lubrication force

When the distance between two particles is smaller than two times the cell size, the fluid flow between them is insufficiently resolved. This causes errors in the evaluation of the hydrodynamic force since the lubrication force between the particles cannot be adequately captured. In this case, we use a lubrication model to correct the hydrodynamic force obtained by the CFD. We use the scheme proposed by Hori *et al.* [188]. The scheme adds a correction force to the hydrodynamic force calculated from the velocity and pressure field when two particles are closer than a specific threshold $\epsilon_0 = \lambda \Delta x$ (with λ is a user-defined constant). The added correction force approximates the component of the lubrication force that cannot be captured due to the proximity of the two particles. The lubrication force model only considers the normal component of the lubrication force. Simeonov *et al.* have shown that the tangential component of the lubrication force in a subgrid model is not significant compared to other effects such as mechanical contact force [189]. For this reason, it is neglected in the present work. The correction force is calculated using the difference between the lubrication force at their current position and the lubrication force if the distance between them is equal to ϵ_0 . The lubrication force model is [70]:

$$\mathbf{f}_{ij}^{lub} = \frac{3}{2} \pi \mu_f \left(\frac{d_{p_i} d_{p_j}}{d_{p_i} + d_{p_j}} \right)^2 \frac{1}{l} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \quad (6.9)$$

with l , the gap between the particles

$$l = \|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j\| - \frac{d_{p_i} + d_{p_j}}{2} \quad (6.10)$$

and where $\mathbf{e}_{ij}$ is the unit vector of the line that connects the centroids of the particles $\mathbf{p}_i$ and $\mathbf{p}_j$. Since Equation (2.32) is not defined for $l = 0$, we define a minimal value for l . This minimal gap between the particles can be physically interpreted as a surface roughness factor. In all cases studied in this paper, we fix $\lambda = 2$, which is the point where the flow between the particles starts to be poorly resolved. If l is smaller than $\lambda\Delta x$, then the correction force is given by:

$$\mathbf{f}_{ij}^{l_c} = \mathbf{f}_{ij}^{lub} - \mathbf{f}_{ij}^{lub}|_{l=\epsilon_0} \quad (6.11)$$

Otherwise, the lubrication correction force is 0, and we assume that the CFD adequately resolves the lubrication force.

6.3.2 Fluid dynamics and sharp-edge immersed boundary

The fluid phase is solved using the Lethe CFD solver [11] combined with the sharp interface IBM [16]. Lethe solves the incompressible Navier-Stokes equations:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p^* + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (6.13)$$

with the no-slip boundary conditions applied on the surface of the particles (Γ_{p_i}):

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\gamma = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times (\mathbf{x} - \mathbf{p}_i) \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{p_i} \quad (6.14)$$

where $\mathbf{x}$ is the coordinate of a point on Γ_{p_i} , $\mathbf{p}_i$ is the center of mass of the i particle.

Lethe uses the continuous streamline upwind Petrov–Galerkin and pressure-stabilizing Petrov–Galerkin (SUPG/PSPG) weak formulation of the Navier-Stokes equations (5.8). See Blais *et al.* and Barbeau *et al.* for more detail on the weak formulation implemented in Lethe [11, 16]. This formulation allows the use of equal-order elements for the velocity field and the pressure field [158] but is also compatible with high-order elements. In this work, we use Qp Lagrange polynomials and hexahedral elements.

To integrate in time, we use the backward difference (BDF) family of integration schemes implemented in Lethe (orders 1 to 3 are implemented) [11, 190]. These methods are not self-starting for orders higher than 1. In these cases, we do a ramp of order, i.e., solve the first time-step with first-order BDF, then a second at second-order, and so on and so forth.

Imposition of immersed boundaries

The no-slip boundary condition presented in Equation (6.14) is imposed using the sharp interface IBM. This method uses an extrapolation of the solution of elements normal to the boundary to impose the no-slip boundary condition. The elements used in this evaluation are what form Ω_n . The normal to the boundary is noted $\mathbf{n}$, and the point where the boundary condition $\mathbf{u}_\gamma$ is evaluated is noted $\mathbf{x}_\gamma$. The extrapolation function is a polynomial with the same order as the finite element support used for the velocity field. This IBM preserves the order of the underlying finite element scheme. Barbeau *et al.* [16] have demonstrated convergence up to the fourth order can be reached. Figure 6.1 presents an overview of the imposition of the boundary condition through extrapolation of the solution near the boundary. In the context of resolved CFD-DEM, the flow inside of the particle is not of interest and may not represent the solid rigid body motion of the particle. For this reason, the fluid inside the particle is imposed to have the same velocity as the particle's rigid body velocity. The pressure inside the particle p_i ($p_{p_i}^*$) is fixed by solving a simple Poisson equation where the boundary condition is fixed by the outside pressure on the surface of the particle i :

$$\nabla^2 p_{p_i}^* = 0 \quad (6.15)$$

$$p_{p_i}^* = p^* \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{p_i} \quad (6.16)$$

The only significant difference from the method presented by Barbeau *et al.* is how we evaluate the stress tensor at the surface of the particle. The motivation behind this alteration is to decrease the time required for evaluating the fluid forces. The force evaluation proposed by Barbeau *et al.* uses a uniform polar sampling of the stress tensor at the surface of the particle. The number of polar sampling points used was selected to guarantee the independence of the force evaluation from the number of points. This approach requires evaluating many new vectors and sampling points, which is computationally expensive. In the present work, we use an extrapolation of the stress tensor in the elements used in the imposition of the IB condition to find an approximation of the stress tensor at the particle's surface. We evaluate the stress tensor ($\boldsymbol{\sigma}$) using the same sampling points used to impose the boundary condition,

which reduces the computational cost. Then, using these evaluations, we generate an extrapolated approximation of the stress tensor at the particle's surface. The surface points where we have an estimation of the stress tensors are not uniformly distributed (see the distribution of the different $\mathbf{x}_\gamma$ in Figure 6.1). To integrate the stress tensor, we first identify the cells cut by the particle's surface. In these cells, the faces that are not cut are projected on the particle's surface. Using these face projections, we can create a surface mesh from which we can determine the quadrature weight of each point $\mathbf{x}_\gamma$ in the integration process of Equations (6.5) and (6.6). This change does not affect the value of the force evaluation compared to the results obtained with the uniform polar sampling point.

6.3.3 Solid-fluid coupling

Coupling between CFD and DEM is obtained by imposing the no-slip boundary condition, which allows the representation of the particle in the CFD and enables the calculation of the hydrodynamic force and torque in the CFD required for the DEM. Figure 6.2 presents the flow chart of this coupling scheme between the particles' dynamic with the DEM and the IB representation of the particle in the CFD solvers. In this scheme, the IB representation of the particle in the CFD is defined by integrating a modified formulation of Equations (6.1) and (6.2) where all the contact and lubrication correction forces and torques applied on the particle ($\mathbf{f}_{ij}^c$, $\mathbf{f}_{ij}^{lub}$, $\mathbf{f}_i^w$, $\mathbf{T}_{ij}^c$, $\mathbf{T}_i^w$) are expressed as a time derivative of their impulse. Using this strategy, (6.1) and (6.2) lead to:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \left(\frac{d\mathbf{I}}{dt} + \mathbf{f}_i^f + \mathbf{g}m_i \right) \quad (6.17)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \frac{1}{I_i} \left(\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \mathbf{T}_i^f \right) \quad (6.18)$$

where $\mathbf{I}$ is the translational impulse resulting from $\mathbf{f}_{ij}^c$, $\mathbf{f}_{ij}^{lub}$, $\mathbf{f}_i^w$ and $\mathbf{J}$ the angular impulse resulting from $\mathbf{T}_{ij}^c$, $\mathbf{T}_i^w$. To ensure the scheme's stability for any particle's density (ρ_s), we use an implicit coupling scheme [128]. To solve the IB representation of the particle state in the CFD (Equation (6.17) and (6.18)), we use the same time-stepping scheme used to solve the Navier-Stokes equations. For the sake of brevity, we only present the BDF1 implementation of the scheme, which gives us the following:

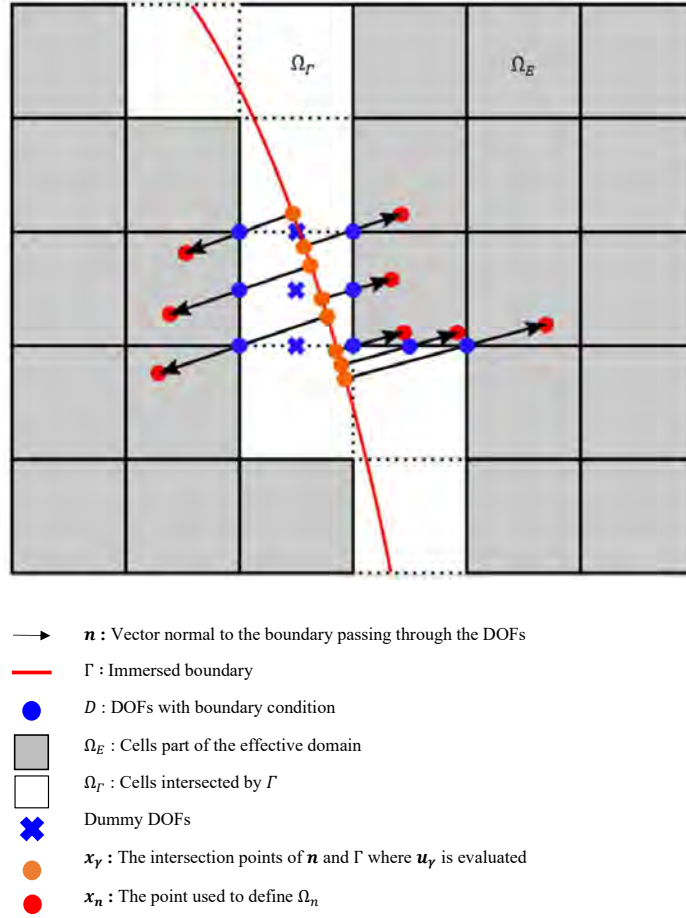


Figure 6.1 Visualisation of the different mathematical components needed to impose the sharp interface IB condition at the surface of a particle. This figure adapted from Barbeau *et al* [16]

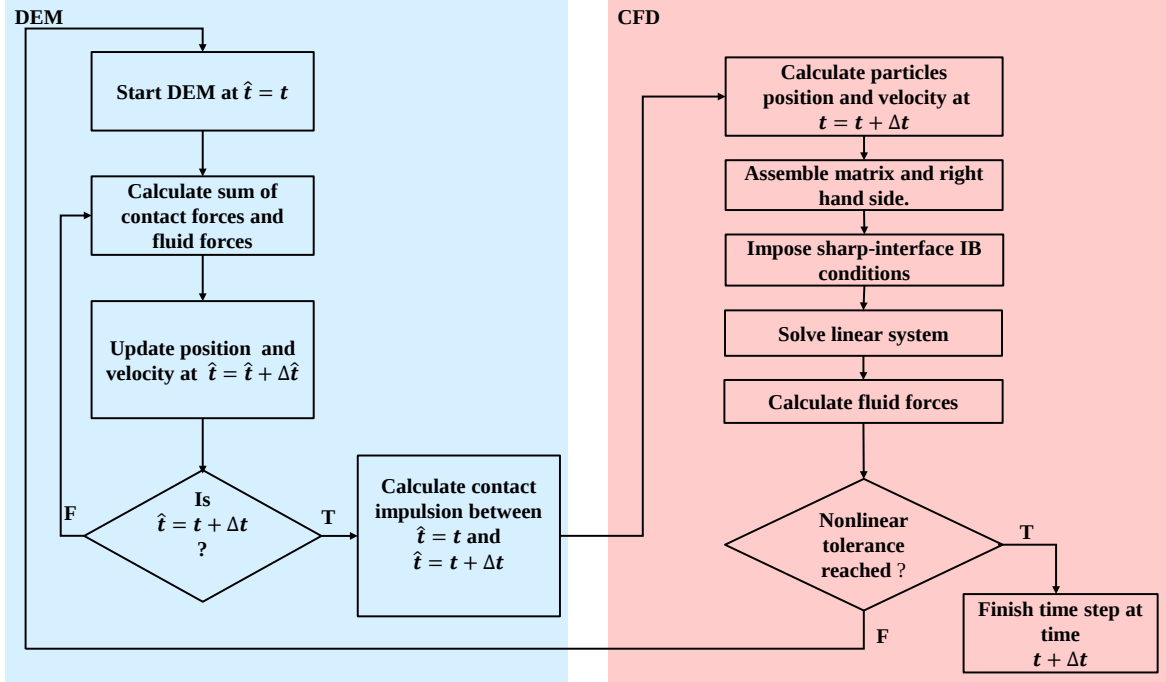


Figure 6.2 Flowchart of the resolved CFD-DEM model. If the statements inside the diamond shape box are true, the algorithm follows the (T) path; otherwise, it follows the (F) path.

$$\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_i^t + \frac{\Delta t}{m_i} \left(\frac{d\mathbf{I}}{dt} + \mathbf{f}_i^{f^{t+\Delta t}} + \mathbf{g}m_i \right) \quad (6.19)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^{t+\Delta t} = \boldsymbol{\omega}_i^t + \frac{\Delta t}{I_i} \left(\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \mathbf{T}_i^{f^{t+\Delta t}} \right) \quad (6.20)$$

The variables $\mathbf{I}$ and $\mathbf{J}$ and their time derivative are controlled by particle-particle and particle-wall collisions. The time step used in a DEM solver to resolve the particle motion must be sufficiently small to capture the collision's dynamics accurately. Time-steps on the order of $\Delta \hat{t} \approx 10^{-5} - 10^{-7}$ s are common [175]. Using the same time step in the CFD solver is impractical. Therefore we solve the particle motion at a time scale $\Delta \hat{t}$ where $\Delta \hat{t} = \frac{\Delta t}{f_c}$, with f_c denoting the number of sub-time steps done per CFD time step. The results of the DEM, resolved at a different time scale than the CFD, allow us to approximate $\frac{d\mathbf{I}}{dt}$ and $\frac{d\mathbf{J}}{dt}$ in Equations (6.19) and (6.20) by the following:

$$\frac{d\mathbf{I}}{dt} \approx \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{f}_{ij}^c + \mathbf{f}_{ij}^{lub}) + \mathbf{f}_i^w \right) d\hat{t} \quad (6.21)$$

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} \approx \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{T}_{ij}^c) + \mathbf{T}_i^w \right) d\hat{t} \quad (6.22)$$

To solve the particle motion at the $\Delta\hat{t}$ time scale, we use the following formulation of Equations (6.1) and (6.2):

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{d\hat{t}} = \frac{1}{m_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{f}_{ij}^c + \mathbf{f}_{ij}^{lub}) + \mathbf{f}_i^w + \mathbf{f}_i^{f^{t+\Delta t}} + \mathbf{g}m_i \right) \quad \forall \hat{t} \in]t, t + \Delta t] \quad (6.23)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{d\hat{t}} = \frac{1}{I_i} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_b} (\mathbf{T}_{ij}^c) + \mathbf{T}_i^w + \mathbf{T}_i^{f^{t+\Delta t}} \right) \quad \forall \hat{t} \in]t, t + \Delta t] \quad (6.24)$$

The only difference with Equations (6.1) and (6.2) is that we conserve the fluid force and torque constant at the DEM time scale over one CFD time step. We use the evaluation of the fluid force at time $t + \Delta t$ to conserve the stability of the scheme.

Equations (6.23) and (6.24) can be solved with an adequate explicit scheme. We use a fourth-order Runge-Kutta (RK4) integration scheme independently of the BDF scheme used for the CFD. As we solve the particle motion with the DEM, we simultaneously integrate Equation (6.21) and (6.22). Based on the results of this integration process, we can evaluate Equations (6.19) and (6.20).

This formulation of the particle state in the CFD preserves the order of convergence of the BDF time-stepping scheme used in the absence of contact and lubrication forces. In the presence of these forces, because we define the time derivative of the impulses $\frac{d\mathbf{I}}{dt}$ and $\frac{d\mathbf{J}}{dt}$ based on the variation of impulse between time t and $t + \Delta t$, we introduce an error proportional to $\mathcal{O}(\Delta t)$. Also, the position obtained by integrating the velocity at the CFD time scale

and the DEM time scale is not equal when the contact or lubrication forces are not equal to zero. To prevent the residual overlapping of the particles in the presence of these forces, we conserve the position obtained through the DEM integration process at time $t + \Delta t$. Otherwise, we simply integrate the velocity at the CFD time scale to obtain the position of the IB representation of the particle in the CFD. This results in the following:

$$\mathbf{p}_i^{t+\Delta t} = \begin{cases} \hat{\mathbf{p}}_i^{t+\Delta t} & \|\frac{d\mathbf{I}}{dt}\| > 0 \\ \mathbf{p}_i^t + \Delta t \mathbf{v}_i^{t+\Delta t} & \|\frac{d\mathbf{I}}{dt}\| = 0 \end{cases} \quad (6.25)$$

where $\hat{\mathbf{p}}_i^{t+\Delta t}$ is the position of the particle at time $t + \Delta t$ obtained by the DEM integration process.

Equations (6.19), (6.20) and (6.25) are non-linear. This system of equations must be solved iteratively in conjunction with the fluid since the fluid force and torque on the particle $(\mathbf{f}_i^{f^{t+\Delta t}}, \mathbf{T}_i^{f^{t+\Delta t}})$ at time $t + \Delta t$ depends non-linearly on the velocity, angular velocity and position of the particle $(\mathbf{v}_i^{t+\Delta t}, \boldsymbol{\omega}_i^{t+\Delta t}, \mathbf{x}_i^{t+\Delta t})$. To do so, we use an accelerated fixed-point method [191]. For the $n + 1$ non-linear iteration, we get:

$$\mathbf{v}_{i_{n+1}}^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_{i_n}^{t+\Delta t} - \alpha^{v_i} \mathbf{R}_n^{v_i} \quad (6.26)$$

$$\boldsymbol{\omega}_{i_{n+1}}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{\omega}_{i_n}^{t+\Delta t} - \alpha^{\omega_i} \mathbf{R}_n^{\omega_i} \quad (6.27)$$

where $\mathbf{R}_n^{v_i}$ and $\mathbf{R}_n^{\omega_i}$ are Equations (6.19) and (6.20) written in residual form. In these equations, the coefficient, α^{v_i} and α^{ω_i} are defined by the following equations [192]:

$$\alpha^{v_i} = \frac{(\mathbf{v}_{i_n}^{t+\Delta t} - \mathbf{v}_{i_{n-1}}^{t+\Delta t}) \cdot (\mathbf{R}_n^{v_i} - \mathbf{R}_{n-1}^{v_i})}{\|\mathbf{R}_n^{v_i} - \mathbf{R}_{n-1}^{v_i}\|^2} \quad (6.28)$$

$$\alpha^{\omega_i} = \frac{(\boldsymbol{\omega}_{i_n}^{t+\Delta t} - \boldsymbol{\omega}_{i_{n-1}}^{t+\Delta t}) \cdot (\mathbf{R}_n^{\omega_i} - \mathbf{R}_{n-1}^{\omega_i})}{\|\mathbf{R}_n^{\omega_i} - \mathbf{R}_{n-1}^{\omega_i}\|^2} \quad (6.29)$$

The definition of α^{v_i} and α^{ω_i} is based on the classical secant method for 1D problems and the hypothesis that the vector of variation of residuals (e.g., $\mathbf{R}_n^{v_i} - \mathbf{R}_{n-1}^{v_i}$) and the vector of variation of velocities (e.g., $\mathbf{v}_n^{t+\Delta t} - \mathbf{v}_{n-1}^{t+\Delta t}$) are close to being colinear. The derivative of the residuals with respect to the variation velocities is approximated based on the norm of the variation of these two vectors. To conserve the sign of the derivative and take into account cases where these vectors are not perfectly colinear, the ratio of the norms of these vectors is multiplied by the cosine of the angle between these vectors.

For the first iteration, we do not have a previous residual ($\mathbf{R}_{n-1}^{v_i}, \mathbf{R}_{n-1}^{\omega_i}$) to use in the calculation of α^{v_i} and α^{ω_i} . To find the initial value of these parameters, we based our estimation on the effect of the virtual mass on the residual, which leads to the following formulation:

$$\alpha^{v_i} = \frac{-1}{1 + \frac{C_m \rho V_p}{m_i}} \quad (6.30)$$

This approximation of α^{v_i} is robust even in the case where the virtual mass ($C_m \rho V_p$) is significantly larger than the particle mass. The first non-linear iteration uses the same value for α^{ω_i} .

6.3.4 Spurious pressure oscillations

The motion of the sharp interface IB generates pressure oscillations in the solution of the Navier-Stokes equations. Lee *et al.* [125] have discussed in detail the sources of pressure oscillation observed in the finite volume method when an IB is moving within a static Cartesian mesh. The authors outline the two primary sources of pressure oscillation: the pressure discontinuity in space and the velocity discontinuity in time. This section discusses how these two sources of pressure oscillations affect our implicit finite element solvers.

Pressure discontinuity in space The pressure on both sides of the particle surface is discontinuous. This problem affects different schemes in different ways. Explicit schemes often require the introduction of a field extension of the pressure [187] near the boundary or the addition of a source-sink term [125, 164] to avoid problems related to the discontinuity of the pressure field near the boundary when it is moving.

These modifications are not necessary for our implicit FEM scheme because we do not have a pressure boundary conditions on the surface of the IB, and we use an implicit monolithic time-stepping scheme.

We recall that the cells cut by the IB do not have their equation assembled in the matrix. This results in a completely decoupled problem inside and outside of the particle. This also means that the pressure DOF close to the IB only serves to impose the continuity equation in their elements without requiring the solution of a zero pressure gradient equation. Since we use an implicit scheme, the pressure in the previous time step does not play a role in evaluating the velocity and pressure fields in the current time step. This means that the pressure history when the boundary moves does not impact the evaluation of the new solution.

Time discontinuity of the velocity The discontinuity in time of the velocity field is due to the change in the nature of the Degrees of Freedom (DOFs) near the immersed boundary. When the particle surface (Γ_{p_i}) enters a new cell, The DOFs in cells cut by the boundary have their equation defined by the IBM instead of the FEM formulation. This change in the nature of the DOFs happens discretely when a new cell is cut. This leads to a jump in the value of these DOFs (noted $\Delta \mathbf{u}_s$). The jump in the solution's value is proportional to the extrapolation error of the stencil [125]. Since the extrapolation error has the same order as the spatial discretization ($\mathcal{O}(\Delta x^{n+1})$), we obtain that $\Delta \mathbf{u}_s = \mathcal{O}(\Delta x^{n+1})$ for a particle moving at constant velocity [125] with n , the order of the polynomial support function used in the finite element formulation of the velocity field. Figure 6.3 shows a simplified visualization of the jump of the value of a DOF when the particle's surface enters a new cell. Lee *et al.* [125] showed that the jump in the value of the DOFs corresponds to a spurious variation of the momentum of the fluid near the boundary:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\mathcal{O}(\Delta x^{n+1})}{\Delta t} \quad (6.31)$$

From Equation (6.31) and (5.8) Lee *et al.* concluded that the spurious variation of the fluid's momentum is proportional to the spurious oscillations of the pressure field near the boundary. This oscillation of the pressure field near the boundary creates oscillations in the force applied to the particle. The amplitude of the pressure oscillation (A_p) and the amplitude of the force oscillation applied to the particle (A_f) are proportional to the variation of the momentum near the boundary: [125]

$$A_f \propto A_p \propto \frac{\mathcal{O}(\Delta x^{n+1})}{\Delta t} \quad (6.32)$$

Equation (6.32) implies that the L_∞ norm in time of the force applied on a moving IB is $\propto \mathcal{O}(\Delta t^{-1})$ with the time step due to the oscillation of the pressure field. This also means

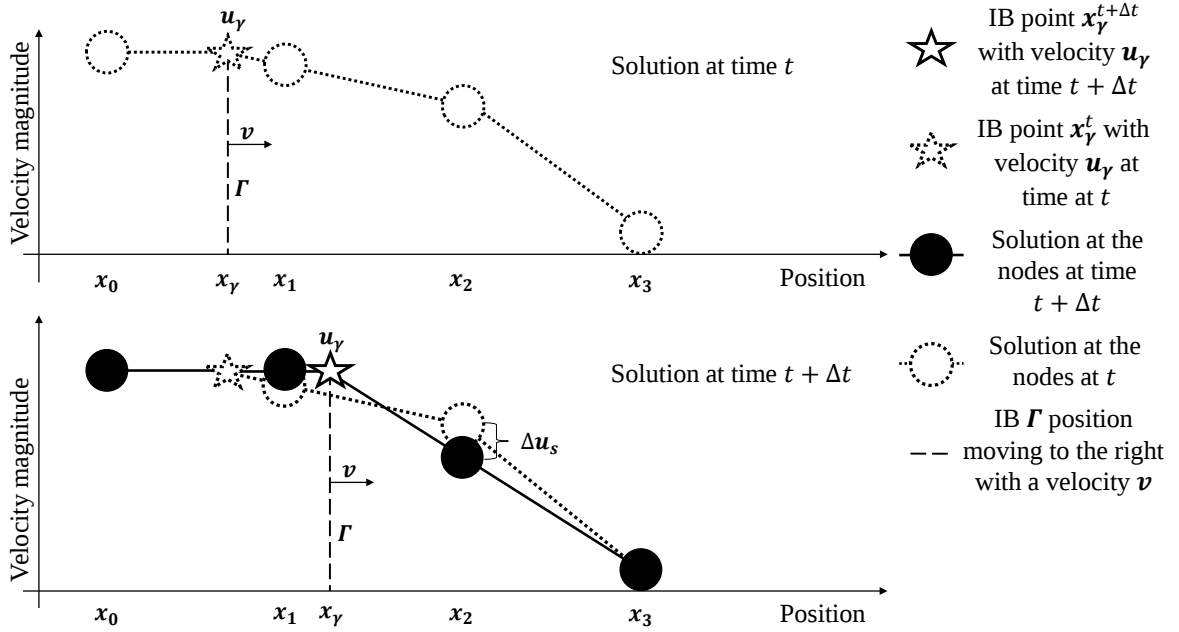


Figure 6.3 Representation of the sudden change of the solution when the IB changes cell.

that the amplitude of the force oscillation will decrease with the cell size with the same order as the velocity field ($\mathcal{O}(\Delta x^{n+1})$). This implies that for a constant Courant Friedrichs Lewy condition (CFL) of the particle, the amplitude of force oscillation due to spurious pressure oscillation should decrease with the element size ($\mathcal{O}(\Delta x^n)$). Furthermore, we can estimate the impact on the particle's velocity caused by one change of cell by studying the impulsion (I_s) transferred to the particle by the spurious pressure oscillation. From equation (6.32) we have:

$$I_s = A_f \Delta t \propto \mathcal{O}(\Delta x^{n+1}) \quad (6.33)$$

which implies that the particle's velocity does not diverge with the time step.

Due to the discrete change in the fluid force applied to the particle when it changes cell, the particle position and velocity may oscillate between two solutions during the non-linear resolution process (see Section 6.3.3). This phenomenon is due to spurious force oscillations.

6.4 Verification of the model

To verify the method proposed herein with a moving boundary, we use the methods of manufactured solution (MMS). The analytical solution used in the MMS is based on the Stokes solution for the flow around a spherical particle. We apply two modifications to this solution. First, we reframe the Stokes solution in the reference frame of an external observer. Second, since the analytical solution must be smooth and have non-zero derivatives in space and time [137], the particle's velocity is set to $v = -\sin(tf)fA$ where f and A control the frequency and amplitude of the oscillation. Giving us:

$$\mathbf{u}_a = [u_x, u_y, u_z] \quad (6.34)$$

$$p_a = \frac{3}{4} \frac{\mu u_\infty}{d_p} \left(\frac{d_p}{r} \right)^2 \frac{(x - \cos(tf)A)}{r} \quad (6.35)$$

where:

$$u_\infty = v = -\sin(tf)fA \quad (6.36)$$

$$r = \sqrt{(x - \cos(tf)A)^2 + y^2 + z^2} \quad (6.37)$$

$$u_r = -u_\infty \left(1 - \frac{3}{4} \frac{d_p}{r} + \frac{1}{16} \left(\frac{d_p}{r} \right)^3 \right) \frac{(x - \cos(tf)A)}{r} \quad (6.38)$$

$$u_\theta = -u_\infty \left(-1 + \frac{3}{8} \frac{d_p}{r} + \frac{1}{32} \left(\frac{d_p}{r} \right)^3 \right) \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{r} \quad (6.39)$$

$$u_x = u_\infty + \left(\frac{(x - \cos(tf)A)u_r}{r} - \frac{\sqrt{y^2 + z^2}u_\theta}{r} \right) \quad (6.40)$$

$$u_{\perp x} = \frac{\sqrt{y^2 + z^2}u_r}{r} + \frac{(x - \cos(tf)A)u_\theta}{r} \quad (6.41)$$

$$u_y = \frac{u_{\perp x}y}{\sqrt{y^2 + z^2}} \quad (6.42)$$

$$u_z = \frac{u_{\perp x}z}{\sqrt{y^2 + z^2}} \quad (6.43)$$

The resulting momentum source term ($\mathbf{S}$) is defined by:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \mathbf{u}_a}{\partial t} + (\mathbf{u}_a \cdot \nabla) \mathbf{u}_a + \nabla p_a - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_a \quad (6.44)$$

$$\boldsymbol{\tau}_a = \frac{\mu}{\rho} \left((\nabla \mathbf{u}_a) + (\nabla \mathbf{u}_a)^T \right) \quad (6.45)$$

and the force on the particle:

$$f_d = 3u_\infty \pi d_p \mu \quad (6.46)$$

All variables for this case are dimensionless. We use Cartesian coordinates to express the solution. Thus, the particle diameter d_p , the fluid viscosity μ , and the fluid density ρ are set to 1.

To determine the convergence of the scheme, we evaluate the normalized $\mathcal{L}^2$ error norm of the velocity ($\|e_u\|_2$) and pressure ($\|e_p\|_2$) fields in space and average it during the simulation time. We note the time-averaged norms of the error $\|e_u\|_{1,2}$ and $\|e_p\|_{1,2}$ for the velocity and pressure, respectively:

$$\|e_u\|_2 = \left(\int_{\Omega} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_a\|^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.47)$$

$$\|e_u\|_{1,2} = \frac{\int_0^{t_f} \frac{\|e_u\|_2}{\|v\|} dt}{t_f} \quad (6.48)$$

$$\|e_p\|_2 = \left(\int_{\Omega} (p - p_a)^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.49)$$

$$\|e_p\|_{1,2} = \frac{\int_0^{t_f} \frac{\|e_p\|_2}{\|v\|} dt}{t_f} \quad (6.50)$$

This manufactured solution allows two verification cases: the imposed dynamics and the coupled dynamics. In the imposed dynamics case, the particle's position and velocity are prescribed at each point in time using the analytical solution. This case allows us to verify that the sharp IB does not lose its properties when the particle dynamic is known. For the coupled dynamic case, a force is applied to the particle, and we integrate the particle velocity and position to verify the coupling scheme. The force applied to the particle is determined by the sum of the drag and acceleration forces, both known in this case (see equation (6.46)).

6.4.1 Imposed dynamics case

To minimize the error due to time integration, A and f are set to 0.25 and 1.0, respectively. Since this case is symmetric around the x axis, only one quadrant of the yz plan is used in the simulation. The domain is a rectangular box with dimension $2 \times 1 \times 1$. The simulation with $256 \times 128 \times 128$ Q2-Q1 elements ($\frac{\Delta x}{d_p} = \frac{1}{128}$) was carried out using two times step $\Delta t = \frac{1}{64}$ and $\Delta t = \frac{1}{128}$ to ensure that the error in time is negligible. The final time of the simulation $t_f = 0.5$ ensures that the particle moves at least the length of 2 elements on the smallest mesh. For all cases, the results reported used $\Delta t = \frac{1}{128}$.

In Figure 6.4, the velocity and pressure field convergence shows that the motion of the IB does not affect the convergence of the scheme. For the velocity field, Q1-Q1 and Q2-Q1 elements, respectively, reach a convergence order of 1.9 and 2.8. For the pressure field Q1-Q1 elements reach a convergence order of 1.8. The pressure convergence order for Q1-Q1 elements is usually around 1.5, which means that the convergence rate observed is slightly above what is expected [193, 194]. Q2-Q1 elements exceed the expected convergence order for the pressure field with an order of 2.4 instead of 2.

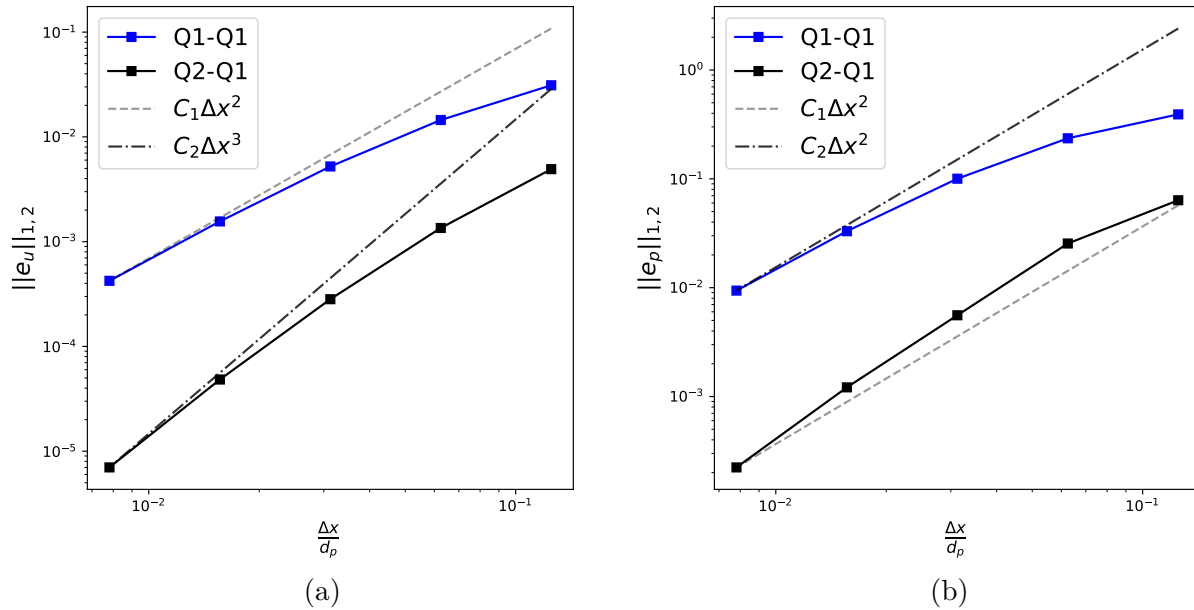


Figure 6.4 Error on the velocity (a) and pressure (b) field for the imposed oscillating Stokes cases in 3D evaluated using Equations (6.48) and (6.50) as functions of the size of the space discretization. The convergence analysis uses Q1-Q1 and Q2-Q1 elements with a BDF2 time-stepping scheme using a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$.

6.4.2 Coupled dynamics case

For this case, evaluating the force on a particle requires evaluating the gradient of the velocity field near the boundary to get viscous stresses. Because of this, the force evaluation is one order of accuracy below that of the velocity field. When the particle is coupled, the velocity and position of the particles are calculated using the solid-fluid interaction force. As such, the order of convergence of the velocity and pressure fields should be reduced by one order. Identically to the imposed dynamics case, A and f are set to 0.25 and 1.0. Contrary to the imposed dynamics case, the symmetry of the problem around the x axis is not used in order to avoid particle wall contacts. The domain is a rectangular box with dimension $2 \times 2 \times 2$. The time step used is the same as the one used for the imposed dynamics ($\Delta t = \frac{1}{128}$) to ensure that the error in time is negligible. The final time used is the same as for the imposed dynamics case ($t_f = 0.5$). In Figure 6.5, the velocity and pressure field convergence shows that the scheme approaches the expected convergence order. For the velocity field, the Q1-Q1 elements reach an order of convergence of 1.2, which is higher than expected. Q2-Q1 elements reach a convergence order of 1.8, which is a slightly lower convergence order than expected. For the pressure field, the convergence order reaches 1.0 for Q1-Q1 elements and 1.9 for Q2-Q1 elements.

6.4.3 Time step convergence

The error due to the space discretization must be negligible to verify the time-stepping scheme when the particle is coupled. As such, we increase the error due to the time discretization by increasing the frequency of the particle's oscillation (A and f are set to 0.25 and 8π). The domain is a rectangular box with dimension $2 \times 2 \times 2$, and the symmetry of the problem around the x axis is not used. The mesh used for the time convergence is $128 \times 128 \times 128$ Q2-Q1 elements. We use the BDF2 integration scheme and a final time $t_f = \frac{1}{16}$. This final time is enough to cover the full acceleration of the particle. Figure 6.6 highlights that the BDF2 time stepping scheme approaches the expected convergence order with an order of 1.8.

6.4.4 Computational efficiency

Q2-Q1 elements reach significantly lower errors than Q1-Q1 elements for a given number of degrees of freedom. To assess a potential gain in the efficiency of the solver to reach a given error level, we look at the total CPU time needed to complete the simulation with the various discretizations used in the space convergence analysis. Results for the imposed dynamic case were obtained using 40 to 200 Intel Gold 6148 Skylake CPUs running at 2.4GHz. Results

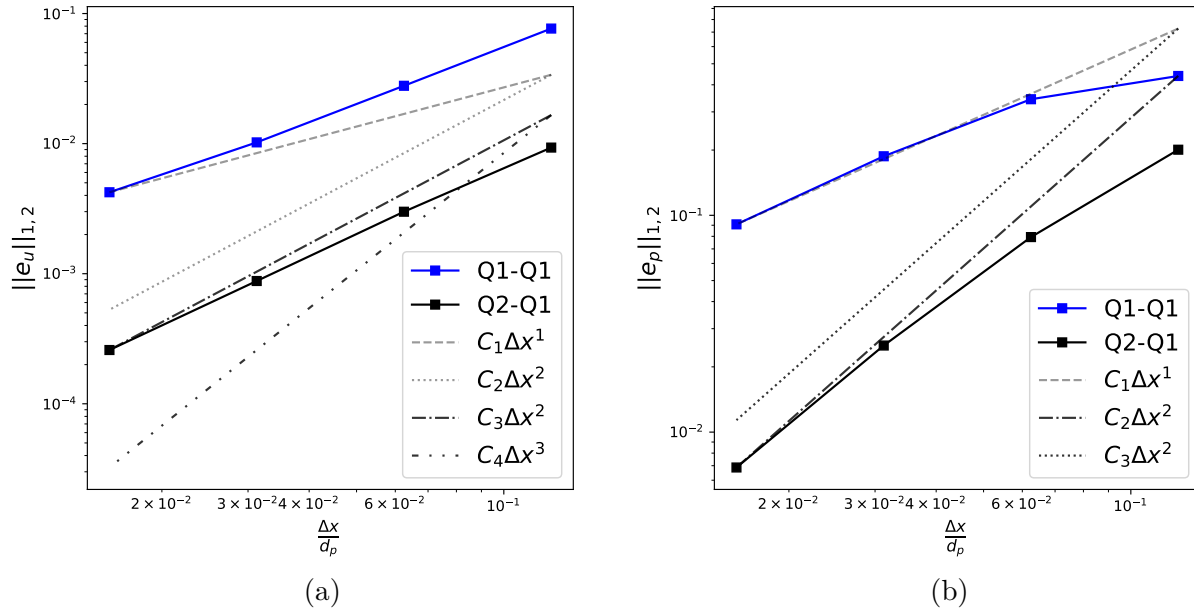


Figure 6.5 Error on the velocity (a) and pressure (b) field for the coupled oscillating Stokes cases in 3D evaluated using Equations (6.48) and (6.50) in functions of the size of the space discretization. The convergence analysis is done using Q1-Q1 and Q2-Q1 elements using a BDF2 scheme with a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$. The reference convergence curve for the IBM without the coupling was added as a reference for each case. The only notable exception is the convergence order for the pressure using Q2-Q1 element since the reference convergence order (2) is not affected by the coupling.

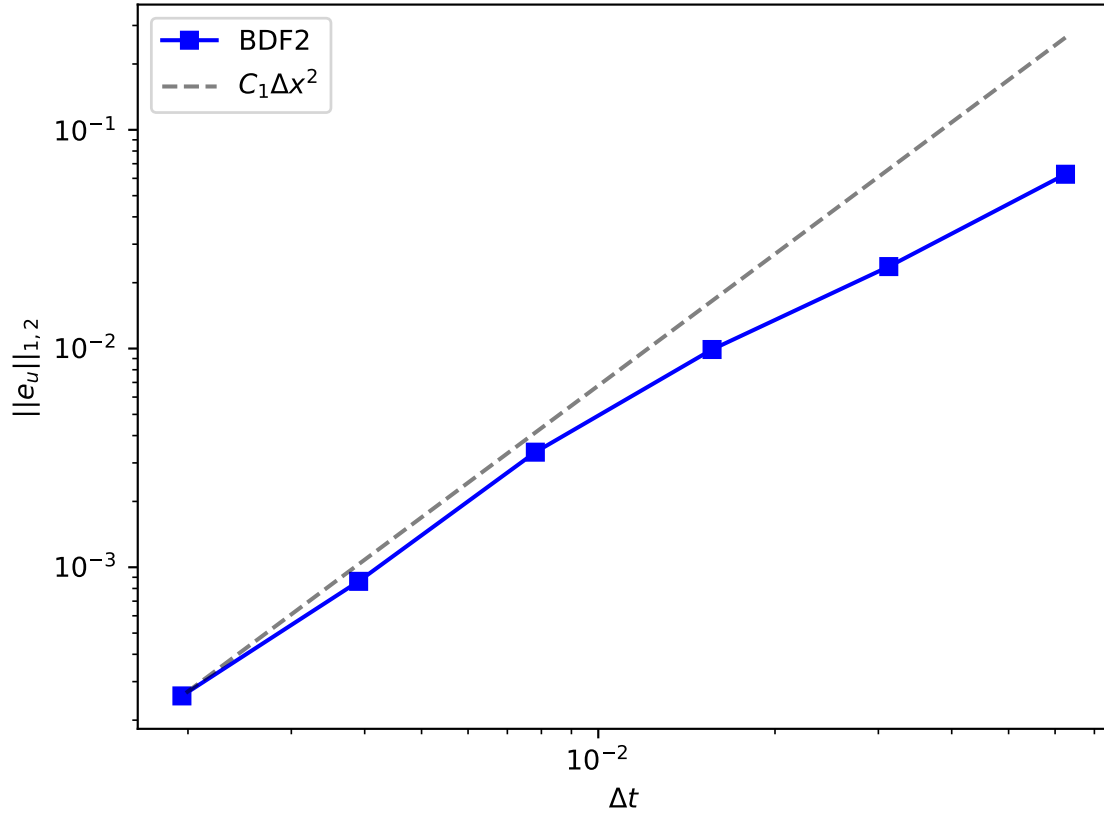


Figure 6.6 Time convergence of the velocity field for the coupled dynamics case using 128×128 Q2-Q1 elements ($\frac{d_p}{\Delta x} = 64$) and a BDF2 time-stepping scheme.

for the coupled dynamic case were obtained using 64 to 256 AMD Rome 7532 CPUs running at 2.4GHz. As shown in Figure 6.7, the Q2-Q1 elements can reach a given error level up to 20 times faster than the Q1-Q1 elements in the imposed dynamic case. For the coupled dynamic case, the Q2-Q1 elements are also more efficient and can reach a given error level up to 15 times faster. For both the imposed and coupled dynamic cases, the smaller the error required, the more time-efficient the Q2-Q1 elements are.

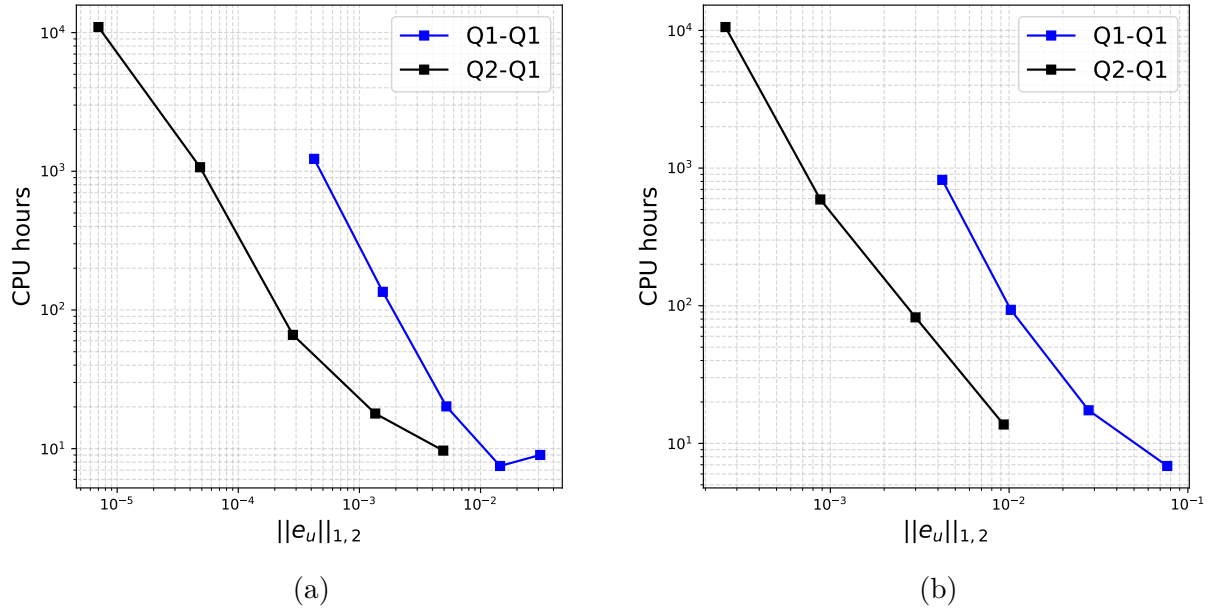


Figure 6.7 Total CPU time as a function of the velocity field error for the imposed dynamics case (a) and coupled dynamics case (b). The analysis uses Q1-Q1 and Q2-Q1 elements using a BDF2 scheme with a time step of $\Delta t = \frac{1}{128}$. Results for the imposed dynamics case were obtained using 40 to 200 Intel Gold 6148 Skylake CPUs running at 2.4GHz. Results for the coupled dynamics case were obtained using 64 to 256 AMD Rome 7532 CPUs running at 2.4GHz

6.5 Validation of the model

To validate this solver, we simulate four cases: sedimentation of a lone particle at a low Reynolds number, the rise of a positively buoyant particle at a high Reynolds number (2500), contact between two particles, and the Boycott effect which occurs when multiple particles settle in an inclined vessel. Additionally, a case with a low particle-to-fluid density ratio (0.01) is presented in A. This last case demonstrates the stability of the scheme for a low

particle-to-fluid density ratio. This case only aims to demonstrate the stability of the scheme and does not include a comparison to experimental results.

6.5.1 Sedimentation at low Reynolds

To validate the code results at a low Reynolds number, we use the well-established cases proposed by Ten Cate *et al.* [17]. In their experiment, they present four experimental results for the sedimentation of a lone particle ($d_p = 1.5$ cm, $\rho_p = 1.120$ g cm⁻³) in a small container ($10 \times 10 \times 16$ cm). The particle is released 12 cm above the bottom of the container and is centered relative to the walls of the container. Each experiment is done in a different fluid. The properties of each of the fluids and the corresponding experiments are presented in Table 6.1.

To simulate this case, we use a Q2Q1 structured mesh with adaptive mesh refinement based on the Kelly error estimator [94] and a moving refinement zone that follows the particle. The particle's refinement zone is defined by a hyper-shell with an inner diameter of $0.8d_p$ and an outer radius of $1.3d_p$ center at the particle's position. The mesh size around the particle is $\Delta x = \frac{d_p}{48} = 0.03125$ cm. The number of cells varies from 138k to 446k for all cases during their simulation. The time-steps for the E1 and E2 cases are $\Delta t = 0.00125$ s; for the E3 and E4, we have $\Delta t = 0.0025$ s. All cases use the BDF2 time-stepping scheme. The results obtained for all cases are presented in Figure 6.8. These results show that the particle velocity obtained for all simulations aligns very well with the experimental results. The maximal velocity of the simulation is within 5% of the experimental value, which is the amplitude of the experimental error. Similarly to Ilinca *et al.*, [195] we observe that the sedimentation height of the experimental results differs from the case description with a height of 12.3 cm from the integral of the experimental velocity. This explains that the sedimentation time is shorter in the simulation.

Using the E4 case, we compare the results obtained for multiple space discretization sizes and compare Q2Q1 and Q1Q1 elements. For Q1Q1 elements we have mesh with Δx ranging

Case	Reynolds number	ρ_f (g cm ⁻³)	μ (Pa s)
E1	1.5	0.970	0.373
E2	4.1	0.965	0.212
E3	11.6	0.962	0.113
E4	31.9	0.960	0.058

Table 6.1 Fluid properties for the 4 experiments presented by Ten Cate *et al.*.

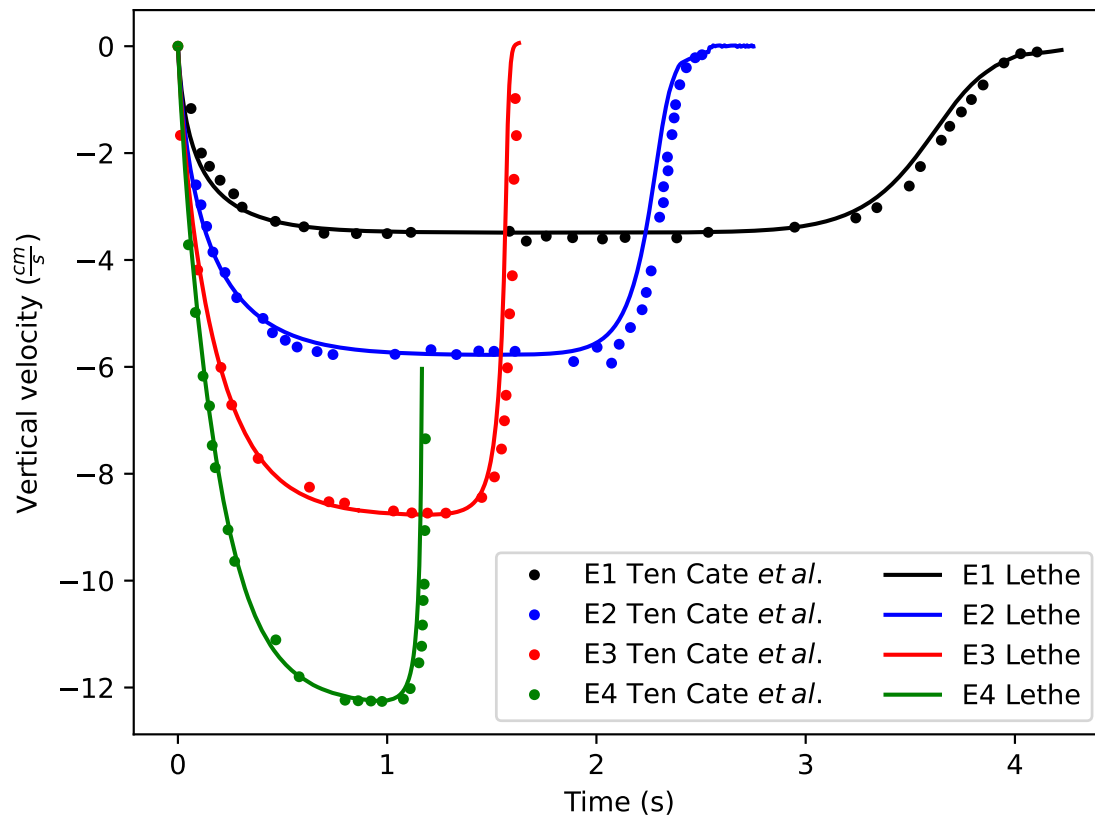


Figure 6.8 Vertical velocity comparison between the simulation and the experimental results presented by Ten Cate *et al.* [17]

from $\frac{d_p}{6}$ to $\frac{d_p}{96}$. For Q2Q1 s we have mesh with Δx going from $\frac{d_p}{6}$ to $\frac{d_p}{48}$. The time-step Δt used for the finest Q2Q1 mesh is $\Delta t = 0.00125$ s. The maximal particle CFL is kept constant. Results are presented in Figure 6.9. These results show that for meshes with a similar number of DOFs (e.g., Q2Q1 $\Delta x = \frac{d_p}{48}$ and Q1Q1 $\Delta x = \frac{d_p}{96}$) the Q2Q1 solution are slightly more accurate than the Q1Q1 solutions. These results still suggest that there is a gain in the efficiency of the simulation with higher-order elements. But, the difference here is more marginal than what has been observed in the verification case (See Figure 6.7).

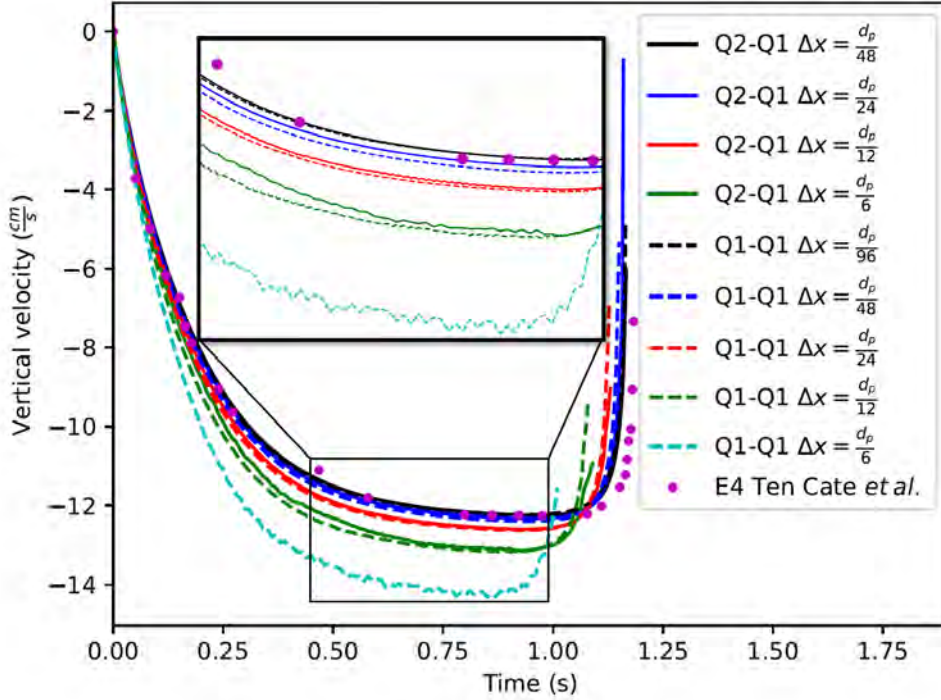


Figure 6.9 Vertical velocity comparison for the E4 case between the simulations done with various discretization. The experimental results presented by Ten Cate *et al.* [17] are also added to the figure as a reference. Results with the same color have a similar number of total DOFs.

6.5.2 Positively buoyant particle at $\text{Re}=2500$

This case aims to validate the capacity of this solver to capture the particle-fluid interaction at a higher Reynolds number. A full description of the experimental setup, equipment used, and results obtained are presented in the work of Deng [196].

The experiments were carried out in a rectangular tank of $(29.2 \times 29.2 \times 102.0\text{cm})$ filled with water at room temperature (20°C). The particle position and velocity are measured by image velocimetry using a high-speed camera (MotionBLITZ @Cube4) running at 500

frames per second. A 50/50 mirror is used to film the particles in 2 perpendicular planes with the same camera. The camera is fixed, which allows a vision of the first 20 cm of the vertical trajectory of the particles. The particles are maintained in place by a tubular arm in which a vacuum is pulled. The particle is released by slowly removing the vacuum in the tube.

The particle has a density of 0.760 g cm^{-3} , the diameter of the particle $d_p = 1.016 \text{ cm}$, and is released 5 cm from the bottom of the tank in the middle of the tank. The Reynolds number of the particles oscillates around 2500 once it has reached terminal velocity.

The time needed for the onset of the vortex shedding and the direction of the release of the first vortex are both not determined by the initial condition of the case. To compare the numerical and experimental results, we compare the following quantities: the vertical velocity during the acceleration phase, the vertical velocity once the first vortex is shed, the maximal horizontal velocity during the first vortex shedding, and the average vertical velocity after the first vortex shedding.

Numerically, we study this case in a $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}$ domain. Around the particle, we have a mesh of Q2Q1 elements of size $\Delta x = \frac{d_p}{69.36}$. The mesh is adapted using the Kelly error estimator [94] combined with a refinement zone around the particle surface, forming a hyper-shell with an inner diameter of $0.9d_p$ and an outer diameter of $1.1d_p$ cm center at the particle's position. This setup averages around 600k elements after the first vortex shedding. We used a time step $\Delta t = 5 \times 10^{-4} \text{ s}$ with the BDF2 scheme.

The simulation compares the vertical and horizontal velocities, and the experiments are presented in Figure 6.10. These results confirm that the simulation perfectly matches the particle acceleration after the release until the first vortex shedding occurs. In the experiment, the first vortex shedding occurs at around 0.16 s. At this point in the experiments, the particles start slowing down vertically and accelerate in the horizontal direction. The maximum velocity the particle reaches horizontally in the experiments is 10.0 cm s^{-1} . In the simulation, the particle accelerates until it reaches its maximum velocity at 0.27 s. At that time, the first vortex shedding appears in the simulation. We note that the installation of the instability seems more sudden in the experiments than in the numerical simulation. Similarly to the experiments, the particle accelerates horizontally and reaches a maximum horizontal velocity of 11.3 cm s^{-1} . Both for the experiments and the simulation, the minimum vertical velocity occurs just after reaching the maximum horizontal velocity. For the experiments, this occurs at 0.31 s with a vertical velocity of 14.3 cm s^{-1} which is very similar to the 13.9 cm s^{-1} obtained in the simulation at 0.47 s. The vertical velocity of the particles in the experiments re-accelerates and oscillates between 18.5 cm s^{-1} and 24.0 cm s^{-1} . The vertical velocity of

the particles in the simulation re-accelerates and reaches 23.9 cm s^{-1} . However, the velocity did not have the time to reach a new minimum before the simulation was stopped. The model captures the apparent increase in the particle's drag coefficient due to the particle's horizontal motion. A force balance using Cheng drag correlation [197] predicts a terminal particle velocity of 27.8 cm s^{-1} , which is significantly higher than the average vertical velocity observed in the experiments (20.8 cm s^{-1}) and the simulation (21.2 cm s^{-1}) after the first vortex shedding. Cheng drag correlation is given by:

$$Cd = \frac{24}{\text{Re}}(1 + 0.27\text{Re})^{0.43} + 0.47 \left(1 - \exp(-0.04\text{Re}^{0.38})\right) \quad (6.51)$$

The increased drag coefficient of an object that moves perpendicular to the flow is well-known in the case of cylinders [198, 199].

The particle velocity discrepancy between the simulation and experimental results occurs after the first vortex's release in the experiment. A smaller drag coefficient causes the higher vertical velocity reached by the particle in the simulation before the release of the vortex. The time required for the vortex to form and the direction of particle movement resulting from the vortex emergence are chaotic in both the simulation and the experiment. However, in the latter, the manipulations required to position and release the particle or its rugosity may contribute to a faster onset of the vortex shedding. This phenomenon explains, in part, the lower horizontal velocity in the experiment after the first vortex release. For this reason, after the first vortex release, the variable of interest is the average particle velocity, which is well captured in the current case. These results showed that the simulation could reproduce important features of the particle dynamics observed in the experiment, such as the interaction with its vortex shedding.

6.5.3 Contact between two particles

To validate the algorithm's stability during contact, we simulate the case proposed by Glowinski *et al.* [18]. Other sources have also reproduced this case [19, 20]. It consists of two sedimenting spheres undergoing the classical drafting, kissing, and tumbling (DKT) behavior. The domain is defined by a $1 \times 1 \times 4 \text{ cm}$ rectangular extrusion. The two particles (p0 and p1) are placed respectively at 3.5 cm , and 3.16 cm from the bottom of the tank, centered relative to the walls. The particles have a diameter of $\frac{1}{6} \text{ cm}$ and a density of 1.14 g cm^{-3} . The fluid has a density of 1 g cm^{-3} and a viscosity of 0.001 Pa s , gravity is set to 980 cm s^{-2} . The particle stiffness is set to 100 GPa and a Poisson coefficient of 0.3 . The restitution coefficient

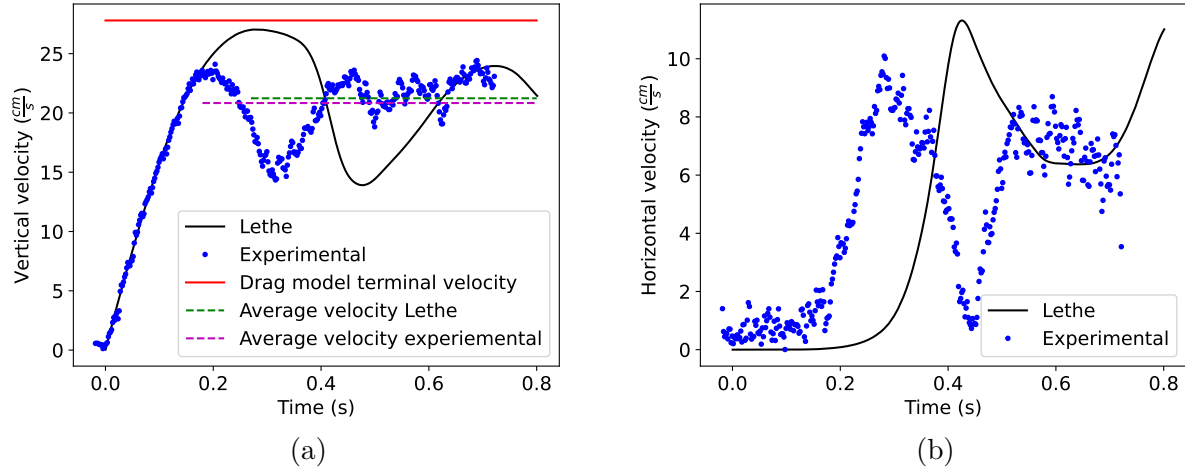


Figure 6.10 Comparison of the vertical (a) and horizontal(b) velocity of the particles observed in the simulation and in the experiments. The average vertical velocity is also compared to the expected terminal velocity using a force balance. The average velocity in the simulation (21.2 cm s^{-1}) and in the experiments (20.8 cm s^{-1}) are calculated after their respective first vortex shedding.

is set to 1, and the friction coefficient is equal to 0 to be consistent with previous simulations found in the literature. We perturbed the position of the particle p0 by $\frac{1}{50}$ of its diameter to accelerate the formation of the instability after the contact of the particles. Figure 6.11 shows a cut view of the initial condition of the particles in the container.

This case uses the BDF2 time-stepping schemes with a time step of $\Delta t = 0.001 \text{ s}$ for all mesh sizes used. The simulation is stopped when one of the particles touches the bottom of the container. We study this case with a refinement zone around the particles defined by a hyper-shell with an inner diameter of $0.5d_p$ and an outer radius of $1.5d_p$ center at the particle's position combined with an adaptive refinement using the Kelly error estimator. We simulate this case using Q2Q1 element with a minimal size of $\frac{1}{128} \text{ cm}$ and Q1Q1 elements of size $\frac{1}{128} \text{ cm}$ and $\frac{1}{256} \text{ cm}$. The results for the vertical velocity are presented in Figure 6.12. In this figure, we see that we have a very good agreement with the previous results produced by Nie *et al.* et Apte *et al.* before the contact [19, 20]. After the contact of the particles at 0.32s, the particle's velocity matches the literature results. The results obtained with the current approach then diverge from the results of the literature due to the chaotic nature of the case. Depending on the discretization used, the time at which the particle p0 passes in the trail of particle p1 changes significantly. Once the particles p0 and p1 have tumbled, the variation of velocity observed is similar to that of the results presented in the literature.

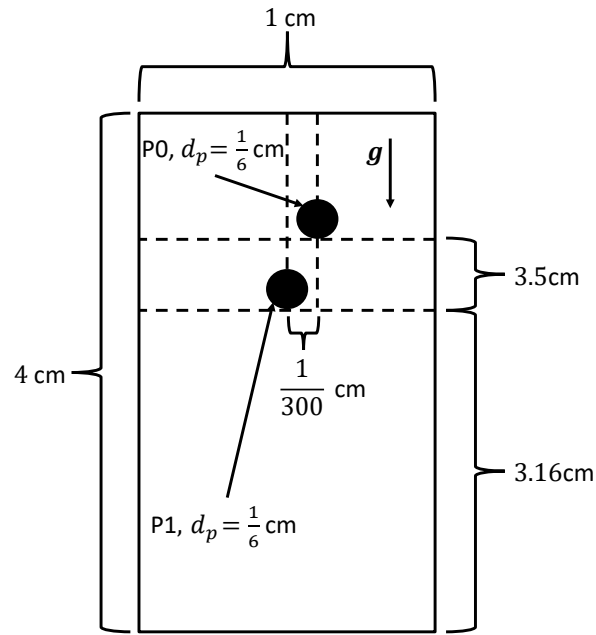


Figure 6.11 Representation of the initial conditions for the contact between two particles. This case is derived from the original work of Glowinski *et al.* [18]. The representation is not to scale to emphasize some dimension.

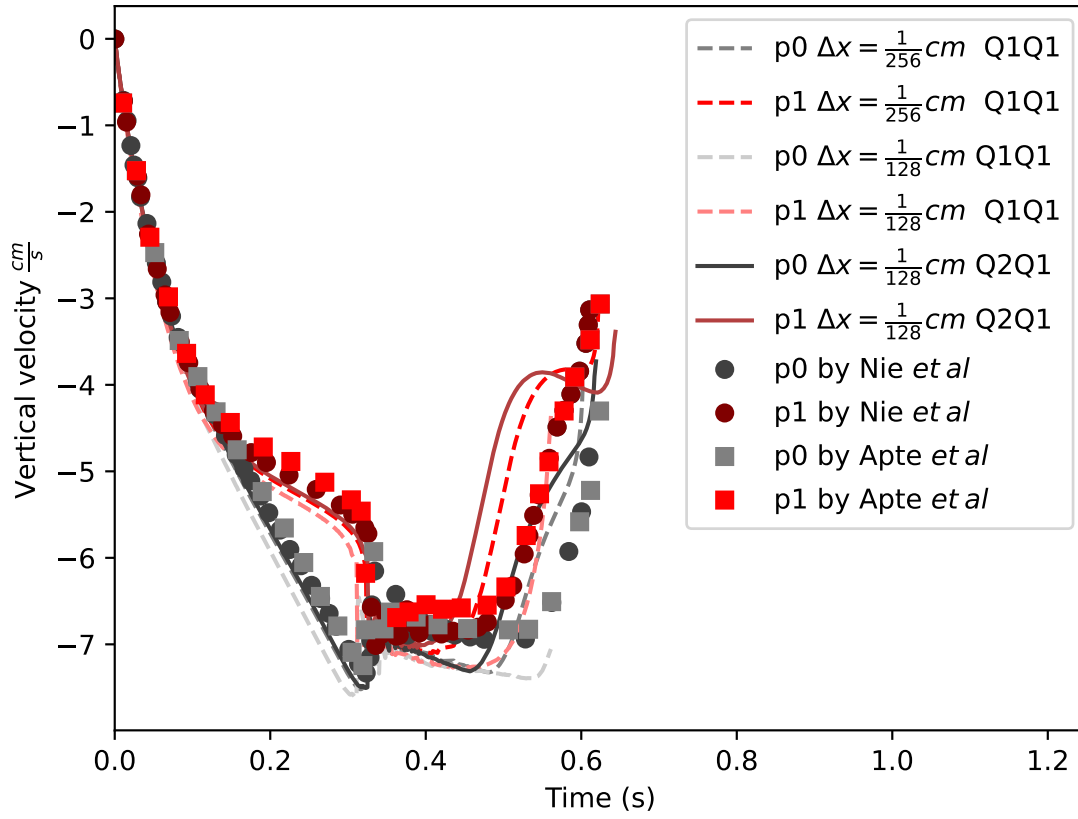


Figure 6.12 Vertical velocity comparison between different simulation results obtained and the results of Nie *et al.* and Apte *et al.* [19,20].

6.5.4 Boycott effect

The Boycott effect is the reduction of sedimentation time of particles [200] in a container by slightly inclining by an angle θ the container such that it is not parallel with gravity. This case makes for a good validation case since it contains multiple particles interacting amongst themselves and with the walls of the geometry. The particles are positioned in a rectangular container with sides $2 \times 2 \times 24\text{cm}$. The center of the block of the particles is positioned 21 cm above the bottom of the container. The particles sediment at different angles ($0, 10, 20^\circ$) relative to gravity, which is set to 981 cm s^{-2} . The fluid has a density of $\rho_f = 1.0\text{ g cm}^{-3}$ and a kinematic viscosity of $\nu = 0.1\text{ cm}^2\text{ s}^{-1}$. Here, we use 64 for particles ($d_p = 0.25\text{ cm}$ and $\rho_p = 1.55\text{ g cm}^{-3}$) structured in a 4 by 4 by 4 square of sides 1.5 cm. The Young modulus of the particles is set to $E = 100\text{ MPa}$ and their Poisson ratio to 0.3. The restitution coefficient is set to 0.9. The three initial conditions used in this case are presented in Figure 6.13.

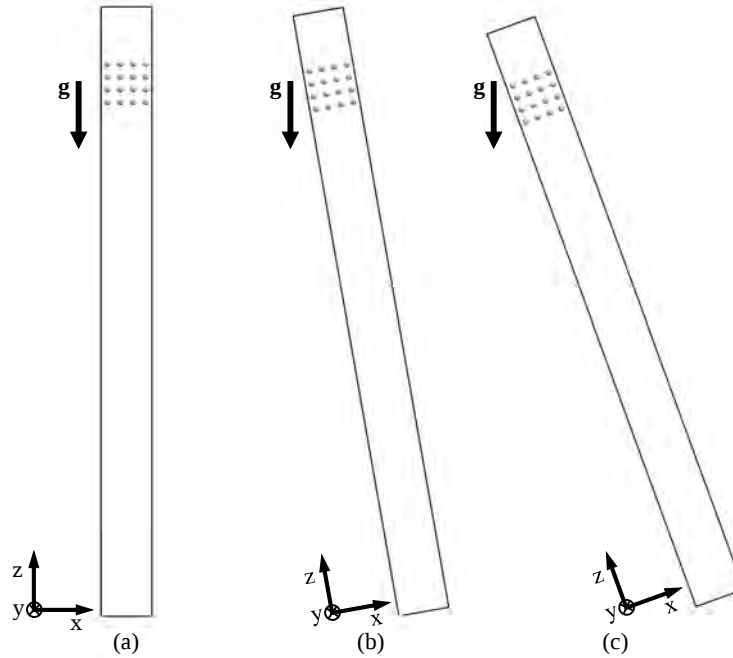


Figure 6.13 Representation of the initial conditions for all inclination angles: (a) $\theta = 0^\circ$, (b) $\theta = 10^\circ$, (c) and $\theta = 20^\circ$. We note that the coordinate system stays in the direction of the container.

The mesh uses $\Delta x = \frac{d_p}{16}$ for Q1Q1 elements. The mesh is adapted using the Kelly error estimator [94] combined with a spherical refinement zone around each particle of $1.5d_p$.

The particle's average velocity toward the bottom of the container (in the $-z$ direction) is shown in Figure 6.14. For reference, the terminal sedimentation velocity of an isolated

particle would be -7.7 cm s^{-1} . From these results, we observe the Boycott effect: with a slight inclination of the container, the sedimentation of the particles toward the bottom of the container is accelerated. This effect is caused by the compaction of the particles on one side of the container, creating an important preferential path for the fluid on the other side. The formation of this preferential path for the fluid then significantly reduces the drag force applied to the particles, allowing them to sediment faster.

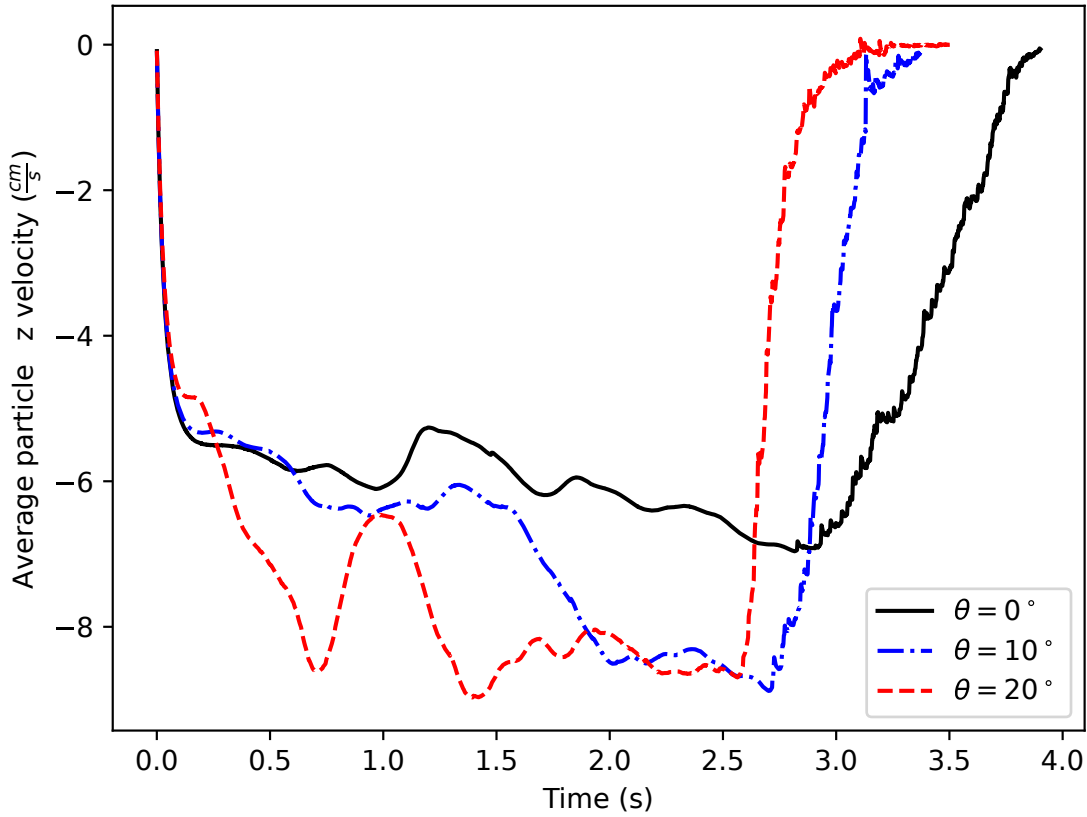


Figure 6.14 Average velocity of the particles in z for the Boycott sedimentation case for all inclination angles. The higher inclination angles increase the sedimentation speed.

To measure how the particles compact on one side of the container, we look at the dispersion of the particles in the x direction, which is calculated using:

$$D_x = \frac{\sum_{i=1}^{n_b} |p_x^i - \bar{p}_x|}{n_p} \quad (6.52)$$

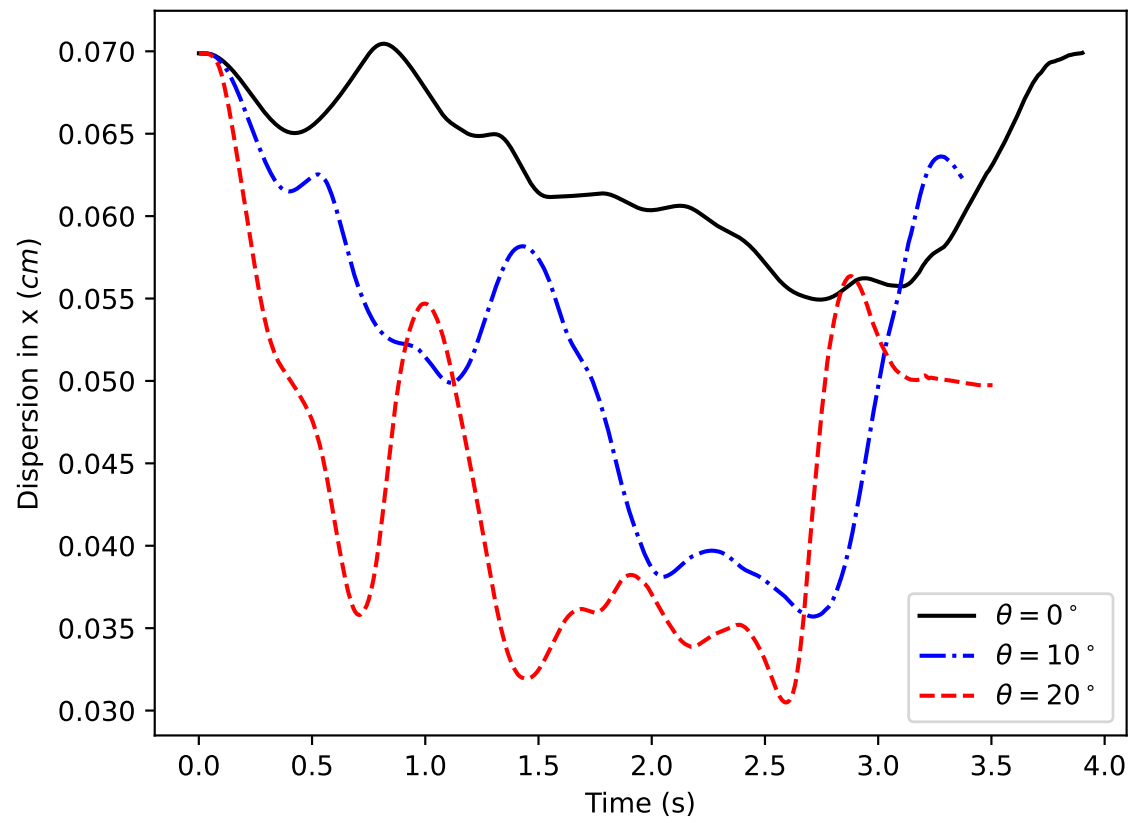


Figure 6.15 Dispersion of the particles in the x direction. The lower the dispersion, the more compact the particles are.

In Equation (6.52) p_x^i is the position in the x coordinates of the i particle, $\bar{p}_x$ is the average x coordinates of all the particles, n_b is the number of particles. Using this equation, we get the results presented in Figure 6.15. As we can see in this figure, the larger the inclination angle, the more the particles compact in the x direction under the effect of gravity, and this generates a more pronounced Boycott effect. We look at the correlation between these two variables to analyze the link between the dispersion in x and the bulk velocity in z of the particles. Figure 6.16 presents the average velocity in z as a function of the dispersion in x of the particles. In this figure, we removed the data from the first 0.2 seconds of the simulation, where the gravitational acceleration controls the particles' velocity, and the data after the first particles touch the bottom of the container. All the data regroups around one line with a strong linear correlation ($R^2 = 0.90$) regardless of the inclination angle.

Based on the results of this case, it is possible to conclude that the approach described herein is able to simulate the interaction of multiple particles and the interaction between particles and walls appropriately. The large number of contacts between particles and between particles and the walls inherent to the case demonstrates the robustness of the implicit approach we have developed.

6.6 Conclusion

In the present work, we introduce a new high-order resolved CFD-DEM solver in the context of the continuous Galerkin finite element method. The particles are modeled using the sharp interface immersed boundary method and the Navier-Stokes equations are solved using a PSPG/SUPG. The approach presented herein is implemented in the open-source software Lethe. We verify the properties of the solver using a novel manufactured solution for moving boundaries and demonstrate that the solver can reach high-order of convergence. This verification test case demonstrates that the high-order solver is more computationally efficient in cases when accuracy is required. We validate the capacity of the solver to resolve a particle motion accurately at a low Reynolds number (32) and a higher Reynolds number (2500). We then demonstrate the stability of the scheme in cases where contacts between particles are important in the system's dynamic. Finally, we use this new solver to simulate the Boycott effect using cases where multiple particles (64) interact simultaneously with each other and with the domain's boundaries. These cases demonstrate that the new scheme proposed in the current work is a robust tool applicable to a large range of particle density to fluid density ratio and Reynolds numbers. The approach presented in this work has many applications in fluid mechanics, particularly in cases where the dynamics of rigid objects are influenced by their interaction with the fluid. Studying the fluid force interaction of particles in motion

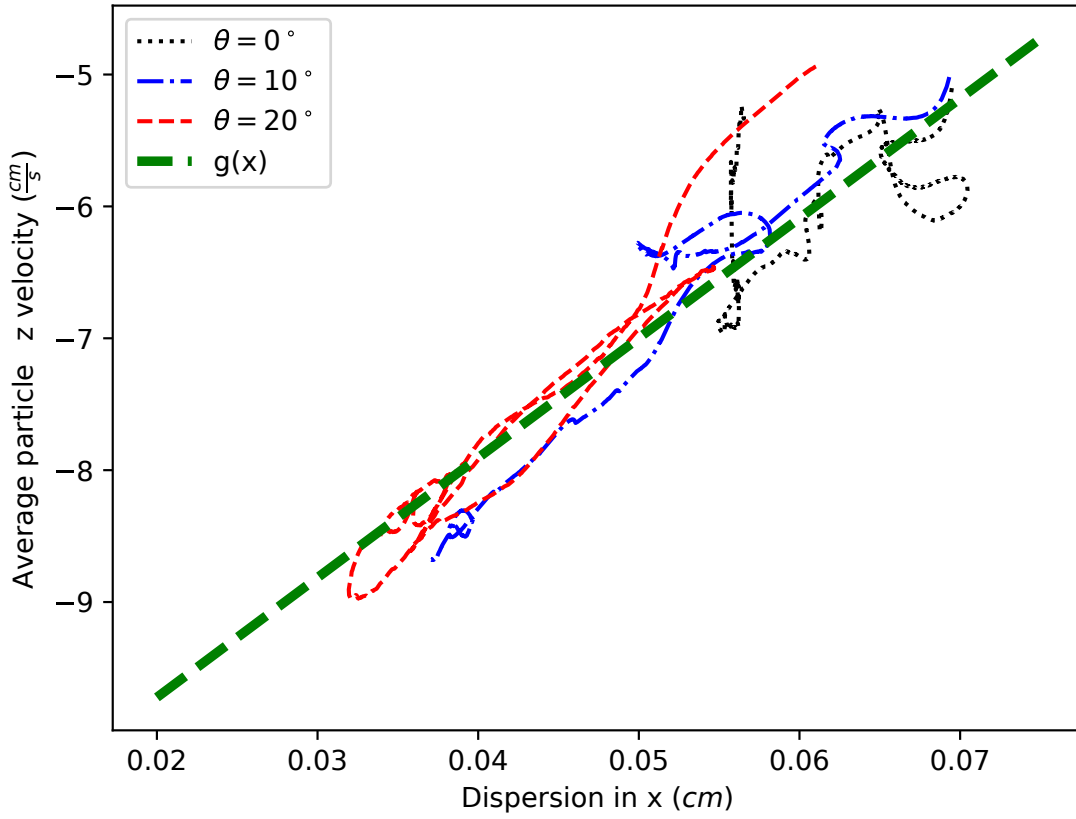


Figure 6.16 Average velocity of the 64 particles in the z direction as a function of the dispersion in x of the particles. Regardless of the inclination angle and approach used for the simulation, all results are regrouped around the regression line $g(x) = 94.2x - 11.8\text{cm s}^{-1}$ with $R^2 = 0.90$.

will be the main topic of future work using this approach.

6.7 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) through the RGPIN-2020-04510 Discovery grant. In particular, Lucka Barbeau would like to acknowledge an NSERC CREATE Simulation-Based Engineering Science (SBES) scholarship. The authors would also like to acknowledge the technical support and computing time provided by the Digital Research Alliance of Canada.

6.8 Discussion

Cette publication présente le premier solveur de type CFD-DEM résolu de manière implicite et à l'ordre élevé, basé sur la méthode de condition immergée développée lors de la réalisation du thème 1, présentée au Chapitre 5. Ce travail illustre également les avantages des schémas d'ordre élevé dans ce contexte de modélisation en détaillant la réduction du coût de calcul nécessaire pour obtenir une précision donnée. Pour compléter le travail présenté dans cet article, cette section présente un cas de validation de ce solveur pour un cas avec un fluide non newtonien, réalisé indépendamment de notre groupe de recherche. Par la suite, cette section présente une alternative à l'algorithme de couplage de l'article, et discute d'une limitation du schéma de modélisation.

6.8.1 Complément de validation

Ce solveur a été validé indépendamment de notre groupe de recherche par Fazli *et al.* [21]. Dans leur étude, ils ont validé la vitesse terminale de sédimentation des particules obtenues avec ce solveur pour des cas impliquant des fluides non newtoniens de type Herschel-Bulkley [28]. Une partie de leur validation est illustrée à la Figure 6.17. Ces résultats confirment l'applicabilité de l'approche CFD-DEM résolue présentée dans cet article aux fluides non newtoniens.

6.8.2 Alternatives pour le couplage des particules avec le fluide

Le couplage des particules est réalisé en utilisant les équations (6.26) à (6.29). Ces équations sont appliquées à une seule particule à la fois. Toutefois, lorsque la dynamique de deux particules est fortement couplée, cette approche par particule peut être lente à converger.

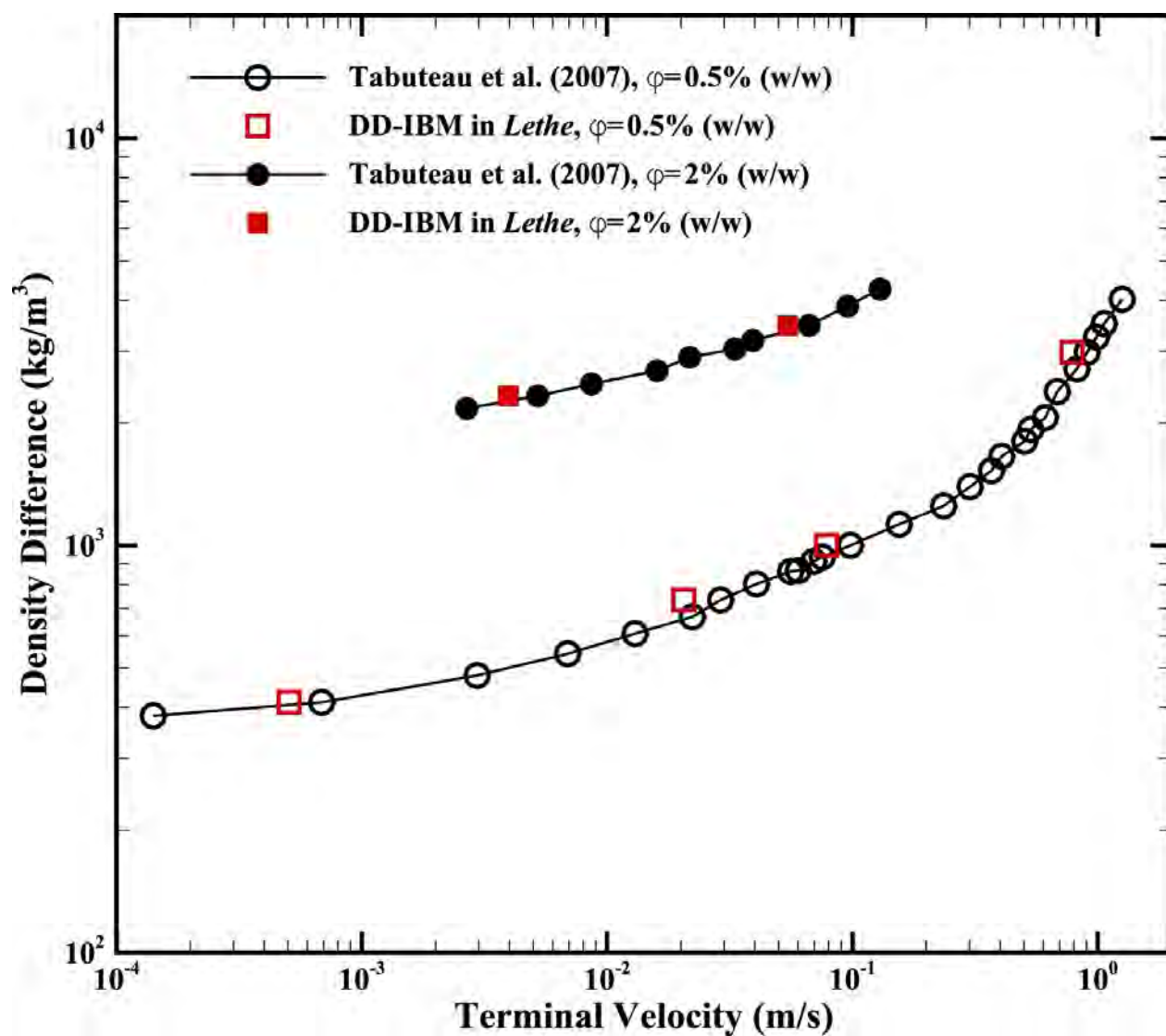


Figure 6.17 Validation de la vitesse terminale de sédimentation d'une particule dans un fluide de type Herschel-Bulkley par Fazli *et al.* [21]. Cette validation utilise le solveur présenté dans les Chapitres 5 et 6.

Alternativement, l'ajustement des vitesses des particules pourrait être réalisé à partir du vecteur résiduel $\mathbf{R}_n$ et $\mathbf{v}_n^{t+\Delta t}$, qui regrouperait respectivement les vecteurs résidus ($\mathbf{R}_n^{v_i}$) et les vecteurs vitesse ($\mathbf{v}_{i_n}^{t+\Delta t}$) de l'ensemble des particules.

$$\mathbf{R}_n = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_n^{v_1} \\ \mathbf{R}_n^{v_2} \\ \vdots \\ \mathbf{R}_n^{v_{n_b}} \end{bmatrix} \quad (6.53)$$

$$\mathbf{v}_n^{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^{t+\Delta t} \\ \mathbf{v}_2^{t+\Delta t} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{n_b}^{t+\Delta t} \end{bmatrix} \quad (6.54)$$

En utilisant la même méthode de point fixe accéléré pour les vecteurs $\mathbf{R}_n$ et $\mathbf{v}_n^{t+\Delta t}$ avec l'Équation (6.28) on retrouverait l'équation:

$$\mathbf{v}_{n+1}^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_n^{t+\Delta t} - \alpha^{v_i} \mathbf{R}_n \quad (6.55)$$

Le même principe s'appliquerait pour l'équation de la vitesse angulaire des particules. Cette approche de couplage pourrait aider à résoudre des cas où la dynamique des particules est fortement couplée. À titre d'exemple, le cas d'une petite particule à faible densité se trouvant à côté d'une particule significativement plus importante verrait sa dynamique contrôlée principalement par la dynamique de la grosse particule. Cette approche serait potentiellement bénéfique comparativement à l'approche actuellement implémentée pour résoudre ce type de cas.

6.8.3 Limitations

Une limitation supplémentaire aux limitations discutées dans cet article est l'erreur commise par la combinaison du modèle de lubrification avec la force évaluée dans la CFD. L'approche utilisée, basée sur les travaux de Hori *et al.* [188], consiste à combiner la force de la CFD avec celle du modèle de lubrification, en supposant que la CFD a capturé la totalité de la

force de lubrification jusqu'au point où le modèle de lubrification est activé (voir Section 6.3.1). Cette méthode semble fournir de bons résultats dans la validation réalisée par Hori *et al.* [188]. Cependant, cette approche ne garantit pas la capture de la contrainte du fluide à la surface des particules qui n'est pas résolue en raison de la proximité des particules. En effet, la zone de fluide non résolue entre les deux particules change au fur et à mesure que celles-ci se rapprochent, et l'évaluation de la force sur les surfaces où le fluide est encore résolu évolue également avec la proximité des particules. Par conséquent, une erreur inhérente à l'utilisation de ce modèle de lubrification existe.

CHAPITRE 7 ARTICLE 3: ARTICLE 3: SOLID-FLUID FORCE MODELING: INSIGHTS FROM COMPARING A REDUCED ORDER MODEL FOR A PAIR OF PARTICLES WITH RESOLVED CFD-DEM

Lucka Barbeau, Stéphane Étienne, Cédric Béguin, Bruno Blais

Contribution de Lucka Barbeau: Conceptualisation, Méthodologie, Logiciel, Rédaction - version originale, Validation, Rédaction - révision & édition, Visualisation, Analyse formelle.

Soumis au journal : International Journal of Multiphase Flows, 18 Octobre 2023

7.1 Contexte de l'article

Ce chapitre présente le troisième article de cette thèse, qui porte sur la réalisation du troisième sous-objectif de recherche présenté dans la Section 3.3.3. Cet article développe un modèle de force pour un assemblage de deux particules et l'utilise comme base pour définir un modèle dynamique de l'interaction entre une paire de particules. Les résultats de ce modèle sont comparés à ceux obtenus par la simulation du modèle de type CFD-DEM résolu, réalisée lors de l'atteinte du deuxième objectif de recherche au Chapitre 6. La comparaison entre ces modèles démontre que l'historique des interactions entre les particules peut jouer un rôle non négligeable dans leur dynamique de sédimentation. Comme mentionné dans la Section 3.4, le travail présenté dans cet article s'appuie en partie sur la méthodologie développée dans deux articles auxquels j'ai contribué. Ceux-ci ont été réalisés par mes collègues Valérie Bibeau et Carole-Anne Daunais. Ces articles figurent respectivement dans l'Annexe D et l'Annexe E.

Abstract: Solid-fluid force models are essential to efficiently model multiple industrial apparatuses such as fluidized beds, spouted beds, and slurry transport. They are generally built using strong hypotheses (e.g., fully developed flow and no relative motion between particles) that affect their accuracy. We study the effect of these hypotheses on particle dynamics using the sedimentation of a pair of particles. We develop a new induced drag, lift, and torque model for pairs of particles based on an artificial neural network (ANN) regression. The fluid force model covers a range of Reynolds numbers of 0.1 to 100 and particle centroid distance of up to 9 particle diameters. The ANN model uses 3475 computational fluid dynamics (CFD) simulation results as the training data set. Using this fluid force model, we develop a reduced-order model (ROM), which includes the virtual mass force, Merschersky force, history force, lubrication force, and Magnus force. Using the results of a resolved computational fluid dynamics coupled with a discrete element method (CFD-DEM) model as a reference,

we analyze the discrepancies between the ROM and CFD-DEM results for a series of sedimentation cases that cover particle Archimedes number from 20 to 2930 and particle to fluid density ratio of 1.5 to 1000. The errors primarily stem from particle history interactions not accounted for by the fully developed flow hypothesis. This effect is more pronounced in cases with a lower particle-to-fluid density ratio (such as solid-liquid cases). This work underlines the requirement for more research on these effects to increase the accuracy of solid-fluid force models at for small particle-to-fluid density ratios (1.5).

7.2 Introduction

Solid-fluid force closure models are essential to simulate large-scale systems in feasible computational time. They are required to model fluidized beds, slurry transport spouted beds, and other industrial operations. These operations are commonly simulated using unresolved computational fluid dynamics simulation (CFD) coupled with a discrete element method (DEM) (unresolved CFD-DEM) [100] or using two-fluid models. Within both approaches, solid-fluid force models are required to couple the momentum of the solid and fluid phases. The solid-fluid force models must account for the presence of multiple particles within a compact cluster and the Reynolds number to accurately predict the forces acting on both the particles and the fluid. The presence of other particles is often only statistically considered through the volume fraction occupied by the fluid (void fraction) [41, 201, 202]. Some models also consider the void fraction gradient to consider the spatial arrangement of the particles, which induces lift [106, 107]. In unresolved CFD-DEM, recent models further improve the accuracy of the solid-fluid force by directly considering the disposition of neighboring particles [108, 109]. The fluid interaction between particles is not limited to modification of the solid-fluid force, it also generates torques on the particle that are highly dependant on the particle arrangement [108]. Force models are based on cases where the particles are static relative to each other, and the flow is fully developed. In real systems, particles are in motion relative to each other, and various transient effects generate additional forces and torques that may impact the predictive capacity of the simulation [177, 203].

Even in the relatively simple case of two identical particles, the solid-fluid force applied to one of them is a function of 35 variables and has a dimensionality of three (time, length, mass), which implies, by the Buckingham-Pi theorems, 32 dimensionless numbers. Table 7.1 presents the list of these variables if a pair of particles are moving in a fluid that is motionless away from the particles. Some phenomena associated with these variables lead to force with specific names such as the drag force [29], the virtual mass force [204], the Meshchersky force [68], the history force [62], the lubrication force [79], the Saffman force [53], and the

Magnus force [53]. The effect of the relative position of particles within a pair on the solid-fluid force has been studied extensively [10,22,23,205–207]. The work of [10] gives an extensive characterization of the effect of the relative position on the solid-fluid force applied on a pair of particles at moderate Reynolds numbers (50 - 200). However, their work does not present a closed-form correlation that encompasses their results. For Stokes flow, Faxén introduced a rigorous way to evaluate the forces on a set of particles [208]. Gatignol improved his work by considering the non-uniformity of the flow around the particles [209]. This rigorous approach was recently applied to the dynamics case of two particles by [210]. Outside of Stokes’ flow, dynamic models require the combination of multiple force correlations. Among others, [104] proposed a combination of correlations to generate a solid-fluid force model that is valid outside of the Stokes regime. However, these correlations are built on hypotheses that cannot always be respected if the particles are in motion (e.g., fully developed flow and no relative particles’ motion). The potential consequences of not fully adhering to them in the dynamics of a swarm of particles remain unknown.

This work studies the effect of the fully developed flow hypotheses used to generate the fluid-solid force model using the dynamics of a pair of particles. To do so, we introduce a new correlation based on artificial neural network (ANN) regression to model the drag force, induced lift force, and induced torque on a pair of particles. This correlation takes as input the particles’ relative positions (distance and angle relative to the flow) and the Reynolds number. The correlation covers Reynolds numbers going from 0.1 to 100 and particles’ centroid distances of up to 9 particle diameters. The data set used in the ANN training is created using Lethe, an open-source CFD software [11,16] and following the procedure proposed by [135]. The small error associated with the correlations enables the analysis of the error caused by the model due to transient effects. This correlation is then integrated into a dynamical model (ROM) for the particle position and velocity (both angular and translational), which considers other solid-fluid forces, such as the virtual mass force, history force, lubrication force, etc. This model is validated for the sedimentation of a lone particle. Using this ROM, we assess the predictive capabilities of models that only use these two parameters (Reynolds number and relative particle position) to define the drag and lift forces and the induced torque between particles. Results for the sedimentation of two particles are compared to results obtained using particle-resolved CFD-DEM obtained using Lethe [27]. The sedimentation case covers Archimedes’ number from 20 to 2930 and a particle-to-fluid density ratio of 1.5 to 1000. This analysis demonstrates that the ROM accurately predicts the particles’ dynamics at a high particle-to-fluid density ratio. It also highlights some discrepancies at lower density ratios. These discrepancies in the results are linked to the fully developed flow hypothesis and interaction between the particles during the acceleration

of the fluid. Additionally, the effect of the rotation on the particles' dynamics is measured using resolved CFD-DEM. The rotation is shown to impact the particle dispersion and affect more cases with a high-density ratio and higher Archimedes number. This underlines some limitations in the capacity of fluid-force models to predict the transient behavior of liquid-solid systems.

Variable	Name	SI units	Size	Dimensions
$\mathbf{f}$	Particle 1 solid-fluid force	kg m s^{-2}	3	MLT^{-2}
d_p	Particles diameter	m	1	L
ρ_f	Fluid density	kg m^{-3}	1	ML^{-3}
$\ \mathbf{g}\ $	Gravity norm	m s^{-2}	1	LT^{-2}
μ	Dynamic viscosity	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	1	$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$
$\mathbf{r}$	Particles relative position vector	m	3	L
$\mathbf{v}_1$	Particle 1 velocity	m s^{-1}	3	LT^{-1}
$\mathbf{v}_2$	Particle 2 velocity	m s^{-1}	3	LT^{-1}
$\frac{d\mathbf{v}_1}{dt}$	Particle 1 acceleration	m s^{-2}	3	LT^{-2}
$\frac{d\mathbf{v}_2}{dt}$	Particle 2 acceleration	m s^{-2}	3	LT^{-2}
$\boldsymbol{\omega}_1$	Particle 1 angular velocity	s^{-1}	3	T^{-1}
$\boldsymbol{\omega}_2$	Particle 2 angular velocity	s^{-1}	3	T^{-1}
$\frac{d\boldsymbol{\omega}_1}{dt}$	Particle 1 angular acceleration	s^{-2}	3	T^{-2}
$\frac{d\boldsymbol{\omega}_2}{dt}$	Particle 2 angular acceleration	s^{-2}	3	T^{-2}
t	Time	s	1	T

Table 7.1 Without any hypothesis on the initial conditions, we obtained a system with 35 variables to express the total solid-fluid force on one particle

7.3 ANN regression of particle pair fluid force interactions

There is no correlation to calculate the induced drag, induced lift forces, and induced torque on a particle due to the presence of another particle in its vicinity. Here, an ANN is used to do a regression of a large data set of CFD simulation results for which the drag, lift, and torque acting on a pair of particles are available. The correlation returns the force and torque applied to the particle under the following hypothesis: particles are fixed in an undisturbed flow, the flow is fully developed, the flow has not developed 3-dimensional instability (all interaction happens in the plane defined by $\mathbf{v} \times \mathbf{r}$), there is no buoyancy force, and the particles have zero angular velocity. These hypotheses reduce the 32 dimensionless numbers of Table 7.1 to a system of 4 dimensionless numbers per dependent variable. Table 7.2 presents the three dependent variables, the two components of the force (drag and induced lift) and the induced torque, and the six independent variables. This set of variables leads to the three dependent dimensionless numbers drag, lift, and torque coefficient (Cd , Cl , Ct), which are a function of three independent dimensionless numbers: Re , r^* , and θ . Due to the system's symmetry, θ is defined between $[0, \pi]$.

Variables	Number of components	Dimensions	Associated dimensionless numbers
$\mathbf{f}$	2	MLT^{-2}	$Cd = \frac{-8F_{\parallel v}}{\rho_f d_p^2 \pi \mathbf{v} ^2}, Cl = \frac{8F_{\perp v}}{\rho_f d_p^2 \pi \mathbf{v} ^2}$
$\mathbf{T}$	1	ML^2T^{-2}	$Ct = \frac{16 \mathbf{T} }{\rho_f d_p^3 \pi \mathbf{v} ^2}$
d_p	1	L	repeating variable
ρ_f	1	ML^{-3}	repeating variable
μ	1	$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$	$Re = \frac{ \mathbf{v} d_p \rho_f}{\mu}$
$\mathbf{r}$	2	L	$r^* = \frac{ \mathbf{r} }{d_p}, \theta = \text{acos}\left(\frac{-\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}}{ \mathbf{v} \mathbf{r} }\right)$
$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2$	1	LT^{-1}	repeating variable

Table 7.2 Assuming that particles have the same constant velocity, the flow is fully developed, the flow has not developed 3-dimensional instability (all interaction happens in the plane defined by $\mathbf{v} \times \mathbf{r}$), there is no buoyancy force, and the particle has zero angular velocity the system of Table 7.1 simplified to these nine variables to express the force and torque on a particle.

7.3.1 Creation of the data set

The data set is generated using the sharp interface immersed boundary finite element solver implemented in Lethe [11,16]. Lethe is a high-order CFD simulation tool based on the deal.ii finite element library [131]. The sharp interface immersed boundary enables the imposition of the no-slip boundary condition at the surface of a particle without the need to mesh its surface while keeping the order of accuracy of the underlying finite element scheme. Previous results with the same simulation tool have shown that elements of type Q2-Q1 (quadratic hexahedral element for the velocity field and linear hexahedral element for the pressure field) reduce the computational time needed to obtain accurate (within 1% of accuracy) hydrodynamic force on a particle [27,211]. In the same work, the authors also look at the effect of the domain size on the drag force and recommend that the boundaries are at least 30 particle diameters away from the closest particle. Since two particles are present, a rectangular domain of $180 \times 90 \times 90(d_p)$ is selected. The first particle is centered at (54, 45, 45), and the second particle is moved around this reference particle in a sphere with a radius of nine particle diameter. The domain size guarantees that the closest wall is at least 30 particle diameters away. The data set covers Reynolds $Re \in [0.1, 100]$, $r^* \in [1, 9]$, and $\theta \in [0, \pi]$. The data set is constructed of two parts: the structured sampling parts presented in Table 7.3, and the Latin hypercube sampling part [212]. The structure sampling leads to 2475 data points. The Latin hypercube sampling adds another 1000 data points with logarithmic spacing for Re and r^* . The data set comprises 3475 data points, substantiating its size and guaranteeing the model's independence from specific data set characteristics.

Variables	Sampled value
r^*	$1 + 2^n \forall n \in \{-\infty, -4, -3, -2.5, -2, -1.5, -1, -0.5, 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3\}$
Re	0.1, 1, 54, 10, 100
θ	$\frac{n}{32\pi} \forall n \in [0, 32] \mid n \in \mathbb{N}$

Table 7.3 Structured sampling of the three independent dimensionless numbers used to analyze the modification of the solid-fluid force as a function of the Reynolds number and the relative particle position. All combinations of these three variables are sampled for a total of 2475 data points.

The mesh comprises a coarse grid with an element size of $3.75d_p$. This coarse grid has two initial refinement zones around the particles. First, a rectangular refinement box envelops the particles with a maximal element size of $\Delta x = 0.1172d_p$ (zone Z1), followed by a spherical zone around each of the particles where the mesh is refined to the minimum element size enabled (zone Z2). Figure 7.1 presents a sectional view of the domain on the particle plane. It shows the different refinement zones (Z1 and Z2) around the particles and their dimensions. Additionally, 10% of the mesh is refined using the Kelly error estimator based on the velocity field to refine the recirculation zone in the wake of the particles [94]. This additional refinement procedure is repeated four times.

Cases with the two particles side by side at a Reynolds number of 100 are used for the mesh convergence analysis. Two cases are studied: particles in contact ($r^* = 1$) and particles separated by $\frac{1}{10}$ of the particle diameter ($r^* = 1.1$). The convergence of these cases was found to be representative of similar cases with a different angle between the particles and the flow direction. Figure 7.2 shows the relative convergence obtained for all three dependent dimensionless numbers based on the smallest element of the mesh. The mesh with a discretization size of $\Delta x = \frac{15}{512}d_p$ gives adequate results that are within 1% of the results obtained using the smallest mesh. As such, it is the one selected for the simulations.

7.3.2 Definition of the ANN training parameters

An ANN is trained for each dependent dimensionless number (Cd, Cl, Ct) using the procedure described by [135]. The ANN is based on the TensorFlow library [134]. The optimizer used is Adamax [213], and the network's initialization is done using the Glorot uniform distribution [214]. The cost function used is the mean squared error. Before training the ANN, the data set is normalized relative to Cd_0 to avoid issues with different coefficient scaling at different Reynolds numbers. The resulting coefficient ($\frac{Cd}{Cd_0}, \frac{Cl}{Cd_0}, \frac{Ct}{Cd_0}$) are then scaled between 0 and 1 using a MinMax approach. One network per predicted variable is used, but

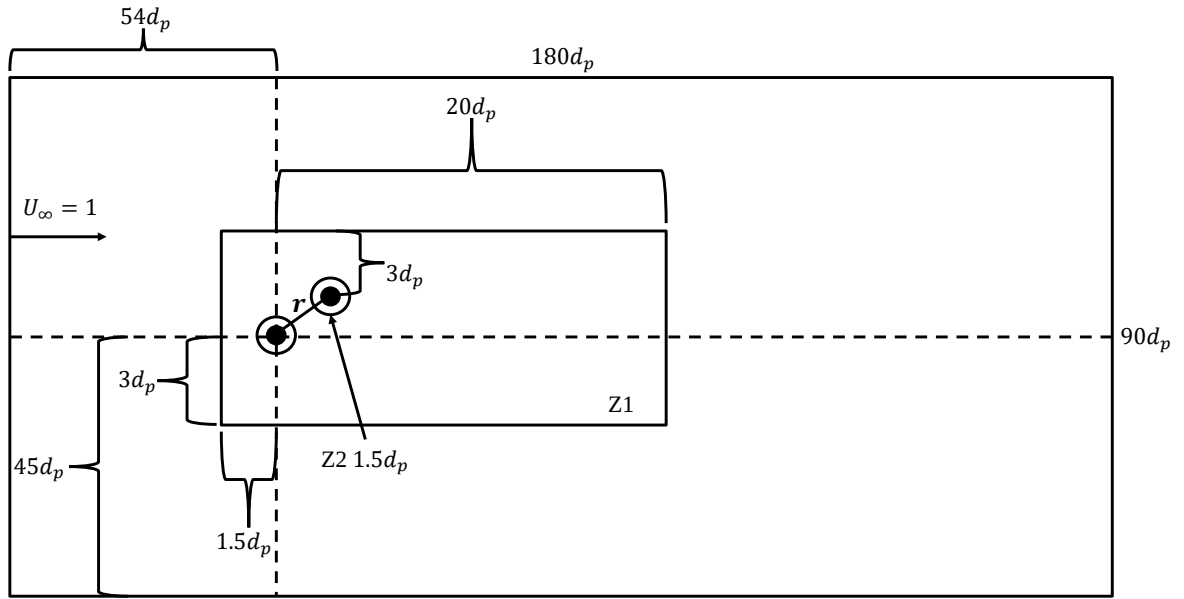
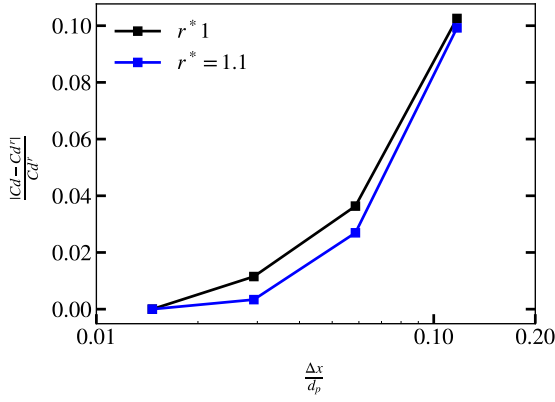
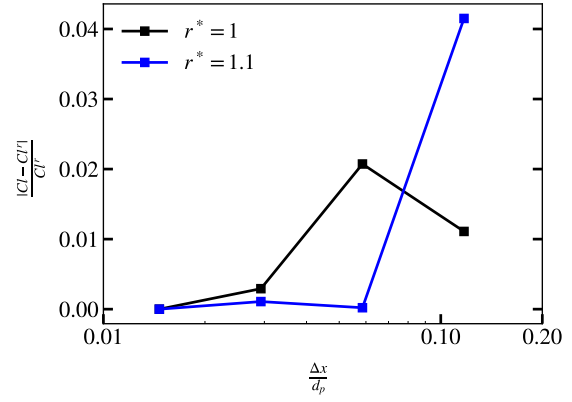


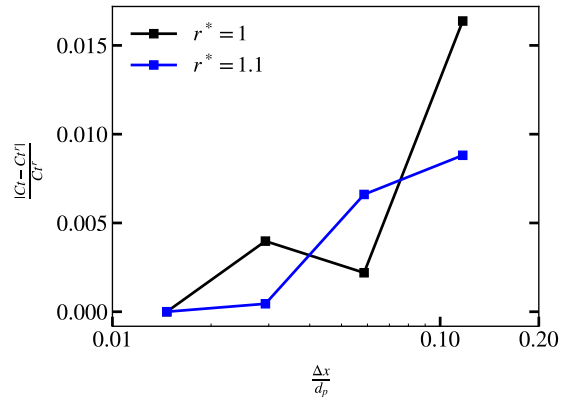
Figure 7.1 Representation of the simulation domain and the two refinement zones (Z1 and Z2) around the particles. The refinement zone Z1 guarantees a minimal element size of $0.1172d_p$, and the refinement zone Z2 guarantees the minimal element size allowed.



(a)



(b)



(c)

Figure 7.2 Mesh sensitivity analysis of the relative error on Cd, Cl, and Ct. The variables reported with r are evaluated at the smallest ($\frac{\Delta x}{d_p} = \frac{15}{1024}$). The Δx reported is the smallest space discretization in a given discretization.

all of them have the same architecture. An exhaustive grid search with cross-validation is performed to select the optimal number of layers and neurons per layer. The data set described in Section 7.3.1 is split into three: a training data set, a validation data set, and a testing data set. 70% of the data is used in the training and cross-validation process, and 30% is the untrained testing data set. Cross-validation is used to monitor the training of the ANN and ensure that there is no overfitting. This procedure yields an ANN with 75 neurons per layer and six layers using the hyperbolic tangent as the activation function, which is trained for 30,000 epochs. The network is then trained again without cross-validation to obtain the final correlation for each dimensionless number.

7.3.3 ANN validation

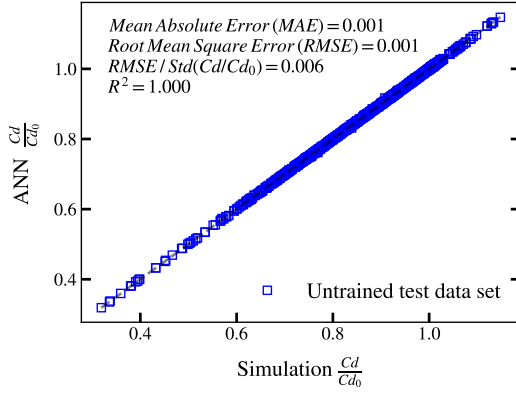
To validate the ANN correlation, the results of the ANN for the testing data set are plotted against the simulation results in Figure 7.3. All ANN predictions agree with the simulation results ($R^2 > 0.999$), and the relative root error mean square error on the test data set is under 2% for all three correlations obtained. These results are sufficiently accurate to use in the ROM.

7.3.4 Validation of the model

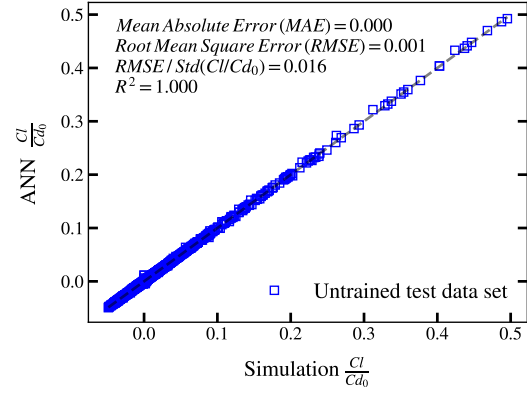
The simulation results and ANN correlation are compared to various results found in the literature. The results shown are normalized by the drag coefficient of a lone particle (Cd_0) for consistency with results found in the literature. Cd_0 is defined by the correlation of [29]:

$$Cd_0 = \begin{cases} \frac{24}{Re} \left(1 + 0.1315Re^{0.82-0.05\log_{10}(Re)} \right), & \text{if } Re \leq 20 \\ \frac{24}{Re} \left(1 + 0.1935Re^{0.6305} \right), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7.1)$$

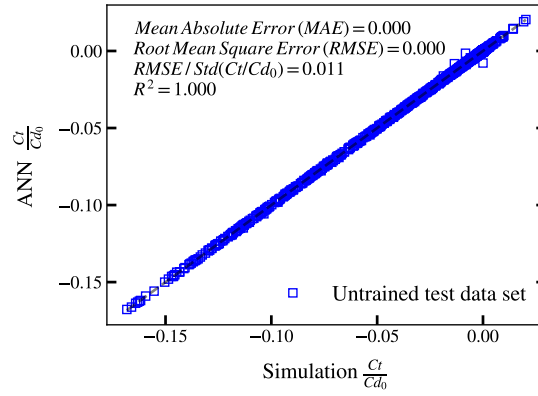
This normalization process also conserves the scale of the dimensionless numbers ($\frac{Cd}{Cd_0}, \frac{Cl}{Cd_0}, \frac{Ct}{Cd_0}$) between different Reynolds numbers. The results of Figure 7.4 show a good agreement with the results found in the literature for the drag coefficient [10, 22–26]. The same is true for the lift coefficient with the results of [10] shown in Figure 7.5. These results are considered sufficiently good to be used for a solid-fluid force model.



(a)



(b)



(c)

Figure 7.3 Parity plot of the Cd , Cl , and Ct ANN correlations with the testing data set (30% of the data set) and the untrained data at Reynolds 54. All three correlations agree well with the simulation results ($R^2 > 0.999$).

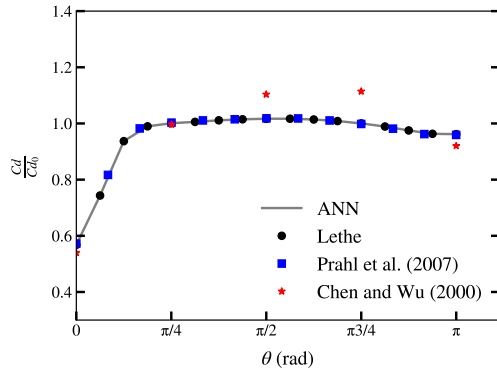
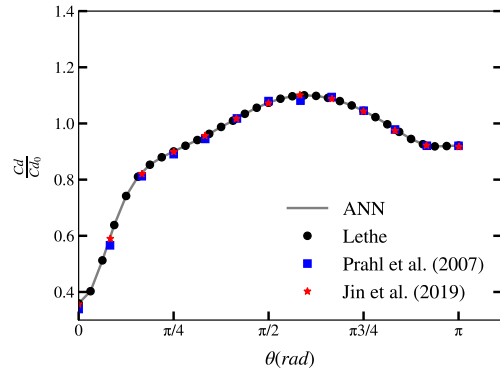
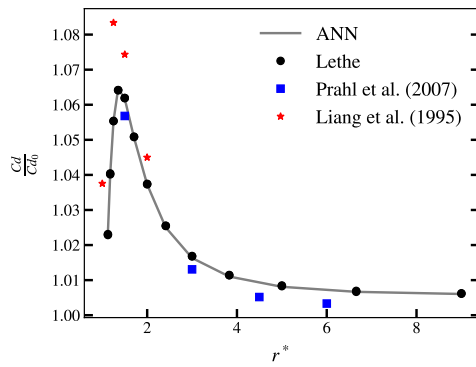
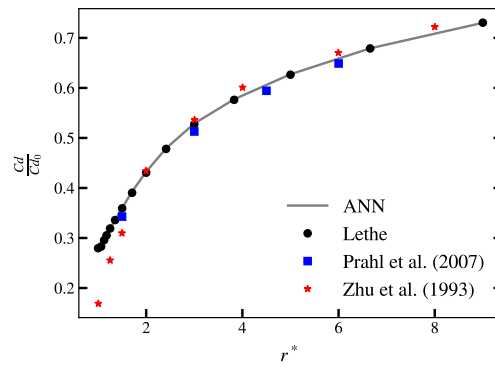
(a) $\text{Re} = 54$ and $r^* = 3$ (b) $\text{Re} = 100$ and $r^* = 1.5$ (c) $\text{Re} = 54$ and $\theta = \frac{\pi}{2}$ (d) $\text{Re} = 100$ and $\theta = 0$

Figure 7.4 Comparison of results obtained for the modification of the drag coefficient with various results in the literature [10, 22–26].

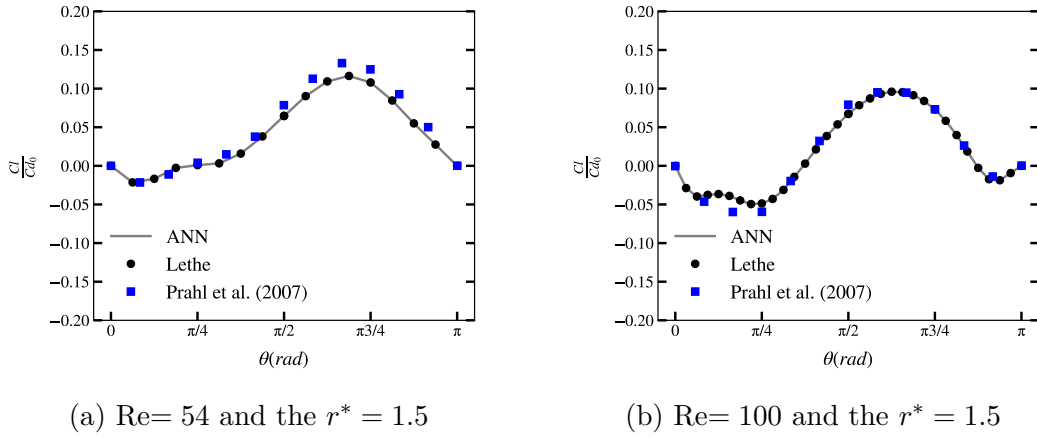


Figure 7.5 Comparison of results obtained for the modification of the lift coefficient with the results of [10].

7.4 Reduced order model

The ROM consists of a set of ordinary differential equations (ODEs). In the sedimentation cases, the undisturbed flow is assumed to be zero. The ROM is based on the work of [104]. It leads to a versatile combination of solid-fluid force models: Drag, Magnus lift, Saffman lift, virtual mass, and the history forces. In their work, the lubrication force was considered by modifying the particle restitution coefficient. These force models are all incorporated in the ROM except for the Saffman force since the undisturbed fluid velocity has zero gradient. To these forces, the ROM also adds the Meshchersky force [68] and considers the lubrication force directly. The induced lift is added using the ANN model described in Section 7.3. For the angular velocity, the ROM considers the inter-particle induced torque defined in Section 7.3 and the viscous torque. In addition, the ROM also considers the particle-particle contact force. The contact torque is neglected. The restitution coefficient used for all cases is 1. Table 7.4 presents the list of force and torque models used in the ROM. Appendix B presents the equations for each model used. The ODEs describing the particle dynamics are then given by :

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \left(\sum_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^1 (\mathbf{f}_{ij}^c + \mathbf{f}_{ij}^{lub} + \mathbf{f}_{ij}^d + \mathbf{f}_{ij}^l + \mathbf{f}_{ij}^v + \mathbf{f}_{ij}^m) + \mathbf{f}_i^h + \mathbf{f}_i^{mag} + \mathbf{f}_i^b \right) \quad (7.2)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \frac{1}{I_i} \left(\sum_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^1 (\mathbf{T}_{ij}^I + \mathbf{T}_{ij}^{lub}) + \mathbf{T}_i^v \right) \quad (7.3)$$

Equation (7.3) uses a uniform moment of inertia for the particles, which are considered filled spheres made of a single material. We note the absence of a torque associated with the angular acceleration of the particle. This term would encompass the torque necessary to accelerate the boundary layer of the particle. In the context of Stokes flows, this term is well described by [215]. However, adding the Stokesian term to the ROM significantly increased the model error for moderate Reynolds number ($\text{Re} > 1$), and no correlation was found for this term outside of the Stokes regime. Consequently, it is neglected in the present work.

Each particle may have a different velocity in Equations (7.2) and (7.3). This differs from the hypothesis used to define $\mathbf{f}^d$, $\mathbf{f}^l$, and $\mathbf{T}^I$ (see section 7.3). The same issue is present in solid-fluid force models used in unresolved CFD-DEM. It is usually addressed by assuming that all neighboring particles move with the same velocity as the particle for which the fluid force is evaluated. The same strategy is used in the current ROM, meaning that $\mathbf{f}^d$, $\mathbf{f}^l$, and $\mathbf{T}^I$ applied on particle i are evaluated using the velocity of particle i . The correlation for virtual mass $\mathbf{f}^v$ and Merchersky $\mathbf{f}^m$ forces also consider the presence of the other particle. Both directly consider the particles' relative position and particles' acceleration (see B for more details).

The implementation of the ROM is performed in Python. The scripts and the ANN force model files are available on a public repository [218].

7.4.1 Validation of the reduced order model

The validation of the particle's acceleration and sedimentation velocity in the ROM is established by simulating the sedimentation of a single particle and comparing the results of the ROM with particle-resolved simulations [27]. The cases are modified from the original Ten Cate results by extending the size of the simulation domain and avoiding particle wall interaction at low Reynolds numbers.

This validation case is composed of four sedimentation cases of a single particle ($d_p = 1.5 \text{ cm}$, $\rho_p = 1120 \text{ kg m}^{-3}$) in a rectangular box of $90 \times 90 \times 90 \text{ cm}$. The particle centroid is released 12.75 cm above the bottom of the container and is centered relative to the walls. The velocity and Reynolds number are controlled by changing the properties of the fluid. Table

Forces and Torques	references
Drag $\mathbf{f}^d$	present work
Induced Lift $\mathbf{f}^l$	present work
History $\mathbf{f}^h$	[64]
Virtual Mass $\mathbf{f}^v$	[204]
Meshchersky $\mathbf{f}^m$	[68]
Lubrication $\mathbf{f}^{lub}$	[78, 79]
Magnus $\mathbf{f}^{mag}$	[53]
Buoyancy $\mathbf{f}^b$	-
Contact $\mathbf{f}^c$	[216]
Induced torque $\mathbf{T}^I$	present work
Viscous torque $\mathbf{T}^v$	[217]
Contact torque $\mathbf{T}^c$	[216]

Table 7.4 Fluid force and torque models and the range of applicability of each model

7.5 presents the properties of the fluid for each case.

We use an explicit Euler scheme with a time step of 0.0005 s to integrate the ROM. This time step was found to be sufficiently small to have time step independent results. The results of the validation case are presented in Figure 7.6. These results show a good overall agreement between the ROM and the simulation results. The differences are within the expected range due to the history model used. For more detail on the history of model use and the comparison with other history force models, see [63].

With the adequate sedimentation velocity observed, we found the ROM result satisfactory for these cases and considered the model validated.

Case	Reynolds number	$\rho(\text{kg m}^{-3})$	$\mu(\text{Pa s})$
E1	1.5	970	0.373
E2	4.1	965	0.212
E3	11.6	962	0.113
E4	31.9	960	0.058

Table 7.5 Properties of the fluid for each of the four cases proposed by [1]

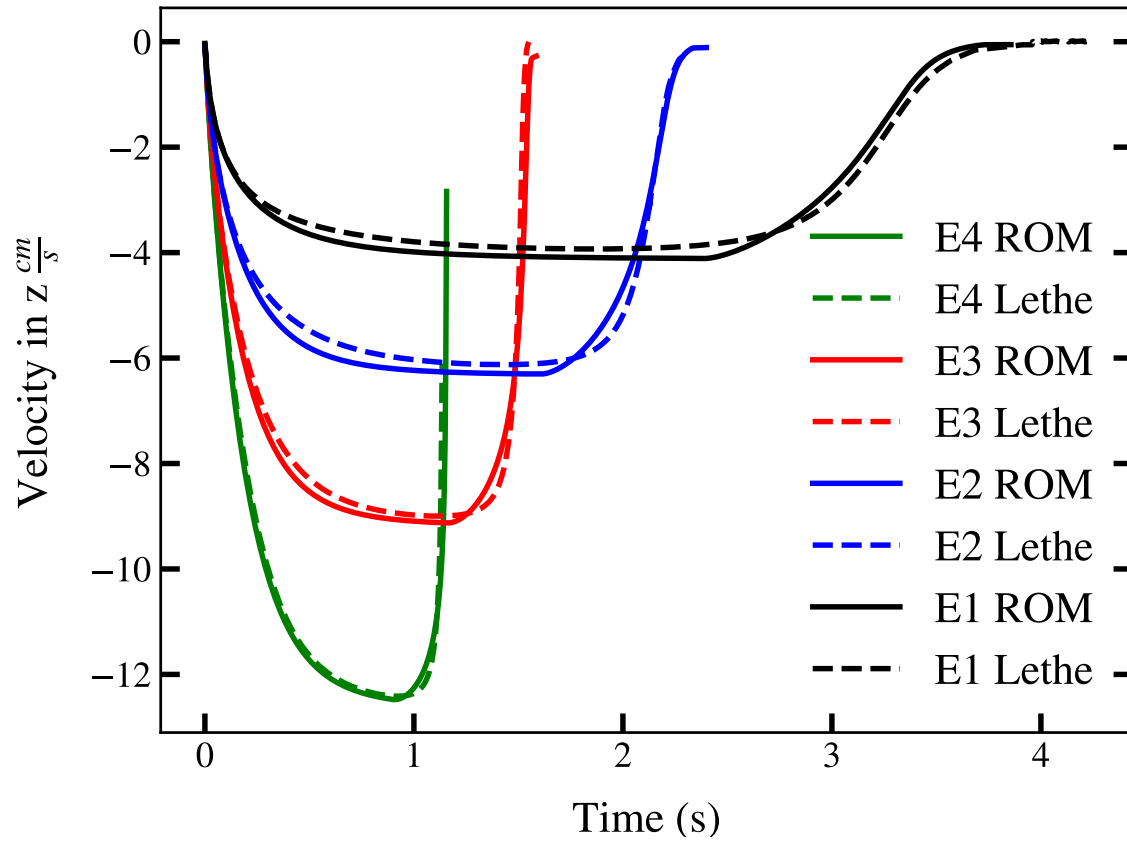


Figure 7.6 ROM validation using the modified validation case for a single particle of [1]. Results are in good agreement with the resolved CFD-DEM results [27].

7.5 Model Analysis

Using the ROM, we analyze the sedimentation of two particles. The set of parameters that define the initial conditions of the pair of particles if both particles are identical and initially at rest is defined by a set of four dimensionless numbers. The dimensionless numbers used are defined in Table 7.6.

The ROM results are analyzed using 12 sedimentation cases described in Table 7.7. The cases comprise two different initial particle dispositions, three Archimedes numbers, and two particle-to-fluid density ratios. The two different initial dispositions of the particles (combination of r^* and θ) leads to 2 distinct behavior. The combination ($r^* = 1.5$, $\theta = \frac{\pi}{2}$) leads to strong repulsion of the particles until they are far enough from each other, at which point the interaction between the particles is negligible. The combination ($r^* = 2.06$, $\theta = 0.245$) leads to drafting, kissing, and tumbling (DKT) interaction. The Archimedes (Ar) number selected (20, 319, 2930) corresponds to terminal Reynolds numbers for a lone particle of (1, 10, 50). The two different ρ^* (1.5 and 1000) correspond to cases that could be assimilated as solid-liquid and solid-gas interactions. The relative position of the particles in the Cartesian frame is presented in Figure 7.7. All interactions occur in the Y-Z plane for the cases considered since these cases do not generate 3-dimensional instability. The typical trajectory of the particles in the Y-Z plane for both initial dispositions of the particles is presented in Figure 7.8.

The simulations of these cases in the resolved CFD-DEM module of Lethe are all performed using Q2-Q1 elements and a backward differentiation formula of order 2 (BDF2) for the time stepping scheme. The walls of the domain are $90d_p$ wide, and the particle P_0 is centered relative to the walls (this configuration is similar to the configuration used for the ANN

Variables	Number of components	Dimensions	Associated dimensionless numbers
d_p	1	L	repeating variable
ρ_f	1	ML^{-3}	repeating variable
ρ_p	1	ML^{-3}	$\rho^* = \frac{\rho_p}{\rho_f}$
μ	1	$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$	repeating variable
$\mathbf{r}_{01}$	2	L	$r^* = \frac{\ \mathbf{r}\ }{d_p}$, $\theta = \text{acos}\left(\frac{-\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}{\ \mathbf{g}\ \ \mathbf{r}\ }\right)$
$\ \mathbf{g}\ $	1	m s^{-2}	$\text{Ar} = \frac{\ \mathbf{g}\ d_p^3\rho_f(\rho_p-\rho_f)}{\mu^2}$

Table 7.6 The initial condition for the sedimentation of two particles is defined by a set of 4 dimensionless numbers assuming that the particles are initially at rest and identical. The vector $\mathbf{r}_{01}$ is the relative position vector going from particle P_0 center to particle P_1 center.

Case	r^*	θ	Ar	ρ^*
1	1.5	$\frac{\pi}{2}$	20	1.5
2	1.5	$\frac{\pi}{2}$	319	1.5
3	1.5	$\frac{\pi}{2}$	2930	1.5
4	1.5	$\frac{\pi}{2}$	20	1000
5	1.5	$\frac{\pi}{2}$	319	1000
6	1.5	$\frac{\pi}{2}$	2930	1000
7	2.06	0.245	20	1.5
8	2.06	0.245	319	1.5
9	2.06	0.245	2930	1.5
10	2.06	0.245	20	1000
11	2.06	0.245	319	1000
12	2.06	0.245	2930	1000

Table 7.7 The 12 sedimentation cases used to characterize the predictive capability of the ROM.

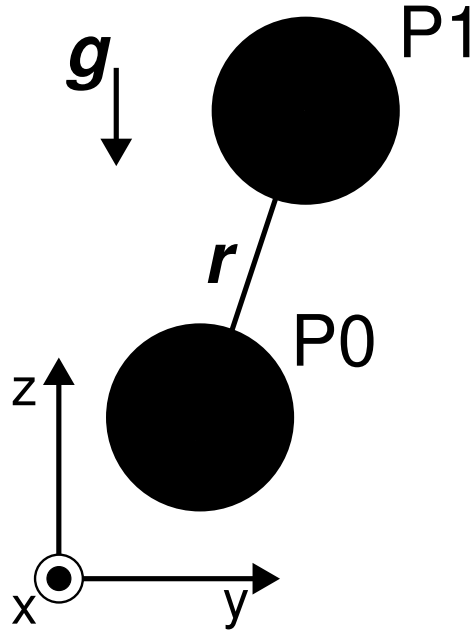
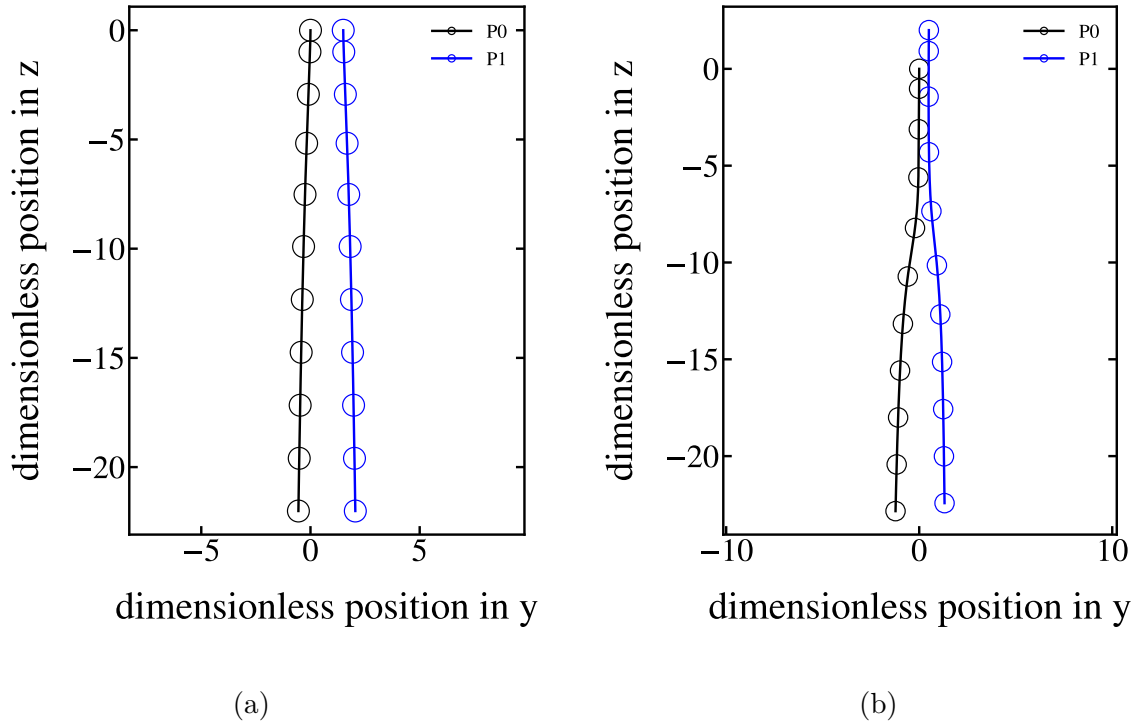


Figure 7.7 Standard disposition of the particles pair in a Cartesian frame of reference.



nn

Figure 7.8 Typical trajectory for both initial dispositions of the particles; (a) $r^* = 1.5$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ and (b) $r^* = 2.06$, $\theta = 0.245$).

database creation; see Figure 7.1). The depth of the domain is varied depending on the case to be deep enough to observe the particles' interaction before they touch the bottom of the container. A refinement zone in the shape of a shell with an outer diameter of $1.4d_p$ and an inner diameter of $0.7d_p$ around each particle is maintained to the minimum mesh size. The minimum mesh size is the same used for the creation of the ANN database ($\Delta x = \frac{15}{512}dp$) since the cases lead to similar Reynolds numbers. The rest of the domain is refined using the Kelly error estimator. The time steps (Δt) are chosen in order to have the particle velocity vary by less than 1% when the time step is divided by two.

The analysis is performed using dimensionless variables. The dimensionless variables are for time (t'), for the velocity components (v'_x, v'_y, v'_z) and angular velocity components $\omega'_x, \omega'_y, \omega'_z$. The reference dimension for the length is l_r , for the time, it is t_r , and for the mass, it is m_r . These reference dimensions are defined as follows.

$$l_r = d_p \quad (7.4)$$

$$t_r = \sqrt{\frac{d_p}{||\mathbf{g}||}} \quad (7.5)$$

$$m_r = \frac{d_p^3}{6}\pi\rho_p \quad (7.6)$$

7.5.1 ROM and resolved CFD-DEM comparison

The results of the ROM for each of the 12 sedimentation cases are analyzed by comparing the velocity components of both particles to the results of the resolved CFD-DEM simulations. To analyze the results of the ROM for each of the 12 sedimentation cases, we compare the velocity components of both particles with the results of the resolved CFD-DEM simulation. The vertical, horizontal, and angular velocities are compared in Figure 7.9, 7.10 and 7.11 respectively.

The vertical velocity (in the z direction) results of the ROM simulations mostly agree with the results of the resolved CFD-DEM simulation. The agreement is almost perfect for all cases with $\rho^* = 1000$. However, for all cases with $\rho^* = 1.5$, the acceleration of the particles is higher in the ROM. This is more significant for lower Archimedes numbers (Cases 1 and 7). In Cases 7 to 9, the discrepancy in the acceleration of the trailing particle (P_1) is more important than what is observed for particle P_0 (e.g., Case 9).

The horizontal velocity (in the y direction) results of the ROM have a significant discrepancy with resolved CFD-DEM simulation in the cases with $\rho^* = 1.5$. However, the results for the

cases $\rho^* = 1000$ are generally good. In Cases 1 to 3, the horizontal acceleration occurs as soon as the particles are released, which is not true for the resolved CFD-DEM results. As the particles get further apart, the results of the ROM fall in agreement with the results of the resolved CFD-DEM. In Case 1, a notable shift in the horizontal acceleration of the particle is observed when the particles reach the threshold for the lubrication force. In Cases 3 and 9, the horizontal attraction of the particle in the initial acceleration phase of the resolved CFD-DEM simulation is not present in the ROM model. Case 9 shows the most discrepancy between the ROM results and the resolved CFD-DEM simulation. In this case, the kissing phase of the DKT interaction happens sooner, and the resulting horizontal velocity of the particle is much smaller. Small discrepancies are observed for cases with $\rho^* = 1000$, with the largest relative discrepancy being observed in Case 6. However, for these cases, the dynamic of the interaction between the particles is captured by the ROM. Notably, the DKT interactions of Cases 11 and 12, where the particles contact each other, agree very well with the resolved CFD-DEM simulations.

Similar to the horizontal velocity, the angular velocity results of the ROM model have a significant discrepancy with the resolved CFD-DEM for cases with $\rho^* = 1.5$. Angular acceleration in the ROM occurs before the resolved CFD-DEM simulations. For cases with $\rho^* = 1000$, Case 6 presents the largest angular velocity discrepancy. In this case, the angular velocity of the ROM dissipates at a lower rate than in the resolved CFD-DEM simulation.

The norm of the relative velocity of the particle relative to their sedimentation velocity in the DKT cases (Cases 7 to 12) is significantly higher when $\rho^* = 1.5$ (up to 20%) than when $\rho^* = 1000$ (up to 5%). The discrepancy in the horizontal velocity corresponds to a similar discrepancy in the angular velocity of the particles.

These observations indicate that the modification of the drag force induced by the other particle, the onset of the lift forces, and induced torque occur too soon in the ROM for cases with $\rho^* = 1.5$. Based on the resolved CFD-DEM results, in cases with $\rho^* = 1.5$, the wake behind the particles establishes itself in a time scale similar to the time it takes for the particle to reach its terminal velocity. However, the wake behind the particle in cases with $\rho^* = 1000$ establishes itself much faster than the time needed for the particles to reach their terminal velocity. Since the forces induced between the particles are modeled using a fully developed flow hypothesis, cases with $\rho^* = 1.5$ have a significantly higher error in the acceleration phase since the wake of the particle is not yet established. However, the fully developed flow hypothesis can accurately model cases with $\rho^* = 1000$. The fully developed flow hypothesis for the force models is equivalent to considering an instantaneous fluid flow response time. As such, when the characteristic fluid response time t_f is smaller than the

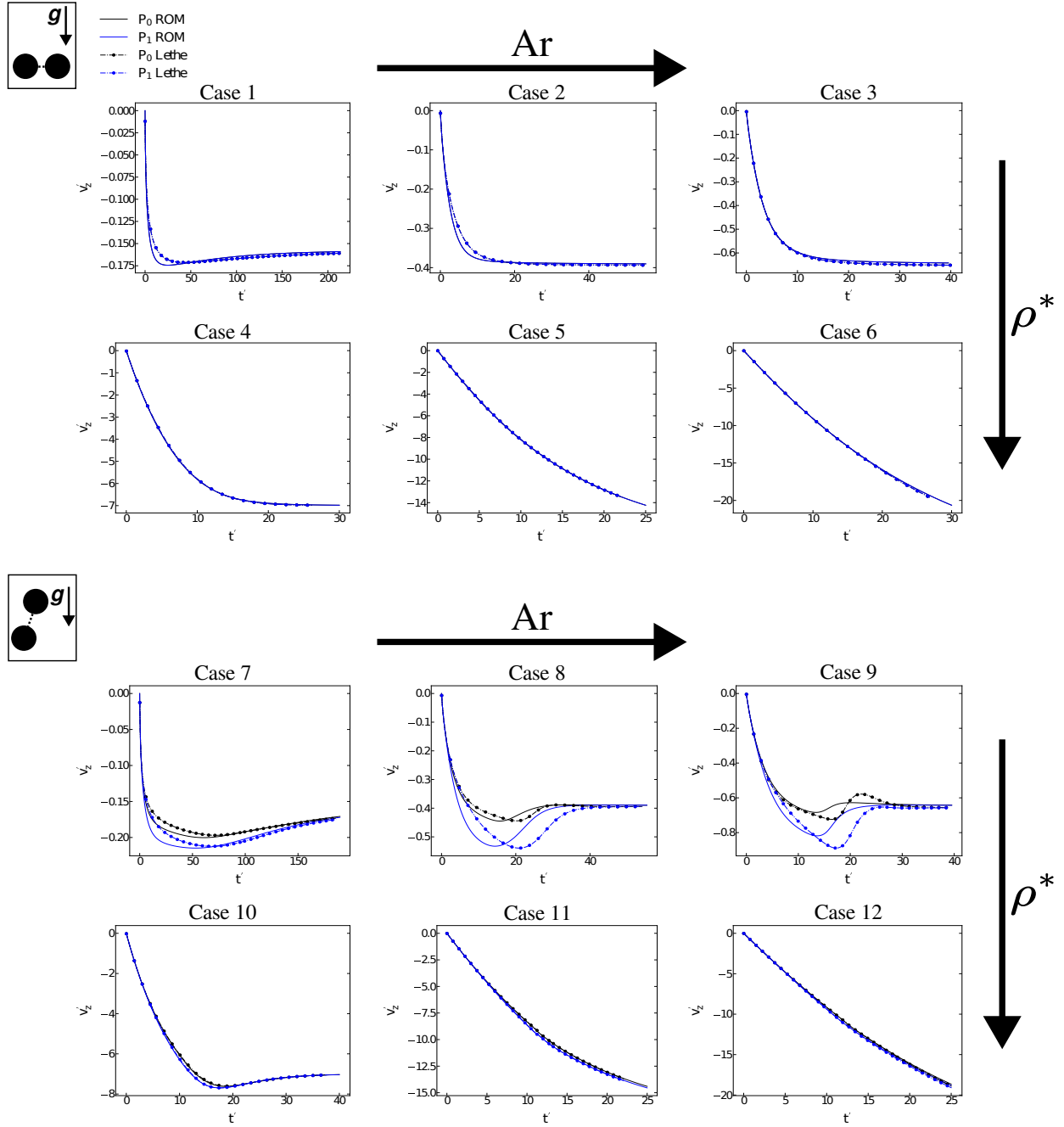


Figure 7.9 Comparison of the vertical velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.

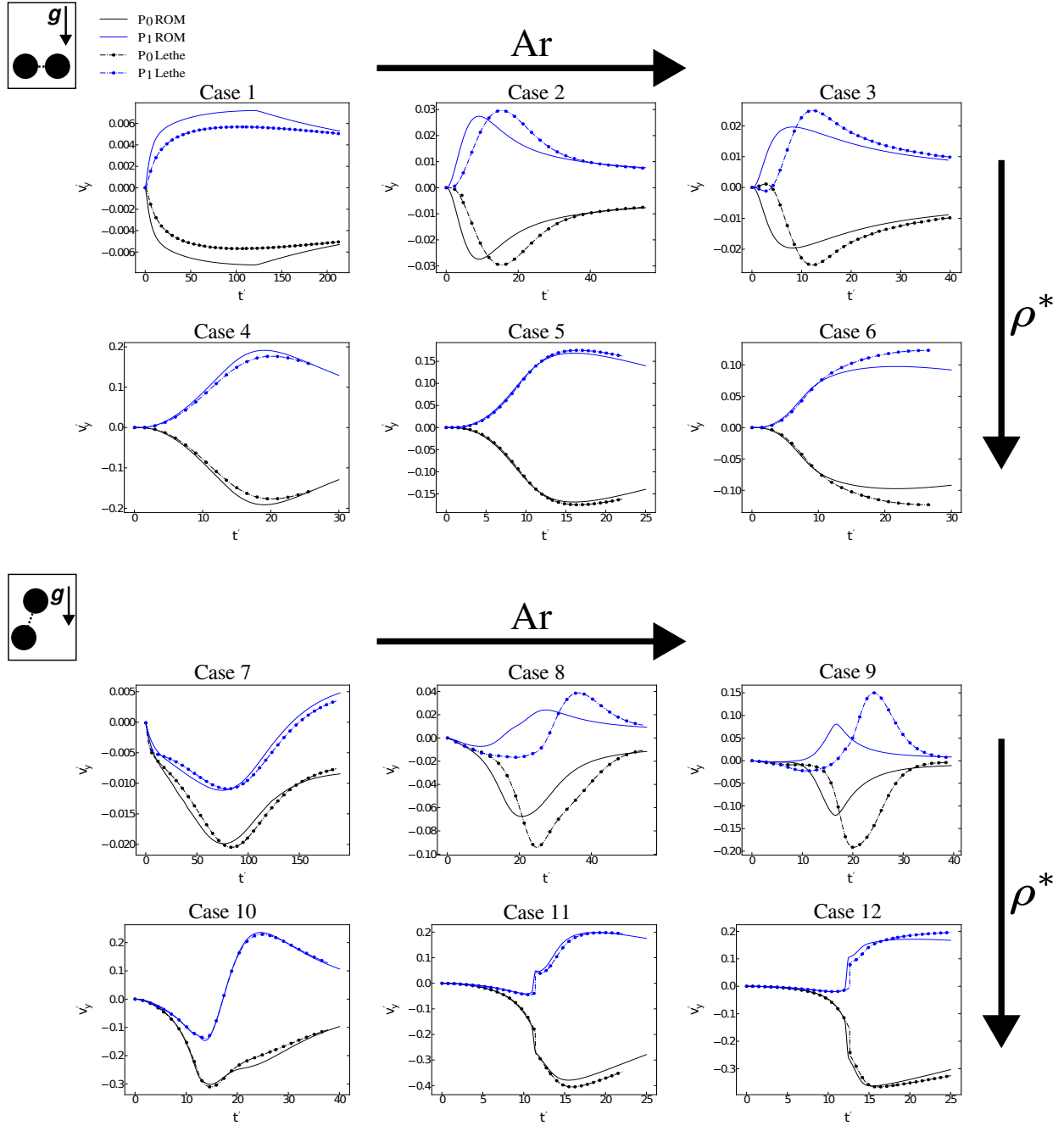


Figure 7.10 Comparison of the horizontal velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.

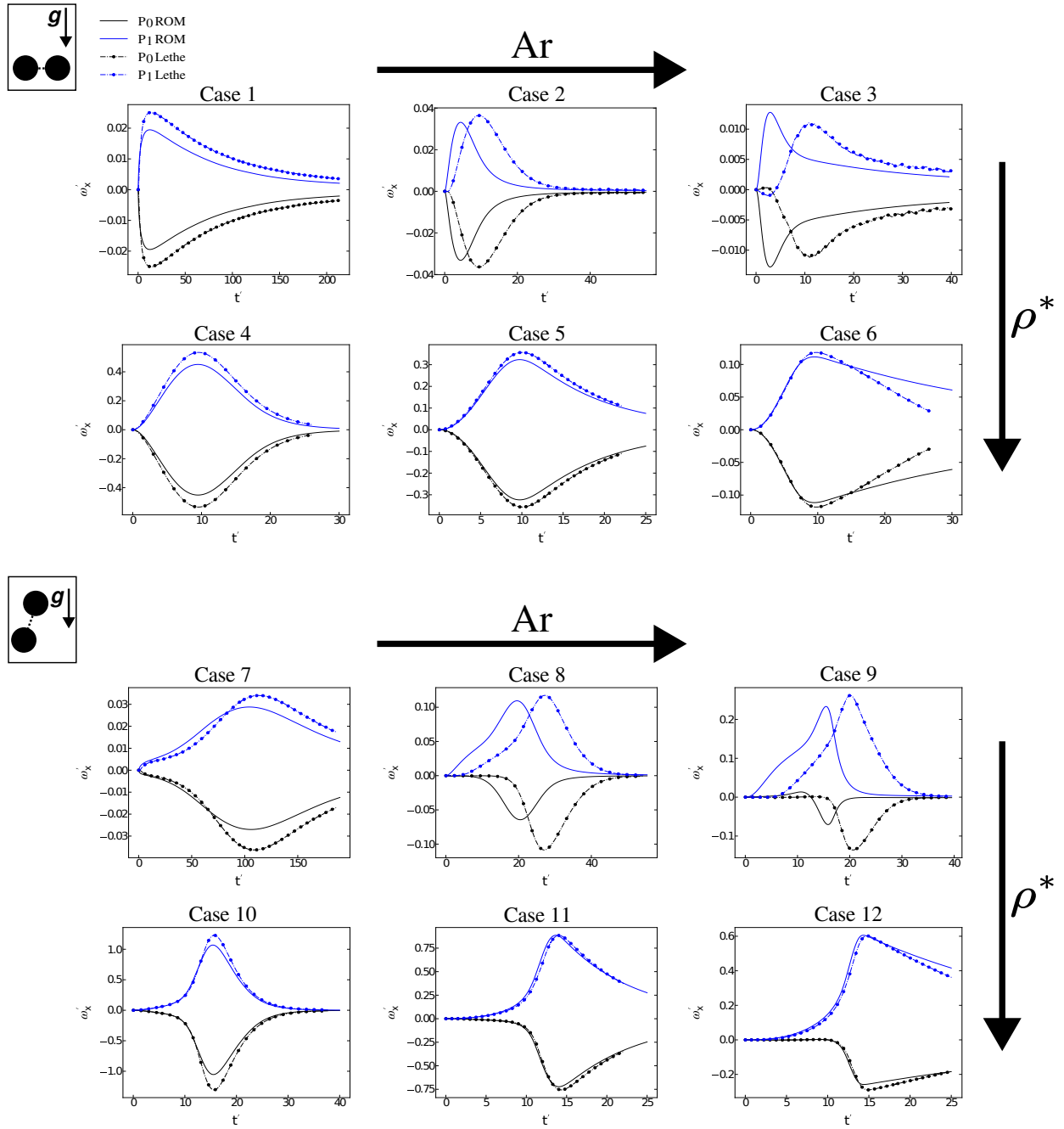


Figure 7.11 Comparison of the angular velocity results obtained with the ROM and the resolved CFD-DEM simulation. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' dispositions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.

particle response time t_s , the fully developed flow hypothesis is more justified. A measure of the characteristic fluid response time is defined by dimensional analysis (see Appendix C), giving:

$$t_f = \frac{\rho_f d_p^2}{\mu} \quad (7.7)$$

A measure of the particle response time is given by the Stokes time (t_s)

$$t_s = \frac{(\rho_p + 0.5\rho_f)d_p^2}{18\mu} \quad (7.8)$$

The ratio of the two response times (t^*) is defined only by the density of the particles and the density of the fluid:

$$t^* = 18 \frac{\rho_f}{\rho_p + 0.5\rho_f} \quad (7.9)$$

This ratio indicates when a case based on a fluid force modeled assuming a fully developed flow will be valid to model the fluid force interaction between the particles. Here, cases with $\rho^* = 1.5$ have a $t^* = 9$, and cases with $\rho^* = 1000$ have a $t^* = 0.018$ which explains why the particle interaction is captured adequately for cases with $\rho^* = 1000$.

Effect of the density ratio

The results of Figures 7.9, 7.10, 7.11 underline a significant difference in the predictive capabilities of the ROM depending on the value of ρ^* . This is most notable for Cases 9 and 12, even though these two cases have the same Archimedes number and initial configuration of particles. To analyze the effect of ρ^* , its value is progressively increased from $\rho^* = 1.5$ to $\rho^* = 1000$ using the same configuration of particles and Archimedes number ($r^* = 2.06155$, $\theta = 0.24498$, and $Ar = 2930.541$). ROM and resolved CFD-DEM discrepancy for values of ρ^* equal to 2, 4, 10, and 100 are added to the results obtained for Cases 9 and 12. Figure 7.12 presents the vertical and horizontal velocity results comparisons. The angular velocity and horizontal velocity discrepancy for these cases are similar; for this reason, it is not presented. These results show that when ρ^* increases, the ROM predictions are more and more in line

with the results of the resolved CFD-DEM simulation. Results for cases with a $\rho^* = 100$ or higher are very well captured by the ROM, while results with $\rho^* = 10$ or smaller present significant discrepancies. As ρ^* increases, the time misalignment between the results reduces progressively. These results also support that the difference in the transient regime of the flow is caused by premature particles' interaction due to the fully developed flow hypotheses.

7.5.2 Effect of angular velocity

The dynamics of the particles presented in Section 7.5.1 suggested a link between the discrepancy in the horizontal velocity and angular velocity. The effect of the angular velocity on the horizontal velocity of the particles is assessed by comparing the horizontal velocity in resolved CFD-DEM simulations when the particle rotation is locked versus when the rotation of the particles is free (see Figure 7.13). These results enable us to determine if the rotation of the particles can cause the difference observed in the horizontal velocity. In these cases, the rotation of the particles increases dispersion. The horizontal velocities of Cases 9 and 12 are the most affected by the rotation of the particles, with a horizontal velocity of up to 50% larger for the particle P_1 when the rotation is enabled. These results are consistent with the effect of the Magnus force on the particles. The horizontal velocity of cases with $\rho^* = 1.5$ with and without rotation returns to similar values as the particle gets further apart. This is not the case for $\rho^* = 1000$. This means horizontal particle displacement will be more affected by the lack of rotation for cases with high ρ^* . These results also show that the effect of rotation on the horizontal velocity is not significantly affected by ρ^* . The effect of the rotation is higher for cases with larger Archimedes numbers (Cases 9 and 12). This implies that the large difference observed for cases with a lower density ratio is not linked to effects associated with the rotation of the particles, supporting our hypothesis that it is related to the history of the flow.

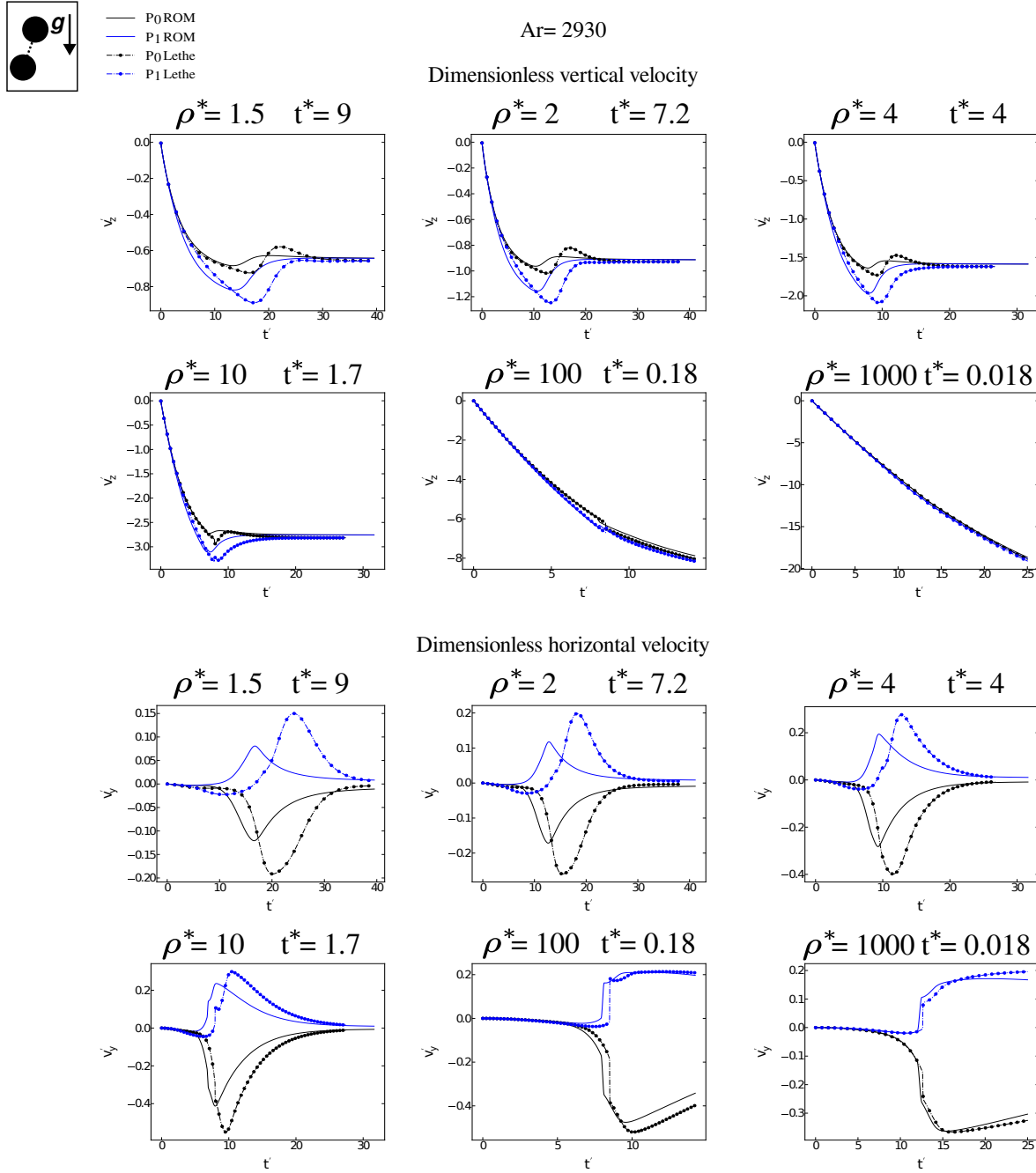


Figure 7.12 Comparison of ROM vertical and horizontal particle velocity results with resolved CFD-DEM simulations for various ρ^* . For these cases $r^* = 2.06$, $\theta = 0.245$ and Archimedes number $Ar = 2930$.

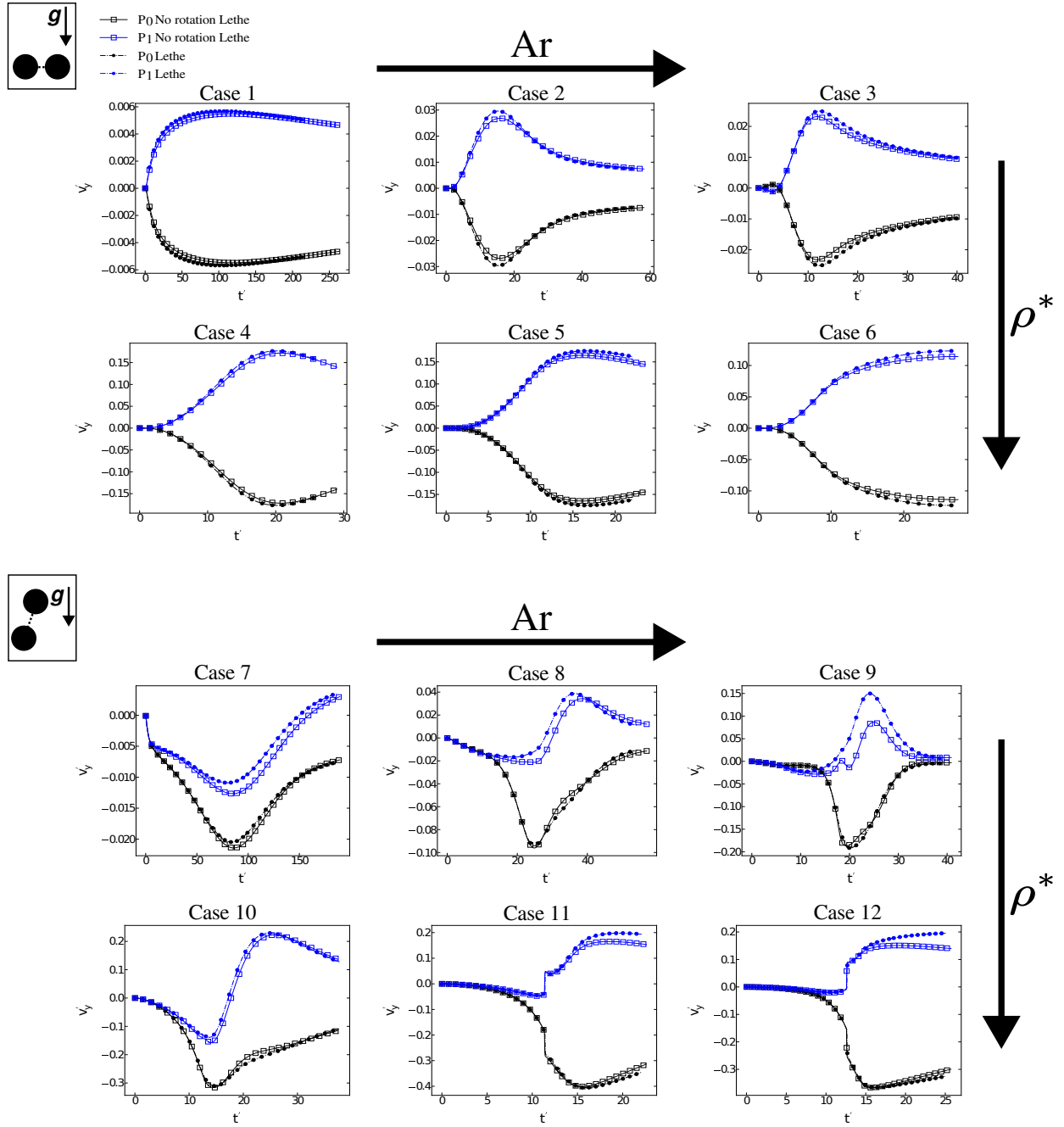


Figure 7.13 Comparison of the horizontal velocity of resolved CFD-DEM simulation with and without the rotation of the particles. The rotation of the particle leads to a significant disparity in the horizontal velocity between the two simulations. The Archimedes number (Ar) increases for each column to the right. For each of the two initial particles' positions, the ratio of the density ρ^* on the first line is 1.5 and 1000 on the second line.

7.6 Conclusion

An ANN fluid-solid force model for the fluid force interaction of a pair of particles (induced drag, lift, and torque) was developed in Section 7.3. This force model was created using a fully developed flow hypothesis. It also does not consider the particles' rotation and relative velocity. These are the same hypotheses commonly used in creating more general fluid force models designed for large-scale fluid-solid modeling, such as unresolved CFD-DEM simulation. The force model has less than 2% root mean square error with an untrained test data set. Using this fluid-solid force model, Section 7.5.1 introduces a ROM for the sedimentation of a pair of particles. Section 7.5 used the ROM to analyze the dynamics obtained and compared it to resolved CFD-DEM simulations. The following conclusions were obtained from this analysis process.

- The induced drag and lift force and induced torque model based on the fully developed hypothesis is adequate to model these forces when the fluid response time (t_f) is much smaller than the particle response time (t_s). This means t^* should be smaller than 1.
- For cases where the fluid response time is in the same order of magnitude as the particle response time or larger, the particle wake development plays an important role in the induced fluid forces and torque. In these cases, the fully developed flow hypotheses lead to a premature interaction between the particles. This means a history force associated with the induced forces' development is needed.
- The rotation of particles plays a role in particle dispersion. But it is not more significant for lower values of ρ^* . The impact of rotation was higher for cases with higher Archimedes numbers (higher Reynolds numbers).

These conclusions imply that work on developing a solid-fluid force model that considers the relative position of particles, such as the work of [108] and [109], will greatly reduce modeling error for gas-solid application. However, liquid-solid interaction modeled with these fluid-solid force models will come with errors due to the premature interaction of the particle similar to what was observed in cases with $\rho^* = 1.5$. We hypothesize that the modeling error due to the fully developed flow hypothesis may also apply to other drag models based on the same hypotheses. This would mean that for liquid-solid cases, drag force models based on the void fraction may prematurely reduce the drag on the particles during their acceleration. This would be true even if the hydrodynamic force model considers the virtual mass and history forces. Due to the anisotropy of particles' interaction, the mean of this error is most likely not zero in cases with large numbers of particles. This means it would result in a measurable effect on the dynamics of particle clusters.

The work of [104] showed that when the transient hydrodynamic forces (virtual mass force, history force) are neglected in the fluid-solid coupling, it leads to inaccurate mixing time. The error due to the premature particles' interaction may have a similar effect as neglecting the transient hydrodynamic forces. In fact, [219] showed that it was challenging to find a drag correlation that could adequately reproduce the fluidization height in liquid fluidized beds. This was especially true for the alginate particles they used, which had a ρ^* close to one.

The impact of the fully developed flow hypothesis on the drag and induced lift force model has been well established in the current work. This highlights the challenges in accurately modeling liquid-solid mixing and opens exciting avenues for enhancing our understanding and modeling of solid-liquid interactions, particularly where complex history effects come into play in the particles' interaction. Studying the phenomenon described herein in larger systems would be a valuable contribution to the understanding of solid-fluid interactions. This newfound awareness paves the way for more precise and insightful models, fostering a promising future in applications that leverage solid-liquid flows.

7.7 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) through the RGPIN-2020-04510 Discovery grant. In particular, Lucka Barbeau would like to acknowledge an NSERC CREATE Simulation-Based Engineering Science (SBES) scholarship. The authors would also like to acknowledge the technical support and computing time provided by the Digital Research Alliance of Canada.

7.8 Discussion

Cet article présente un modèle de force facilement évaluable pour un assemblage de deux particules. Ce modèle repose sur un réseau de neurones et une base de données comprenant 3475 résultats de force hydrodynamique sur une paire de particules. Ce modèle, libre d'accès, est disponible dans un répertoire Github [218]. À l'aide de la comparaison entre le modèle ROM et les simulations de type CFD-DEM résolues, il a été possible d'identifier le rôle joué par l'histoire de l'interaction entre deux particules. Cependant, l'étude a été réalisée avec certaines limitations, qui sont détaillées dans le reste de cette section.

7.8.1 Limitations

Les limitations se divisent en deux catégories les limitations de la ROM développée et les limitations de l'étude comparative réalisée.

Premièrement, le ROM présente plusieurs limitations inhérentes au modèle de force utilisé pour sa définition. Les différents modèles de force considérés (voir l'annexe B) ont, par exemple, des limitations quant à la plage de Reynolds pour laquelle ils sont valides. Généralement, les modèles sélectionnés sont adaptés à la plage de Reynolds étudiée, soit de 1 à 100. Cependant, certains modèles de force se basent sur des hypothèses spécifiques. Par exemple, la force de lubrification suppose un régime de Stokes local, ce qui n'est pas nécessairement le cas lorsque les particules sont suffisamment éloignées pour que la force de lubrification soit encore significative.

Deuxièmement, les configurations initiales des particules étudiées sont relativement limitées. L'exploration d'autres configurations pourrait révéler différents phénomènes. Dans les deux configurations initiales examinées, et pour la plage de Reynolds étudiée, l'interaction entre les particules tend à réduire la force de traînée. Toutefois, certaines configurations à des nombres de Reynolds plus élevés pourraient entraîner une augmentation du coefficient de traînée. Étudier ces configurations permettrait de déterminer si l'effet de l'histoire des interactions entre les particules s'inverse également. En outre, la généralisation des conclusions à d'autres modèles de force hydrodynamique utilisés dans d'autres contextes de modélisation, tels que les modèles CFD-DEM non résolus, reste limitée. Bien que ces modèles prévoient une réduction de la force de traînée d'une particule avec la diminution de la fraction volumique de fluide (ϵ_f), l'effet de l'histoire des interactions dans des essaims de plusieurs particules reste incertain. L'étude de cet effet pour des essaims de particules représenterait un sujet de recherche pertinent.

CHAPITRE 8 DISCUSSION GÉNÉRALE

L'objectif principal de cette thèse est de **développer une approche de type CFD-DEM résolue d'ordre élevé afin d'identifier les mécanismes d'interaction hydrodynamique de particules en mouvement dans un écoulement incompressible**. Cet objectif de recherche comporte deux volets : le développement d'une approche de type CFD-DEM résolue d'ordre élevé et l'identification de mécanismes d'interaction hydrodynamique de particules en mouvement.

Pour réaliser le premier de ces deux volets, deux sous-objectifs ont été atteints. D'abord, le développement d'une méthode de condition immergée d'ordre élevé dans le contexte de la méthode des éléments finis, puis le couplage entre la DEM et la CFD. Ce solveur a été vérifié à l'aide de la méthode des solutions manufacturées pour un cas complexe où la frontière est en mouvement. Par la suite, ce solveur a été validé à l'aide de plusieurs cas présentés dans la littérature et d'une expérience réalisée en laboratoire. À l'aide de ce solveur, il a été possible de démontrer une réduction du temps de calcul nécessaire pour obtenir un niveau d'erreur donné en utilisant un schéma avec un ordre de convergence élevé.

Le deuxième volet de recherche utilise l'approche de modélisation développée dans le premier volet pour étudier l'interaction hydrodynamique de particules en mouvement. Pour ce faire, l'étude de l'interaction de deux particules en sédimentation a été réalisée. Cette étude développe un modèle de force capable de prendre en compte les interactions hydrodynamiques des particules. L'étude de l'interaction hydrodynamique a permis de mettre en évidence l'effet de l'histoire des interactions entre les particules sur la modélisation de leur dynamique. Cela répond donc directement au second volet de l'objectif principal de cette thèse.

CHAPITRE 9 CONCLUSION

Pour conclure cette thèse, les contributions et nouveautés de chaque article seront rappelées, les limitations identifiées seront présentées, et finalement, les potentielles améliorations futures et applications du travail de cette thèse seront détaillées.

9.1 Synthèse des travaux

D'abord, un modèle de type CFD-DEM résolu d'ordre élevé a été développé. La création de ce modèle a requis le développement de deux nouvelles contributions. La première contribution, présentée au Chapitre 5, est la création d'une nouvelle approche de conditions immergées dans le cadre de la méthode des éléments finis. Cette nouvelle méthode a été développée en se basant sur une approche similaire mise en œuvre dans le contexte de la méthode des volumes finis. L'ordre de convergence de cette approche a été démontré pour des éléments d'ordre contrôlable, et l'impact de l'ordre du stencil d'extrapolation utilisé dans cette méthode sur les résultats a été discuté. Cette nouvelle méthode de conditions immergées a ensuite été validée pour plusieurs cas en 2D et 3D présentés dans la littérature. Finalement, l'approche a été comparée à l'utilisation d'un maillage conforme pour un assemblage de 10 sphères.

La seconde contribution, présentée au Chapitre 6, est le développement d'un nouvel algorithme de couplage implicite entre la dynamique des particules, représentée par des conditions immergées, et la dynamique du fluide. Cet algorithme permet de résoudre la dynamique des particules à une échelle de temps plus petite que celle utilisée pour la simulation du fluide. L'algorithme utilise une approche de point fixe accélérée permettant la convergence du schéma, même pour des cas où la masse volumique des particules est bien inférieure à celle du fluide. Cet article discute également en détail de l'effet du changement de nature des degrés de liberté lorsque ceux-ci passent de l'intérieur à l'extérieur d'une particule ou inversement. Un nouveau cas de vérification basé sur la méthode des solutions manufacturées a permis de démontrer l'ordre de convergence pour des éléments d'ordre élevé (Q2), que la dynamique des particules soit imposée ou couplée. Cette publication présente donc la première vérification d'un solveur de type CFD-DEM résolu d'ordre élevé. En utilisant ces cas de vérification, il a été possible de démontrer le gain d'efficacité de calcul des schémas d'ordre élevé pour obtenir une erreur de modélisation donnée. Ce solveur a ensuite été validé avec plusieurs cas présentés dans la littérature. De plus, cet article propose un nouveau cas de validation pour une particule ayant une masse volumique inférieure à celle du fluide dans un écoulement à haut Reynolds.

À l'aide de ce nouveau solveur, la dynamique de sédimentation de deux particules a été étudiée dans le cadre de la troisième contribution de cette thèse. Cet article commence par définir un modèle de force hydrodynamique complet pour l'interaction d'une paire de particules. Ce modèle inclut la modification de la force de traînée, l'apparition d'une force de portance et d'un couple sur les particules. Le modèle est basé sur une régression par ANN, réalisée en utilisant la procédure décrite dans l'article de Valérie Bibeau, présenté en Annexe D. Le jeu de données utilisé pour obtenir cette régression a été créé en suivant la méthodologie de simulation décrite dans l'article de Carole-Anne Daunais, présenté en Annexe E. Ce modèle de force hydrodynamique pour une paire de particules est par la suite utilisé pour développer un ROM pour la sédimentation de deux particules. Les résultats du ROM et du solveur de type CFD-DEM résolu sont ensuite comparés. Cette comparaison permet d'isoler l'effet de l'histoire de l'interaction des particules sur leur accélération, un phénomène significativement plus important dans les systèmes où la masse volumique des particules est similaire à celle du fluide (interaction de type liquide-solide). De plus, cet article a pu vérifier l'effet de la rotation sur la dynamique de la paire de particules. Les résultats montrent que le ratio de masse volumique n'impacte pas de manière significative l'effet de la rotation, lequel est généralement contrôlé principalement par le nombre de Reynolds de l'écoulement.

9.2 Limitations

La majorité des limitations des travaux présentés dans cette thèse ont été présentées dans les chapitres associés. Cette section se contente donc de rappeler les limitations identifiées en les séparant en deux catégories, soit les limitations associées au modèle de type CFD-DEM résolue et les limitations de l'étude sur la dynamique de deux particules.

9.2.1 Limitations du modèle de type CFD-DEM résolue

Les limitations de ce solveur ont été discutées principalement au Chapitres 5 et 6

- Stabilité de la résolution linéaire avec des solveur itératifs pour des stencils d'ordre élevé. Cette limitation affecte l'ordre maximal pouvant être atteint avec la méthode de conditions immergées présentée, car passé l'ordre 3 les solveur matriciels itératifs tels que GMRES avec un préconditionnement de type ILU présentent des problèmes de stabilité. Voir la Section 5.7.2 pour plus de détails.
- Réduction de l'ordre de convergence dans l'espace en présence de cellules surcontraintes. Cette limitation affecte l'ordre de convergence quand deux géométries sont en contact à l'ordre 1. Cela se produit principalement quand une particule est en

contact avec une autre ou encore avec une des parois du domaine de calcul. Cette limitation est discutée en détail dans les Sections 5.6 et 5.7.2.

- Conservation de la masse à la frontière. La représentation de la frontière par l'extrapolation du champ de vitesse à la frontière ne conserve pas nécessairement la masse. Toutefois, cette non-conservation de la masse converge avec la taille du maillage. Généralement, cette situation n'affecte pas la qualité des résultats. Cette limitation est discutée en plus de détails dans la Section 5.7.2.
- Réduction de l'ordre de convergence temporel quand deux particules rentrent en contact. Cette limitation affecte l'ordre de convergence temporelle du schéma de couplage utilisé à l'ordre 1 quand deux particules entrent en contact. Cette limitation est discutée dans la Section 6.3.3.
- L'évaluation du modèle de lubrification ne garantit pas de capturer la force de fluide qui n'est pas résolue due à la proximité de deux particules. Bien que l'approche utilisée semble donner de bons résultats selon la littérature, cette approche pourrait être améliorée. Pour plus de détail, voir les Sections 6.3.1 et 6.8.3.

9.2.2 Limitations de l'étude sur la dynamique d'une paire de particules

Comme mentionné à la section 7.8.1, les limitations de cette étude peuvent être séparées en deux catégories, soit les limitations de la ROM développée et les limitations de l'étude réalisées. Les limitations de la ROM sont principalement liées aux hypothèses liées à la définition du modèle et à la plage d'applicabilité des modèles de forces utilisés. Par la suite, l'étude réalisée s'est restreinte à deux configurations initiales. Ce choix a permis d'aller plus en profondeur dans l'étude de l'impact d'autres variables comme le ratio de masse volumique. De plus, étant donné que cette étude se restreint à deux particules, la généralisation des conclusions observées à des cas avec plus de particules ne peut pas être réalisée directement.

9.3 Améliorations futures et autres applications

La présente section vise à esquisser des perspectives d'amélioration des algorithmes abordés au sein de cette thèse. De plus, elle a pour but de proposer de nouvelles orientations pour l'application des recherches effectuées. Ces deux axes d'exploration seront examinés séparément afin de distinguer clairement les potentialités d'évolution technique de celles liées à des contextes d'application.

9.3.1 Améliorations futures

Cette section détaille certaines avenues d'amélioration possibles à diverses sections de cette thèse.

- Le modèle de fermeture utilisée pour évaluer la force de lubrification présente des lacunes lorsque les particules se rapprochent au point jusqu'à ce que la distance entre elles deviennent plus petite que la résolution du maillage. Cela conduit à une résolution insuffisante de certaines surfaces. Ce problème est exposé en détail dans la section 9.2.1. L'amélioration de ce modèle de fermeture permettrait de réduire l'erreur associée à ce phénomène. Par exemple, une approche basée sur l'intégrale des contraintes pourrait être envisagée. Cette méthode serait appliquée spécifiquement aux surfaces des particules qui ne sont plus résolues en raison de leur proximité excessive, en s'appuyant sur un développement analytique de l'écoulement en régime de Stokes autour des particules. Une telle approche aurait le potentiel de diminuer les erreurs liées à la modélisation de la force de lubrification dans les cas où les distances entre particules sont inférieures à la taille des éléments du maillage.
- Afin d'améliorer la résolution des systèmes linéaires par des méthodes itératives pour des problèmes ayant des conditions immergées d'ordre élevé, il est nécessaire de réaliser davantage de travaux sur le préconditionnement des matrices. À titre d'exemple, une stratégie envisageable serait l'application d'un préconditionnement spécifique aux équations qui imposent les conditions aux limites immergées, conçues à partir d'une imposition d'ordre inférieur. Une méthode analogue est déjà en usage pour le préconditionnement dans les schémas à éléments finis d'ordre élevé, où l'on utilise une matrice de préconditionnement conçue pour un schéma d'ordre inférieur [220].
- Les fonctions d'extrapolation utilisées pour imposer la condition frontière avec la méthode des conditions immergées, présentées dans le chapitre 5, reposent sur des extrapolations polynomiales. Ces fonctions d'extrapolation sont susceptibles aux effets de Runge. Cependant, d'autres types de fonctions pourraient constituer des alternatives valables afin d'extrapoler la solution. L'utilisation d'autres types de fonctions pourrait permettre de réduire l'erreur tout en conservant certaines propriétés de la convergence de la solution. Une approche similaire a déjà été discutée par Capizzano [221] pour la modélisation d'écoulement turbulent où des fonctions d'extrapolation intégrant des modèles de lois de paroi ont été utilisées.

9.3.2 Autre applications

Cette section présente de nouvelles applications potentielles des travaux réalisés dans cette thèse.

- Le travail réalisé dans cette thèse pourrait être aussi applicable à l'étude de phénomènes similaires dans des fluides non newtoniens. Cet outil pourrait donc être utilisé pour définir des modèles de fermeture pour l'interaction hydrodynamique de particules avec un fluide non newtonien. Le travail réalisé par ma collègue Carole-Anne Daunais, présenté en Annexe E, pointe déjà dans cette direction avec le développement d'une corrélation de traînée pour une particule seule dans un écoulement de fluide suivant une loi de puissance.
- Le solveur de type CFD-DEM résolu développé dans le cadre de cette thèse considère uniquement des sphères. Toutefois, la représentation de particules par la méthode des conditions immergées décrite au Chapitre 5 ne se limite pas à une géométrie sphérique. Cette approche, combinée avec une approche de DEM pour le contact d'objets non sphériques, permettrait l'étude d'écoulement autour de tels objets en mouvement. Étant donné que dans l'industrie chimique, il n'est pas rare de rencontrer des particules non sphériques [222], l'étude de ces écoulements serait particulièrement pertinente. En effet, cela permettrait, par exemple, de quantifier de manière plus précise certains phénomènes d'alignement des particules lors de leur fluidisation [223]
- Le Chapitre 7 démontre l'impact que l'effet d'histoire de l'interaction peut avoir sur la sédimentation de deux particules. Toutefois, la généralisation des conclusions de cet article à des essaims comportant un plus grand nombre de particules reste à démontrer. L'outil développé dans le cadre de cette thèse permettrait de réaliser le type d'étude nécessaire à la caractérisation de cet effet pour des essaims de particules comportant un nombre plus significatif de particules.

9.4 Mot de la fin

En conclusion, le travail réalisé tout au long de cette thèse représente une avancée significative dans la modélisation numérique des interactions solide-fluide. Les développements méthodologiques, s'appuyant sur des conditions immergées d'ordre contrôlable, ont permis la création d'un outil de CFD-DEM résolue avec une précision inégalée. L'application de ce solveur à l'interaction hydrodynamique d'une paire de particules a déjà permis d'enrichir la compréhension des limitations de certains modèles de forces hydrodynamiques en confrontant ces modèles avec les résultats de ce nouveau solveur. Cela a permis de poser les fondements

pour des recherches futures sur les modèles de force hydrodynamique.

Le succès du développement de ce solveur a été grandement renforcé par l'intégration judicieuse de bibliothèques libres d'accès dédiées au calcul scientifique de haute performance. L'utilisation de bibliothèques telles que **deal.II** [131], **Trilinos** [92], et **P4est** [132] a été cruciale et a contribué à la réalisation de ce projet ambitieux dans le cadre d'un doctorat. La disponibilité et l'excellence de ces outils en libre accès ont non seulement permis d'atteindre les objectifs fixés, mais aussi d'élargir les possibilités de ce que nous pouvons accomplir dans le cadre d'une recherche doctorale.

Le nouveau modèle de CFD-DEM résolu d'ordre élevé, qui découle des travaux de cette thèse, ouvre la voie à des études de précision supérieure et à des applications pratiques qui étaient jusqu'ici difficiles à appréhender. Un exemple marquant de l'application de ce solveur est son utilisation pour des fluides non newtoniens par Fazli *et al.* [21]. Ces travaux démontrent également l'intérêt scientifique que peuvent présenter les logiciels libres d'accès comme Lethe, en permettant l'accessibilité à des utilisateurs à des codes intégrant les derniers développements technologiques et scientifiques.

RÉFÉRENCES

- [1] A. ten Cate, C. H. Nieuwstad, J. J. Derksen et H. E. A. Van den Akker, “Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity,” *Physics of Fluids*, vol. 14, n°. 11, p. 4012–4025, nov 2002. [En ligne]. Disponible : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1512918>
- [2] S. D. Dhole, R. P. Chhabra et V. Eswaran, “Flow of power-law fluids past a sphere at intermediate reynolds numbers,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 45, n°. 13, p. 4773–4781, may 2006.
- [3] D. Song, R. K. Gupta et R. P. Chhabra, “Wall effects on a sphere falling in quiescent power law fluids in cylindrical tubes,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 48, n°. 12, p. 5845–5856, may 2009.
- [4] A. Bakker, “Lecture 10-turbulence models applied computational fluid dynamics,” *Power-Point presentation*, 2002.
- [5] M. Sommerfeld, “Numerical methods for dispersed multiphase flows,” dans *Particles in flows*. Springer, 2017, p. 327–396.
- [6] J. Almedeij, “Drag coefficient of flow around a sphere : Matching asymptotically the wide trend,” *Powder Technology*, vol. 186, n°. 3, p. 218–223, 2008. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591007006225>
- [7] K. Gumowski, J. Miedzik, S. Goujon-Durand, P. Jenffer et J. Wesfreid, “Transition to a time-dependent state of fluid flow in the wake of a sphere,” *Physical Review E*, vol. 77, n°. 5, p. 055308, 2008.
- [8] H. Sakamoto et H. Haniu, “A study on vortex shedding from spheres in a uniform flow,” 1990.
- [9] M. Geier, A. Pasquali et M. Schönherr, “Parametrization of the cumulant lattice Boltzmann method for fourth order accurate diffusion part ii : Application to flow around a sphere at drag crisis,” *Journal of Computational Physics*, vol. 348, p. 889–898, 2017.
- [10] L. Prahl, A. Hölzer, D. Arlov, J. Revstedt, M. Sommerfeld et L. Fuchs, “On the interaction between two fixed spherical particles,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 33, n°. 7, p. 707–725, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932207000249>
- [11] B. Blais, L. Barbeau, V. Bibeau, S. Gauvin, T. El Geitani, S. Golshan, R. Kamble, G. Mikahori et J. Chaouki, “Lethe : An open-source parallel high-order adaptative cfd solver for incompressible flows,” *SoftwareX*, vol. 12, p. 100579, 2020.

- [12] A. Bérard, G. S. Patience et B. Blais, “Experimental methods in chemical engineering : Unresolved CFD-DEM,” *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 98, n°. 2, p. 424–440, 2020.
- [13] X. Zhang, S. Ni et G. He, “A pressure-correction method and its applications on an unstructured chimera grid,” *Computers & Fluids*, vol. 37, n°. 8, p. 993–1010, 2008.
- [14] F. Ilinca et J.-F. Hétu, “A finite element immersed boundary method for fluid flow around rigid objects,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 65, n°. 7, p. 856–875, 2011.
- [15] B. Blais, M. Lassaigne, C. Goniva, L. Fradette et F. Bertrand, “A semi-implicit immersed boundary method and its application to viscous mixing,” *Computers and Chemical Engineering*, vol. 85, 2016.
- [16] L. Barbeau, S. Étienne, C. Béguin et B. Blais, “Development of a high-order continuous galerkin sharp-interface immersed boundary method and its application to incompressible flow problems,” *Computers Fluids*, vol. 239, p. 105415, 2022. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793022000780>
- [17] A. ten Cate, C. H. Nieuwstad, J. J. Derksen et H. E. A. Van den Akker, “Particle imaging velocimetry experiments and lattice-boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity,” *Physics of Fluids*, vol. 14, n°. 11, p. 4012–4025, 2002. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1063/1.1512918>
- [18] R. Glowinski, T. Pan, T. Hesla, D. Joseph et J. Périaux, “A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies : Application to Particulate Flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 169, n°. 2, p. 363–426, may 2001. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999100965422>
- [19] S. V. Apte, M. Martin et N. A. Patankar, “A numerical method for fully resolved simulation (frs) of rigid particle–flow interactions in complex flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 228, n°. 8, p. 2712–2738, 2009.
- [20] D. Nie et J. Lin, “Simulation of sedimentation of two spheres with different densities in a square tube,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 896, p. A12, 2020.
- [21] M. Fazli, M. Rudman, S. Kuang et A. Chryss, “Application of immersed boundary methods to non-newtonian yield-pseudoplastic flows,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 124, p. 532–552, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X23003463>
- [22] R. Chen et Y. Lu, “The flow characteristics of an interactive particle at low reynolds numbers,” *International journal of multiphase flow*, vol. 25, n°. 8, p. 1645–1655, 1999.

- [23] R. Chen et J. Wu, "The flow characteristics between two interactive spheres," *Chemical Engineering Science*, vol. 55, n°. 6, p. 1143–1158, 2000.
- [24] S.-C. Liang, T. Hong et L.-S. Fan, "Effects of particle arrangements on the drag force of a particle in the intermediate flow regime," *International journal of multiphase flow*, vol. 22, n°. 2, p. 285–306, 1996.
- [25] C. Zhu, S. Liang et L. S. Fan, "Particle wake effects on the drag force of an interactive particle," *International journal of multiphase flow*, vol. 20, n°. 1, p. 117–129, 1994.
- [26] H. Jin, H. Wang, Z. Wu, Z. Ren et Z. Ou, "Numerical investigation on drag coefficient and flow characteristics of two biomass spherical particles in supercritical water," *Renewable Energy*, vol. 138, p. 11–17, 2019.
- [27] L. Barbeau, S. Golshan, J. Deng, S. Etienne, C. Béguin et B. Blais, "High order moving immersed boundary and its application to resolved cfd-dem model," *Computers Fluids*, 2023 in press.
- [28] P. J. Carreau, D. C. R. D. Kee et R. P. Chhabra, *Rheology of Polymeric Systems*. Hanser Fachbuchverlag, sept. 2021.
- [29] R. Clift, J. R. Grace et M. E. Weber, *Bubbles, drops, and particles*. Courier Corporation, 2005.
- [30] R. Barati, S. A. A. S. Neyshabouri et G. Ahmadi, "Development of empirical models with high accuracy for estimation of drag coefficient of flow around a smooth sphere : An evolutionary approach," *Powder Technology*, vol. 257, p. 11–19, may 2014.
- [31] R. Clift et W. H. Gauvin, "Motion of entrained particles in gas streams," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 49, n°. 4, p. 439–448, aug 1971.
- [32] L. Schiller et Z. Naumann, "A drag coefficient correlation," *VDI Zeitungk*, vol. 77, p. 318–320, 1935.
- [33] R. Flemmer et C. Banks, "On the drag coefficient of a sphere," *Powder Technology*, vol. 48, n°. 3, p. 217–221, nov 1986.
- [34] A. Tripathi, R. P. Chhabra et T. Sundararajan, "Power law fluid flow over spheroidal particles," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 33, n°. 2, p. 403–410, feb 1994.
- [35] D. Song, R. K. Gupta et R. P. Chhabra, "Drag on a sphere in poiseuille flow of shear-thinning power-law fluids," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 50, n°. 23, p. 13 105–13 115, feb 2011.
- [36] T. Johnson et V. Patel, "Flow past a sphere up to a reynolds number of 300," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 378, p. 19–70, 1999.

- [37] R. P. Chhabra et P. H. T. Uhlherr, “Creeping motion of spheres through shear-thinning elastic fluids described by the carreau viscosity equation,” *Rheologica Acta*, vol. 19, n°. 2, p. 187–195, mar 1980.
- [38] B. J. Ennis, J. Green et R. Davies, “The legacy of neglect in the us,” *Chemical Engineering Progress*, vol. 90, n°. 4, p. 32–43, 1994.
- [39] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld et Y. Tsuji, *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press, 2011.
- [40] 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.
- [41] L. Rong, K. Dong et A. 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. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250913003679>
- [42] P.-G. de Gennes, “Reflections on the mechanics of granular matter,” *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 261, n°. 3-4, p. 267–293, 1998.
- [43] J. le Rond d’Alembert, *Essai d’une nouvelle théorie de la résistance des fluides.*, 1752.
- [44] J. Hoffman et C. Johnson, “Resolution of d’alembert’s paradox,” *Journal of mathematical fluid mechanics*, vol. 12, n°. 3, p. 321–334, 2010.
- [45] L. L. Evgeny Lifshitz, *Fluid Mechanics, Second Edition*. Pergamon Press Canada, 1987.
- [46] R. B. Bird, “Transport phenomena,” *Appl. Mech. Rev.*, vol. 55, n°. 1, p. R1–R4, 2002.
- [47] S. S. Tiwari, E. Pal, S. Bale, N. Minocha, A. W. Patwardhan, K. Nandakumar et J. B. Joshi, “Flow past a single stationary sphere, 2. regime mapping and effect of external disturbances,” *Powder Technology*, vol. 365, p. 215–243, 2020, sI : In honor of LS Fan. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591019302773>
- [48] G. G. Stokes, “On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums,” 1851.
- [49] H. Kim et P. Durbin, “Observations of the frequencies in a sphere wake and of drag increase by acoustic excitation,” *The Physics of fluids*, vol. 31, n°. 11, p. 3260–3265, 1988.
- [50] V. Bakic et M. Peric, “Visualization of flow around sphere for reynolds numbers between 22,000 and 400,000,” *Thermophysics and Aeromechanics*, vol. 12, n°. 3, p. 307–315, 2005.

- [51] E. Achenbach, “Experiments on the flow past spheres at very high reynolds numbers,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 54, n°. 3, p. 565–575, 1972.
- [52] J. Kim, H. Choi, H. Park et J. Y. Yoo, “Inverse magnus effect on a rotating sphere : when and why,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 754, 2014.
- [53] E. Loth, “Lift of a spherical particle subject to vorticity and/or spin,” *AIAA Journal*, vol. 46, n°. 4, p. 801–809, 2008. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.2514/1.29159>
- [54] J. N. Newman, *Marine Hydrodynamics*. The MIT Press, 08 1977. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.7551/mitpress/4443.001.0001>
- [55] H. Lamb, *Hydrodynamics*. Cambridge university press, 1932.
- [56] A. A. Kendoush, A. H. Sulaymon et S. A. Mohammed, “Experimental evaluation of the virtual mass of two solid spheres accelerating in fluids,” *Experimental thermal and fluid science*, vol. 31, n°. 7, p. 813–823, 2007.
- [57] M. Simcik, M. Ruzicka et J. Drahoš, “Computing the added mass of dispersed particles,” *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 18, p. 4580–4595, 2008.
- [58] P. Saffman, “The lift on a small sphere in a slow shear flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 22, n°. 2, p. 385–400, 1965.
- [59] R. Mei, “An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite reynolds number,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 18, n°. 1, p. 145–147, 1992. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932292900126>
- [60] J. Boussinesq, “Sur la resistance qu’oppose un fluide indefini en repos, sans pesanteur, au mouvement varie d’une sphere solide qu’il mouille sur toute sa surface, quand les vitesses restent bien continues et assez faibles pour que leurs carres et produits soient negligiables,” *CR Acad. Sc. Paris*, vol. 100, p. 935–937, 1885.
- [61] A. B. Basset, *A treatise on hydrodynamics : with numerous examples*. Deighton, Bell and Company, 1888, vol. 2.
- [62] R. Mei et R. J. Adrian, “Flow past a sphere with an oscillation in the free-stream velocity and unsteady drag at finite reynolds number,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 237, p. 323–341, 1992.
- [63] A. Dorgan et E. Loth, “Efficient calculation of the history force at finite reynolds numbers,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 33, n°. 8, p. 833–848, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932207000304>

- [64] M. Parmar, S. Annamalai, S. Balachandar et A. Prosperetti, “Differential formulation of the viscous history force on a particle for efficient and accurate computation,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 844, p. 970–993, 2018.
- [65] H. Zhu, Z. Zhou, R. Yang et A. Yu, “Discrete particle simulation of particulate systems : theoretical developments,” *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n°. 13, p. 3378–3396, 2007.
- [66] P. A. Moreno-Casas et F. A. Bombardelli, “Computation of the basset force : recent advances and environmental flow applications,” *Environmental Fluid Mechanics*, vol. 16, n°. 1, p. 193–208, 2016.
- [67] T. Hagemeyer, D. Thévenin et T. Richter, “Settling of spherical particles in the transitional regime,” *International Journal of Multiphase Flow*, p. 103589, 2021.
- [68] S. Zoghalmi, C. Béguin, S. Etienne, D. Scott et L. Bornard, “The role of added mass in the dispersion of bubble clouds,” *IOP Conference Series : Earth and Environmental Science*, vol. 240, n°. 6, p. 062050, mar 2019. [En ligne]. Disponible : <https://dx.doi.org/10.1088/1755-1315/240/6/062050>
- [69] A. Vázquez-Quesada, X. Bian et M. Ellero, “Three-dimensional simulations of dilute and concentrated suspensions using smoothed particle hydrodynamics,” *Computational Particle Mechanics*, vol. 3, n°. 2, p. 167–178, 2016.
- [70] S. Kim et S. J. Karrila, *Microhydrodynamics : principles and selected applications*. Courier Corporation, 2013.
- [71] C. K. Batchelor et G. Batchelor, *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000.
- [72] Y. Tsuji, Y. Morikawa et K. Terashima, “Fluid-dynamic interaction between two spheres,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 8, n°. 1, p. 71–82, 1982.
- [73] A. F. Fortes, D. D. Joseph et T. S. Lundgren, “Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 177, p. 467–483, 1987.
- [74] R. Sun et A. T. Chwang, “Interactions between two touching spherical particles in sedimentation,” *Physical Review E*, vol. 76, n°. 4, p. 046316, 2007.
- [75] S. Ghosh et M. Kumar, “Study of drafting, kissing and tumbling process of two particles with different sizes using immersed boundary method in a confined medium,” *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 177, p. 341–357, 2020.
- [76] M.-l. Liu, “Numerical simulation of particle sedimentation in 3d rectangular channel,” *Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 32, n°. 9, p. 1147, 2011.

- [77] M. Firouznia, B. Metzger, G. Ovarlez et S. Hormozi, “The interaction of two spherical particles in simple-shear flows of yield stress fluids,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 255, p. 19–38, 2018.
- [78] M. Cooley et M. O’neill, “On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere,” *Mathematika*, vol. 16, n^o. 1, p. 37–49, 1969.
- [79] M. E. O’Neill et S. R. Majumdar, “Asymmetrical slow viscous fluid motions caused by the translation or rotation of two spheres. part ii : Asymptotic forms of the solutions when the minimum clearance between the spheres approaches zero,” *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, vol. 21, p. 180–187, 1970.
- [80] C. Wu, J. Zhan, Y. Li, K. Lam et A. Berrouk, “Accurate void fraction calculation for three-dimensional discrete particle model on unstructured mesh,” *Chemical Engineering Science*, vol. 64, n^o. 6, p. 1260–1266, 2009.
- [81] Z. Peng, E. Doroodchi, C. Luo et B. Moghtaderi, “Influence of void fraction calculation on fidelity of cfd-dem simulation of gas-solid bubbling fluidized beds,” *AIChE Journal*, vol. 60, n^o. 6, p. 2000–2018, 2014.
- [82] T. El Geitani et B. Blais, “Quadrature-centered averaging scheme for accurate and continuous void fraction calculation in computational fluid dynamics–discrete element method simulations,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 62, n^o. 12, p. 5394–5407, 2023.
- [83] S. Ergun et A. A. Orning, “Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds,” *Industrial & Engineering Chemistry*, vol. 41, n^o. 6, p. 1179–1184, 1949.
- [84] J. Abrahamson, “Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid,” *Chemical Engineering Science*, vol. 30, n^o. 11, p. 1371–1379, 1975.
- [85] J. Happel et H. Brenner, “The viscosity of particulate systems,” dans *Low Reynolds number hydrodynamics*. Springer, 1983, p. 431–473.
- [86] 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^o. 1, p. 137–152, 1959.
- [87] G. Kynch, “The effective viscosity of suspensions of spherical particles,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 237, n^o. 1208, p. 90–116, 1956.
- [88] D. Arndt, W. Bangerth, B. Blais, T. C. Clevenger, M. Fehling, A. V. Grayver, T. Heister, L. Heltai, M. Kronbichler, M. Maier *et al.*, “The deal. ii library, version 9.2,” *Journal of Numerical Mathematics*, vol. 1, n^o. ahead-of-print, 2020.

- [89] Z. J. Wang, K. Fidkowski, R. Abgrall, F. Bassi, D. Caraeni, A. Cary, H. Deconinck, R. Hartmann, K. Hillewaert, H. T. Huynh *et al.*, “High-order cfd methods : current status and perspective,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 72, n^o. 8, p. 811–845, 2013.
- [90] T. E. Tezduyar, “Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations,” *Advances in Applied Mechanics*, vol. 28, p. 1–44, 1991.
- [91] J. Donea et A. Huerta, *Finite element methods for flow problems*. John Wiley & Sons, 2003.
- [92] M. A. Heroux et J. M. Willenbring, “A new overview of the trilinos project,” *Scientific Programming*, vol. 20, n^o. 2, p. 83–88, 2012.
- [93] M. G. Larson et F. Bengzon, *The finite element method : theory, implementation, and applications*. Springer Science & Business Media, 2013, vol. 10.
- [94] D. Kelly, J. De SR Gago, O. Zienkiewicz et I. Babuska, “A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method : Part i—error analysis,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 19, n^o. 11, p. 1593–1619, 1983.
- [95] W. Bangerth, C. Burstedde, T. Heister et M. Kronbichler, “Algorithms and data structures for massively parallel generic adaptive finite element codes,” *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, vol. 38, n^o. 2, p. 1–28, 2012.
- [96] C. Moliner, F. Marchelli, N. Spanachi, A. Martinez-Felipe, B. Bosio et E. Arato, “Cfd simulation of a spouted bed : Comparison between the discrete element method (dem) and the two fluid model (tfm),” *Chemical Engineering Journal*, vol. 377, p. 120466, 2019.
- [97] H. Zhu, Z. Zhou, R. Yang et A. Yu, “Discrete particle simulation of particulate systems : a review of major applications and findings,” *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n^o. 23, p. 5728–5770, 2008.
- [98] 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^o. 3, p. 525–541, 2004.
- [99] Q. Zheng, H. Zhu et A. Yu, “Finite element analysis of the contact forces between a viscoelastic sphere and rigid plane,” *Powder Technology*, vol. 226, p. 130–142, 2012.
- [100] S. Golshan, R. Sotudeh-Gharebagh, R. Zarghami, N. Mostoufi, B. Blais et J. Kuipers, “Review and implementation of cfd-dem applied to chemical process systems,” *Chemical Engineering Science*, vol. 221, p. 115646, 2020.
- [101] S. Matsusaka, H. Maruyama, T. Matsuyama et M. Ghadiri, “Triboelectric charging of powders : A review,” *Chemical Engineering Science*, vol. 65, n^o. 22, p. 5781–5807, 2010.

- [102] D. Gidaspow, *Multiphase flow and fluidization : continuum and kinetic theory descriptions*. Academic press, 1994.
- [103] Y. Feng et A. Yu, “Assessment of model formulations in the discrete particle simulation of gas- solid flow,” *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 43, n°. 26, p. 8378–8390, 2004.
- [104] T. M. Nijssen, H. A. Kuipers, J. van der Stel, A. T. Adema et K. A. Buist, “Complete liquid-solid momentum coupling for unresolved cfd-dem simulations,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 132, p. 103425, 2020.
- [105] R. Beetstra, M. A. van der Hoef et J. Kuipers, “Drag force of intermediate reynolds number flow past mono-and bidisperse arrays of spheres,” *AIChE journal*, vol. 53, n°. 2, p. 489–501, 2007.
- [106] T. Li, L. Wang, W. Rogers, G. Zhou et W. Ge, “An approach for drag correction based on the local heterogeneity for gas–solid flows,” *AIChE Journal*, vol. 63, n°. 4, p. 1203–1212, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.15507>
- [107] M. Su et H. Zhao, “Modifying the inter-phase drag via solid volume fraction gradient for cfd simulation of fast fluidized beds,” *AIChE Journal*, vol. 63, n°. 7, p. 2588–2598, 2017.
- [108] Z. Cheng et A. Wachs, “Physics-informed neural network for modelling force and torque fluctuations in a random array of bidisperse spheres,” *arXiv preprint arXiv :2305.03326*, 2023.
- [109] A. Seyed-Ahmadi et A. Wachs, “Microstructure-informed probability-driven point-particle model for hydrodynamic forces and torques in particle-laden flows,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 900, p. A21, 2020.
- [110] P. Saksono, W. Dettmer et D. Perić, “An adaptive remeshing strategy for flows with moving boundaries and fluid–structure interaction,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 71, n°. 9, p. 1009–1050, 2007.
- [111] B. Chung, P. Johnson et A. Popel, “Application of chimera grid to modelling cell motion and aggregation in a narrow tube,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 53, n°. 1, p. 105–128, 2007.
- [112] J. Landry, A. Soulaïmani, E. Luke et A. B. H. Ali, “Robust moving mesh algorithms for hybrid stretched meshes : Application to moving boundaries problems,” *Journal of Computational Physics*, vol. 326, p. 691–721, 2016.
- [113] P. Schreurs, F. Veldpaus et W. Brekelmans, “Simulation of forming processes, using the arbitrary eulerian-lagrangian formulation,” *Computer Methods in Applied*

- Mechanics and Engineering*, vol. 58, n°. 1, p. 19–36, 1986. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782586900769>
- [114] J. Witteveen et H. Bijl, “Explicit mesh deformation using inverse distance weighting interpolation,” dans *19th AIAA Computational Fluid Dynamics*, 2009, p. 3996.
 - [115] E. Lefrançois, “A simple mesh deformation technique for fluid–structure interaction based on a submesh approach,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 75, n°. 9, p. 1085–1101, 2008.
 - [116] C. S. Peskin, “Flow patterns around heart valves : a numerical method,” *Journal of Computational Physics*, vol. 10, n°. 2, p. 252–271, 1972.
 - [117] W. Kim et H. Choi, “Immersed boundary methods for fluid-structure interaction : A review,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 75, p. 301–309, 2019.
 - [118] R. Glowinski, T.-W. Pan, T. I. Hesla et D. D. Joseph, “A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 25, n°. 5, p. 755–794, 1999.
 - [119] J. Freund et R. Stenberg, “On weakly imposed boundary conditions for second order problems,” dans *Proceedings of the Ninth Int. Conf. Finite Elements in Fluids*. Venice, 1995, p. 327–336.
 - [120] D. Goldstein, R. Handler et L. Sirovich, “Modeling a no-slip flow boundary with an external force field,” *Journal of Computational Physics*, vol. 105, n°. 2, p. 354–366, 1993.
 - [121] J. Mohd-Yusof, “Combined immersed-boundary/b-spline methods for simulations of flow in complex geometries,” *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, vol. 161, n°. 1, p. 317–327, 1997.
 - [122] R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F. Najjar, A. Vargas et A. Von Loebbecke, “A versatile sharp interface immersed boundary method for incompressible flows with complex boundaries,” *Journal of Computational Physics*, vol. 227, n°. 10, p. 4825–4852, 2008.
 - [123] M. N. Linnick et H. F. Fasel, “A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains,” *Journal of Computational Physics*, vol. 204, n°. 1, p. 157–192, 2005.
 - [124] S. Das, A. Panda, N. Deen et J. Kuipers, “A sharp-interface immersed boundary method to simulate convective and conjugate heat transfer through highly complex periodic porous structures,” *Chemical Engineering Science*, vol. 191, p. 1–18, 2018.
 - [125] J. Lee, J. Kim, H. Choi et K.-S. Yang, “Sources of spurious force oscillations from an immersed boundary method for moving-body problems,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n°. 7, p. 2677–2695, 2011.

- [126] F. Ilinca et J.-F. Hétu, “Solution of flow around complex-shaped surfaces by an immersed boundary-body conformal enrichment method,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 69, n°. 4, p. 824–841, 2012.
- [127] J.-F. Hétu et F. Ilinca, “Immersed boundary finite elements for 3d flow simulations in twin-screw extruders,” *Computers & Fluids*, vol. 87, p. 2–11, 2013.
- [128] H. H. Hu, D. D. Joseph et M. J. Crochet, “Direct simulation of fluid particle motions,” *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, vol. 3, n°. 5, p. 285–306, 1992.
- [129] H. Hu, “Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 22, n°. 2, p. 335–352, 1996. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932295000682>
- [130] B. Blais, “lethe-cfd/lethe,” 2019. [En ligne]. Disponible : <https://github.com/lethe-cfd/lethe>
- [131] D. Arndt, W. Bangerth, M. Feder, M. Fehling, R. Gassmöller, T. Heister, L. Heltai, M. Kronbichler, M. Maier, P. Munch, J.-P. Pelteret, S. Sticko, B. Turcksin et D. Wells, “The deal.II library, version 9.4,” *Journal of Numerical Mathematics*, vol. 30, n°. 3, p. 231–246, 2022. [En ligne]. Disponible : <https://dealii.org/deal94-preprint.pdf>
- [132] C. Burstedde, L. C. Wilcox et O. Ghattas, “p4est : Scalable algorithms for parallel adaptive mesh refinement on forests of octrees,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 33, n°. 3, p. 1103–1133, 2011.
- [133] S. Golshan, P. Munch, R. Gassmöller, M. Kronbichler et B. Blais, “Lethe-dem : An open-source parallel discrete element solver with load balancing,” *Computational Particle Mechanics*, vol. 10, n°. 1, p. 77–96, 2023.
- [134] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, S. Ghemawat, I. Goodfellow, A. Harp, G. Irving, M. Isard, Y. Jia, R. Jozefowicz, L. Kaiser, M. Kudlur, J. Levenberg, D. Mané, R. Monga, S. Moore, D. Murray, C. Olah, M. Schuster, J. Shlens, B. Steiner, I. Sutskever, K. Talwar, P. Tucker, V. Vanhoucke, V. Vasudevan, F. Viégas, O. Vinyals, P. Warden, M. Wattenberg, M. Wicke, Y. Yu et X. Zheng, “TensorFlow : Large-scale machine learning on heterogeneous systems,” 2015, software available from [tensorflow.org](https://www.tensorflow.org/). [En ligne]. Disponible : <https://www.tensorflow.org/>
- [135] V. Bibeau, L. Barbeau, D. C. Boffito et B. Blais, “Artificial neural network to predict the power number of agitated tanks fed by cfd simulations,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. n/a, n°. n/a, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cjce.24870>

- [136] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. F. del Río, M. Wiebe, P. Peterson, P. Gérard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Abbasi, C. Gohlke et T. E. Oliphant, “Array programming with NumPy,” *Nature*, vol. 585, n°. 7825, p. 357–362, sept. 2020. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>
- [137] W. L. Oberkampf et C. J. Roy, *Verification and validation in scientific computing*. Cambridge University Press, 2010.
- [138] A. Meurer, C. P. Smith, M. Paprocki, O. Čertík, S. B. Kirpichev, M. Rocklin, A. Kumar, S. Ivanov, J. K. Moore, S. Singh, T. Rathnayake, S. Vig, B. E. Granger, R. P. Muller, F. Bonazzi, H. Gupta, S. Vats, F. Johansson, F. Pedregosa, M. J. Curry, A. R. Terrel, v. Roučka, A. Saboo, I. Fernando, S. Kulal, R. Cimrman et A. Scopatz, “SymPy : symbolic computing in python,” *PeerJ Computer Science*, vol. 3, p. e103, janv. 2017. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.7717/peerj-cs.103>
- [139] J. D. Hunter, “Matplotlib : A 2d graphics environment,” *Computing in Science & Engineering*, vol. 9, n°. 3, p. 90–95, 2007.
- [140] J. Ahrens, B. Geveci, C. Law, C. Hansen et C. Johnson, “36-paraview : An end-user tool for large-data visualization,” *The visualization handbook*, vol. 717, p. 50 038–1, 2005.
- [141] J. Lu, X. Zhu, E. Peters, R. Verzicco, D. Lohse et J. Kuipers, “Moving from momentum transfer to heat transfer—a comparative study of an advanced graetz-nusselt problem using immersed boundary methods,” *Chemical Engineering Science*, vol. 198, p. 317–333, 2019.
- [142] A. Pacheco-Vega, J. R. Pacheco et T. Rodić, “A general scheme for the boundary conditions in convective and diffusive heat transfer with immersed boundary methods,” 2007.
- [143] X. Gong, Z. Gong et H. Huang, “An immersed boundary method for mass transfer across permeable moving interfaces,” *Journal of Computational Physics*, vol. 278, p. 148–168, 2014.
- [144] R. P. Fedkiw et X.-D. Liu, “The ghost fluid method for viscous flows,” dans *Innovative methods for numerical solution of partial differential equations*. World Scientific, 2002, p. 111–143.
- [145] Z. Wang, K. Fidkowski, R. Abgrall, F. Bassi, D. Caraeni, A. Cary, H. Deconinck, R. Hartmann, K. Hillewaert, H. Huynh, N. Kroll, G. May, P.-O. Persson, B. van Leer et M. Visbal, “High-order CFD methods : current status and perspective,”

- International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 72, n^o. 8, p. 811–845, jul 2013. [En ligne]. Disponible : <http://doi.wiley.com/10.1002/fld.3767>
- [146] J. H. Seo et R. Mittal, “A high-order immersed boundary method for acoustic wave scattering and low-mach number flow-induced sound in complex geometries,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n^o. 4, p. 1000–1019, 2011.
 - [147] M. Linnick et H. Fasel, “A high-order immersed boundary method for unsteady incompressible flow calculations,” dans *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2003, p. 1124.
 - [148] L. Heltai et F. Costanzo, “Variational implementation of immersed finite element methods,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 229, p. 110–127, 2012.
 - [149] A. Hansbo et P. Hansbo, “An unfitted finite element method, based on Nitsche’s method, for elliptic interface problems,” *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 191, n^o. 47-48, p. 5537–5552, 2002.
 - [150] E. Burman, S. Claus, P. Hansbo, M. G. Larson et A. Massing, “Cutfem : discretizing geometry and partial differential equations,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 104, n^o. 7, p. 472–501, 2015.
 - [151] E. Burman, P. Hansbo et M. G. Larson, “Cutfem based on extended finite element spaces,” *Numerische Mathematik*, vol. 152, n^o. 2, p. 331–369, 2022.
 - [152] K. Li, N. M. Atallah, G. A. Main et G. Scovazzi, “The shifted interface method : A flexible approach to embedded interface computations,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 121, n^o. 3, p. 492–518, 2020.
 - [153] N. Peller, A. L. Duc, F. Tremblay et M. Manhart, “High-order stable interpolations for immersed boundary methods,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 52, n^o. 11, p. 1175–1193, 2006.
 - [154] D. Arndt, W. Bangerth, B. Blais, M. Fehling, R. Gassmöller, T. Heister, L. Heltai, U. Köcher, M. Kronbichler, M. Maier *et al.*, “The deal. ii library, version 9.3,” *Journal of Numerical Mathematics*, vol. 29, n^o. 3, p. 171–186, 2021.
 - [155] A. De *et al.*, “A robust and efficient sharp interface immersed boundary framework for viscous flow simulations at arbitrary mach number involving complex and moving boundaries,” *arXiv preprint arXiv :1912.11908*, 2019.
 - [156] J. Yang et F. Stern, “Sharp interface immersed-boundary/level-set method for wave-body interactions,” *Journal of Computational Physics*, vol. 228, n^o. 17, p. 6590–6616, 2009.

- [157] D. Arndt, W. Bangerth, B. Blais, T. C. Clevenger, M. Fehling, A. V. Grayver, T. Heister, L. Heltai, M. Kronbichler, M. Maier, P. Munch, J.-P. Pelteret, R. Rastak, I. Thomas, B. Turcksin, Z. Wang et D. Wells, “The `deal.II` library, version 9.2,” *Journal of Numerical Mathematics*, 2020, in press. [En ligne]. Disponible : <https://dealii.org/deal92-preprint.pdf>
- [158] T. E. Tezduyar, “Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations,” dans *Advances in Applied Mechanics*. Elsevier, 1992, vol. 28, p. 1–44. [En ligne]. Disponible : <http://files/748/WQKE8BY4.pdf>
- [159] F. Ilinca, K. R. Yu et B. Blais, “The effect of viscosity on free surface flow inside an angularly oscillating rectangular tank,” *Computers and Fluids*, 2019. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2019.02.021>
- [160] T. E. Tezduyar, S. Mittal, S. E. Ray et R. Shih, “Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 95, n^o. 2, p. 221–242, mar 1992.
- [161] B. Blais et F. Ilinca, “Development and validation of a stabilized immersed boundary CFD model for freezing and melting with natural convection,” *Computers and Fluids*, 2018.
- [162] R. B. Bird, W. E. Stewart et E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, second edition éd. John Wiley & Sons, 2007.
- [163] M. Braza, P. Chassaing et H. H. Minh, “Numerical study and physical analysis of the pressure and velocity fields in the near wake of a circular cylinder,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 165, p. 79–130, 1986.
- [164] J.-I. Choi, R. C. Oberoi, J. R. Edwards et J. A. Rosati, “An immersed boundary method for complex incompressible flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 224, n^o. 2, p. 757–784, 2007.
- [165] A. P. S. Bhalla, R. Bale, B. E. Griffith et N. A. Patankar, “A unified mathematical framework and an adaptive numerical method for fluid–structure interaction with rigid, deforming, and elastic bodies,” *Journal of Computational Physics*, vol. 250, p. 446–476, 2013.
- [166] J.-W. He, R. Glowinski, R. Metcalfe, A. Nordlander et J. Periaux, “Active control and drag optimization for flow past a circular cylinder : I. oscillatory cylinder rotation,” *Journal of Computational Physics*, vol. 163, n^o. 1, p. 83–117, 2000.
- [167] M. Bergmann et A. Iollo, “Modeling and simulation of fish-like swimming,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n^o. 2, p. 329–348, 2011.

- [168] R. D. Henderson, “Nonlinear dynamics and pattern formation in turbulent wake transition,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 352, p. 65–112, 1997.
- [169] J. A. Wright et R. W. Smith, “An edge-based method for the incompressible navier–stokes equations on polygonal meshes,” *Journal of Computational Physics*, vol. 169, n^o. 1, p. 24–43, 2001.
- [170] D. Russell et Z. J. Wang, “A cartesian grid method for modeling multiple moving objects in 2d incompressible viscous flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 191, n^o. 1, p. 177–205, 2003.
- [171] R. Mittal, “A fourier–chebyshev spectral collocation method for simulating flow past spheres and spheroids,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 30, n^o. 7, p. 921–937, 1999.
- [172] P. Bagchi, M. Ha et S. Balachandar, “Direct numerical simulation of flow and heat transfer from a sphere in a uniform cross-flow,” *J. Fluids Eng.*, vol. 123, n^o. 2, p. 347–358, 2001.
- [173] S. Marella, S. Krishnan, H. Liu et H. Udaykumar, “Sharp interface cartesian grid method i : an easily implemented technique for 3d moving boundary computations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 210, n^o. 1, p. 1–31, 2005.
- [174] H. Zhang, B. Xiong, X. An, C. Ke et G. Wei, “Prediction on drag force and heat transfer of spheroids in supercritical water : A pr-dns study,” *Powder Technology*, vol. 342, p. 99–107, 2019.
- [175] S. Golshan, P. Munch, R. Gassmöller, M. Kronbichler et B. Blais, “Lethe-dem : An open-source parallel discrete element solver with load balancing,” *Computational Particle Mechanics*, p. 1–20, 2022.
- [176] 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^o. 7, p. 1964–1973, 2019. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cjce.23501>
- [177] S. Kriebitzsch, M. van der Hoef et J. Kuipers, “Fully resolved simulation of a gas-fluidized bed : A critical test of dem models,” *Chemical Engineering Science*, vol. 91, p. 1–4, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250912007294>
- [178] M. Uhlmann, “An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 209, n^o. 2, p. 448–476, 2005. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105001385>

- [179] S. Kriebitzsch, “Direct numerical simulation of dense gas-solids flows,” Thèse de doctorat, Chemical Engineering and Chemistry, 2011.
- [180] G. T. Nguyen, E. L. Chan, T. Tsuji, T. Tanaka et K. Washino, “Resolved cfd–dem coupling simulation using volume penalisation method,” *Advanced Powder Technology*, vol. 32, n°. 1, p. 225–236, 2021. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921883120305410>
- [181] K. Washino, E. L. Chan, T. Tsujimoto, T. Tsuji et T. Tanaka, “Development of resolved cfd–dem coupling model for three-phase flows with non-spherical particles,” *Chemical Engineering Science*, vol. 267, p. 118335, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250922009204>
- [182] A. A. Shirgaonkar, M. A. MacIver et N. A. Patankar, “A new mathematical formulation and fast algorithm for fully resolved simulation of self-propulsion,” *Journal of Computational Physics*, vol. 228, n°. 7, p. 2366–2390, 2009. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108006311>
- [183] A. Hager, C. Kloss, S. Pirker et C. Goniva, “Parallel resolved open source cfd-dem : method, validation and application,” *The Journal of Computational Multiphase Flows*, vol. 6, n°. 1, p. 13–27, 2014.
- [184] O. OpenCFD, “The open source cfd toolbox,” *User Guide, OpenCFD Ltd*, vol. 770, 2009. [En ligne]. Disponible : www.openfoam.com
- [185] LIGGGHTS, “Lammps improved for general granular and granular heat transfer simulations,” 2011. [En ligne]. Disponible : www.liggghts.com
- [186] L. Ramírez, X. Nogueira, P. Ouro, F. Navarrina, S. Khelladi et I. Colominas, “A higher-order chimera method for finite volume schemes,” *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 25, n°. 3, p. 691–706, 2018.
- [187] J. Yang et E. Balaras, “An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries,” *Journal of Computational Physics*, vol. 215, n°. 1, p. 12–40, 2006.
- [188] N. Hori, M. E. Rosti et S. Takagi, “An eulerian-based immersed boundary method for particle suspensions with implicit lubrication model,” *Computers Fluids*, vol. 236, p. 105278, 2022. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793021003716>
- [189] J. A. Simeonov et J. Calantoni, “Modeling mechanical contact and lubrication in direct numerical simulations of colliding particles,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 46, p. 38–53, 2012. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932212000936>

- [190] A. Hay, S. Etienne, D. Pelletier et A. Garon, “Hp-Adaptive time integration based on the BDF for viscous flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 291, p. 151–176, jun 2015. [En ligne]. Disponible : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.03.022><https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115001692?via=ihub>
- [191] I. Ramière et T. Helfer, “Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 70, n° 9, p. 2210–2226, 2015.
- [192] C. Lemaréchal, “Une méthode de résolution de certains systèmes non linéaires bien posés,” *CR Acad. Sci. Paris, sér. A*, vol. 272, p. 605–607, 1971.
- [193] C. R. Dohrmann et P. B. Bochev, “A stabilized finite element method for the stokes problem based on polynomial pressure projections,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 46, n° 2, p. 183–201, 2004.
- [194] C. Thieulot et W. Bangerth, “On the choice of finite element for applications in geodynamics,” *Solid Earth*, vol. 13, n° 1, p. 229–249, 2022.
- [195] F. Ilinca et J.-F. Hétu, “Numerical simulation of fluid–solid interaction using an immersed boundary finite element method,” *Computers & Fluids*, vol. 59, p. 31–43, 2012. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579301200062X>
- [196] J. Deng, “Étude expérimentale des interactions entre deux particules sphériques, relâchées dans l’eau stagnante,” Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal, April 2022. [En ligne]. Disponible : <https://publications.polymtl.ca/10269/>
- [197] N.-S. Cheng, “Comparison of formulas for drag coefficient and settling velocity of spherical particles,” *Powder Technology*, vol. 189, n° 3, p. 395–398, 2009. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591008003719>
- [198] E. Konstantinidis, “Apparent and effective drag for circular cylinders oscillating transverse to a free stream,” *Journal of Fluids and Structures*, vol. 39, p. 418–426, 2013.
- [199] A. Placzek, J.-F. Sigrist et A. Hamdouni, “Numerical simulation of an oscillating cylinder in a cross-flow at low reynolds number : Forced and free oscillations,” *Computers & Fluids*, vol. 38, n° 1, p. 80–100, 2009.
- [200] A. Boycott, “Sedimentation of blood corpuscles,” *Nature*, vol. 104, n° 2621, p. 532–532, 1920.
- [201] S. Ergun, “Fluid flow through packed columns,” *Chem. Eng. Prog.*, vol. 48, n° 2, p. 89–94, 1952.
- [202] R. Di Felice, “The voidage function for fluid-particle interaction systems,” *International journal of multiphase flow*, vol. 20, n° 1, p. 153–159, 1994.

- [203] F. Marchelli et R. D. Felice, “An experimental assessment of fluid-solid drag models based on the pressure drop in bidisperse fixed beds,” *International Journal of Multiphase Flow*, p. 104513, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932223001349>
- [204] C. Béguin, Pelletier et S. Étienne, “Void fraction influence on added mass in a bubbly flow,” *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, vol. 56, p. 28–45, 2016. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997754615001272>
- [205] M. Smoluchowski, *Über die Wechselwirkung von Kugeln die sich in einer zähen Flüssigkeit bewegen*. Akad. Umiejętności, 1911.
- [206] J. Happel et H. Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics : with special applications to particulate media*. Springer Science & Business Media, 1983, vol. 1.
- [207] G. Eveson, E. Hall et S. Ward, “Interaction between two equal-sized equal-settling spheres moving through a viscous liquid,” *British Journal of Applied Physics*, vol. 10, n^o. 1, p. 43, 1959.
- [208] H. Faxen, “Die bewegung einer starren kugel langs der achse eines mit zäher flüssigkeit gefüllten rohres,” *Arkiv for Matemetik Astronomi och Fysik*, vol. 17, p. 1–28, 1923.
- [209] R. Gatignol, “The faxén formulae for a rigid particle in an unsteady non-uniform stokes flow,” *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, vol. 2, n^o. 2, p. 143–160, 1983.
- [210] A. M. Ardekani et R. H. Rangel, “Unsteady motion of two solid spheres in Stokes flow,” *Physics of Fluids*, vol. 18, n^o. 10, 10 2006, 103306. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1063/1.2363351>
- [211] C.-A. Daunais, L. Barbeau et B. Blais, “An extensive study of shear thinning flow around a spherical particle for power-law and carreau fluids,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 311, p. 104951, 2023.
- [212] M. D. McKay, R. J. Beckman et W. J. Conover, “A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code,” *Technometrics*, vol. 42, n^o. 1, p. 55–61, 2000.
- [213] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow*. " O'Reilly Media, Inc.", 2022.
- [214] X. Glorot et Y. Bengio, “Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks,” dans *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. JMLR Workshop and Conference Proceedings, 2010, p. 249–256.

- [215] F. Candelier, R. Mehaddi, B. Mehlig et J. Magnaudet, “Second-order inertial forces and torques on a sphere in a viscous steady linear flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 954, p. A25, 2023.
- [216] P. A. Cundall et O. D. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *Geotechnique*, vol. 29, n^o. 1, p. 47–65, 1979.
- [217] M. Ben Salem et B. Oesterle, “A shear flow around a spinning sphere : Numerical study at moderate reynolds numbers,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 24, n^o. 4, p. 563–585, 1998. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932297000827>
- [218] L. Barbeau, “Pair of particles sedimentation rom,” 2023. [En ligne]. Disponible : https://github.com/lethe-cfd/particle_pair_sedimentation_dynamic
- [219] V. O. Ferreira, T. E. Geitani, D. Silva, B. Blais et G. C. Lopes, “In-depth validation of unresolved cfd-dem simulations of liquid fluidized beds,” *Powder Technology*, vol. 426, p. 118652, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591023004369>
- [220] J. Brown, “Efficient nonlinear solvers for nodal high-order finite elements in 3d,” *Journal of Scientific Computing*, vol. 45, p. 48–63, 2010.
- [221] F. Capizzano, “Turbulent wall model for immersed boundary methods,” *AIAA journal*, vol. 49, n^o. 11, p. 2367–2381, 2011.
- [222] R. Caulkin, X. Jia, M. Fairweather et R. A. Williams, “Predictions of porosity and fluid distribution through nonspherical-packed columns,” *AIChE Journal*, vol. 58, n^o. 5, p. 1503–1512, 2012. [En ligne]. Disponible : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.12691>
- [223] I. Mema et J. T. Padding, “Fluidization of elongated particles—effect of multi-particle correlations for drag, lift, and torque in cfd-dem,” *AIChE Journal*, vol. 67, n^o. 5, p. e17157, 2021. [En ligne]. Disponible : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.17157>
- [224] I. KIM, S. ELGHOBASHI et W. A. SIRIGNANO, “On the equation for spherical-particle motion : effect of reynolds and acceleration numbers,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 367, p. 221–253, 1998.
- [225] E. L. Paul, V. A. Atiemo-Obeng et S. M. Kresta, *Handbook of industrial mixing*. Wiley Online Library, 2004.
- [226] R. L. Bates, P. L. Fondy et R. R. Corpstein, “Examination of some geometric parameters of impeller power,” *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 2, n^o. 4, p. 310–314, 1963.

- [227] S. Nagata, *Mixing : principles and applications*. Halsted press, 1975.
- [228] S. Nagata, T. Tokoyama et H. Maeda, “Studies on the power requirement of paddle agitators in cylindrical vessels,” *Kagaku Kogaku*, vol. 20, n^o. 11, p. 582–592, 1956.
- [229] S. Hiraoka, N. Kamei, Y. Kato, Y. Tada, H.-G. Cheon et T. Yamaguchi, “Power correlation for pitched blade paddle impeller in agitated vessels with and without baffles,” *Kagaku Kogaku Ronbunshu*, vol. 23, n^o. 6, p. 969–975, 1997.
- [230] Y. Kato, Y. Tada, Y. Takeda, Y. Hirai et Y. Nagatsu, “Correlation of power consumption for propeller and pfaudler type impellers,” *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 42, n^o. 1, p. 6–9, 2009.
- [231] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow : Concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*. O’Reilly Media, Inc., 2019.
- [232] W. Suewatanakul, “A comparison of fault detection and classification using artificial neural networks with traditional methods,” Thèse de doctorat, 1993.
- [233] J. C. MacMurray et D. Himmelblau, “Modeling and control of a packed distillation column using artificial neural networks,” *Computers & chemical engineering*, vol. 19, n^o. 10, p. 1077–1088, 1995.
- [234] M. Rostamizadeh, D. Boffito, G. Patience et A. Taeb, “Neural network modeling of methanol to propylene over p-zsm-5 in a fluidized bed,” *J Chem Proc Engg*, vol. 1, p. 1–8, 2014.
- [235] K. Singh, K. Shenoy, A. Mahendra et S. Ghosh, “Artificial neural network based modeling of head and power characteristics of pump-mixer,” *Chemical Engineering Science*, vol. 59, n^o. 14, p. 2937–2945, 2004.
- [236] R. Hemrajani et G. Tatterson, *Mechanically Stirred Vessels*, 01 2004, p. 345–390.
- [237] D. Chapple, S. Kresta, A. Wall et A. Afacan, “The effect of impeller and tank geometry on power number for a pitched blade turbine,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 80, n^o. 4, p. 364–372, 2002.
- [238] K. Rutherford, S. Mahmoudi, K. Lee et M. Yianneskis, “The influence of rushton impeller blade and disk thickness on the mixing characteristics of stirred vessels,” *Chemical engineering research & design*, vol. 74, n^o. 3, p. 369–378, 1996.
- [239] C. Geuzaine et J.-F. Remacle, “Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 79, n^o. 11, p. 1309–1331, 2009.

- [240] B. Delacroix, A. Bouarab, L. Fradette, F. Bertrand et B. Blais, “Simulation of granular flow in a rotating frame of reference using the discrete element method,” *Powder Technology*, vol. 369, p. 146–161, 2020.
- [241] M. Zakaria, M. Al-Shebany et S. Sarhan, “Artificial neural network : a brief overview,” *International Journal of Engineering Research and Applications*, vol. 4, n^o. 2, p. 7–12, 2014.
- [242] A. Gökhan, C. O. Güzeller et M. T. Eser, “The effect of the normalization method used in different sample sizes on the success of artificial neural network model,” *International Journal of Assessment Tools in Education*, vol. 6, n^o. 2, p. 170–192, 2019.
- [243] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg *et al.*, “Scikit-learn : Machine learning in python,” *the Journal of machine Learning research*, vol. 12, p. 2825–2830, 2011.
- [244] V. Bibeau, “lethe-cfd/mixing-ann,” 2022. [En ligne]. Disponible : <https://github.com/lethe-cfd/mixing-ann>
- [245] H. Furukawa, Y. Kato, Y. Inoue, T. Kato, Y. Tada et S. Hashimoto, “Correlation of power consumption for several kinds of mixing impellers,” *International Journal of Chemical Engineering*, vol. 2012, 2012.
- [246] F. R. Hama, J. D. Long et J. C. Hegarty, “On transition from laminar to turbulent flow,” *Journal of Applied Physics*, vol. 28, n^o. 4, p. 388–394, 1957.
- [247] P. A. Tanguy et F. Thibault, “Power consumption in the turbulent regime for a coaxial mixer,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 80, n^o. 4, p. 601–603, 2002.
- [248] H. Brewster, *Fluid Mechanics*. Oxford Book Company, 2009.
- [249] T. Abbasov, S. Herdem et A. Memnedov, “On the drag force of a solid sphere in power law flow model,” *Mathematical and Computational Applications*, vol. 4, n^o. 2, p. 161–167, 1999.
- [250] F. Morrison, *Understanding Rheology*, ser. Raymond F. Boyer Library Collection. Oxford University Press, 2001.
- [251] K. Adachi, N. Yoshioka et K. Yamamoto, “On non-newtonian flow past a sphere,” *Chemical Engineering Science*, vol. 28, n^o. 11, p. 2033–2043, 1973.
- [252] A. Acharya, R. A. Mashelkar et J. Ulbrecht, “Flow of inelastic and viscoelastic fluids past a sphere,” *Rheologica Acta*, vol. 15, n^o. 9, p. 454–470, sep 1976.
- [253] M. A. Lockyer, J. M. Davies et T. E. R. Jones, *The Importance of Rheology in the Determination of the Carrying Capacity of Oil-Drilling Fluids*. Boston, MA : Springer US, 1980, p. 127–132.

- [254] G. Dazhi et R. Tanner, “The drag on a sphere in a power-law fluid,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 17, p. 1–12, 1985.
- [255] Y. Kawase et M. Moo-Young, “Approximate solutions for power-law fluid flow past a particle at low reynolds numbers,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 21, n°. 2, p. 167–177, jan 1986.
- [256] M. Renaud, E. Mauret et R. P. Chhabra, “Power-law fluid flow over a sphere : Average shear rate and drag coefficient,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 82, n°. 5, p. 1066–1070, may 2004.
- [257] R. P. Chhabra et P. H. T. Uhlherr, “Sphere motion through non-newtonian fluids at high reynolds number,” *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 58, n°. 1, p. 124–128, feb 1980.
- [258] M. Bush et N. Phan-Thien, “Drag force on a sphere in creeping motion throug a carreau model fluid,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 16, n°. 3, p. 303–313, 1984.
- [259] J. Hsu, S. Yeh et S. Tseng, “Drag on a sphere in a spherical dispersion containing carreau fluid,” *Powder Technology*, vol. 188, n°. 1, p. 34–41, dec 2008.
- [260] T. Tezduyar et S. Sathe, “Stabilization parameters in supg and pspg formulations,” *Journal of Computational and Applied Mechanics*, n°. 4, p. 71–88, 2003.
- [261] “Viscosity for non-newtonian fluids,” <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/node297.htm>, Online ; accessed 2 September 2022.
- [262] G. W. Griffiths, *Numerical Analysis Using R*. Cambridge University Press, avr. 2016.
- [263] P. J. Roache, *Verification and validation in computational science and engineering*. Hermosapublishers, 1998.
- [264] H. Schlichting et J. Kestin, *Boundary layer theory*. Springer, 1961, vol. 121.
- [265] P. P. Brown et D. F. Lawler, “Sphere drag and settling velocity revisited,” *Journal of Environmental Engineering*, vol. 129, p. 222–231, 2003.
- [266] H. Brauer et D. Mewes, “Strömungswiderstand sowie stationärer und instationärer stoff- und wärmeübergang an kugeln,” *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 44, n°. 13, p. 865–868, jul 1972.
- [267] F. F. Abraham, “Functional dependence of drag coefficient of a sphere on reynolds number,” *Physics of Fluids*, vol. 13, n°. 8, p. 2194, 1970.
- [268] J. Wolberg, *Data Analysis Using the Method of Least Squares*. Springer, 2006.

- [269] D. Graham et T. Jones, “Settling and transport of spherical particles in power-law fluids at finite reynolds number,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 54, p. 465–488, aug 1994.
- [270] I. Machač et B. Šiška, “Calculation of terminal falling velocity of spherical particles moving through polymer solutions using a power-law viscosity model,” *Scientific papers of the University of Pardubice*, n°. 25, p. 117–126, 2019.
- [271] R. P. C. Doayun Song, Rakesh K., “Wall effect on a spherical particle settling along the axis of cylindrical tubes filled with carreau model fluids,” 2011.
- [272] [dataset] et C.-A. Daunais, “Shear thinning flow past a sphere drag coefficients results (Power-law and Carreau),” https://github.com/lethe-cfd/lethe-utils/tree/master/cases/non_newtonian/sphere, 2022.

ANNEXE A STABILITY OF THE SCHEME FOR A LOW PARTICLE TO FLUID DENSITY RATIO

This appendix presents the floating of a lone particle with a particle-to-fluid density ratio of 0.01 to highlight the stability of the coupling scheme. The domain is a $90 \times 90 \times 90$ cm tank. The particle has a density of 0.01 g cm^{-3} , the diameter of the particle $d_p = 1.0 \text{ cm}$, and is released 10 cm from the bottom of the tank in the middle of the tank. The fluid has a density of 1 g cm^{-3} and a viscosity of 0.075 Pa s . The gravity is set to 1000 cm s^{-2} . The particle's terminal velocity is $v_f = 26.19 \text{ cm s}^{-1}$, giving a terminal Reynolds number of 34.9. The results for two discretization sizes of Q2Q1 elements are shown, first a mesh with $\Delta x = \frac{d_p}{17}$ and second, a mesh with $\Delta x = \frac{d_p}{34}$. The mesh is adapted using the Kelly error estimator [94] combined with a spherical refinement zone around each particle of $1.3d_p$. The time step is $\Delta t = 0.001 \text{ s}$ using a BDF2 scheme. Figure A.1 presents the velocity compared to the terminal velocity. These results demonstrate that the scheme is stable even for a very low particle-to-fluid density ratio and converges toward the expected terminal velocity.

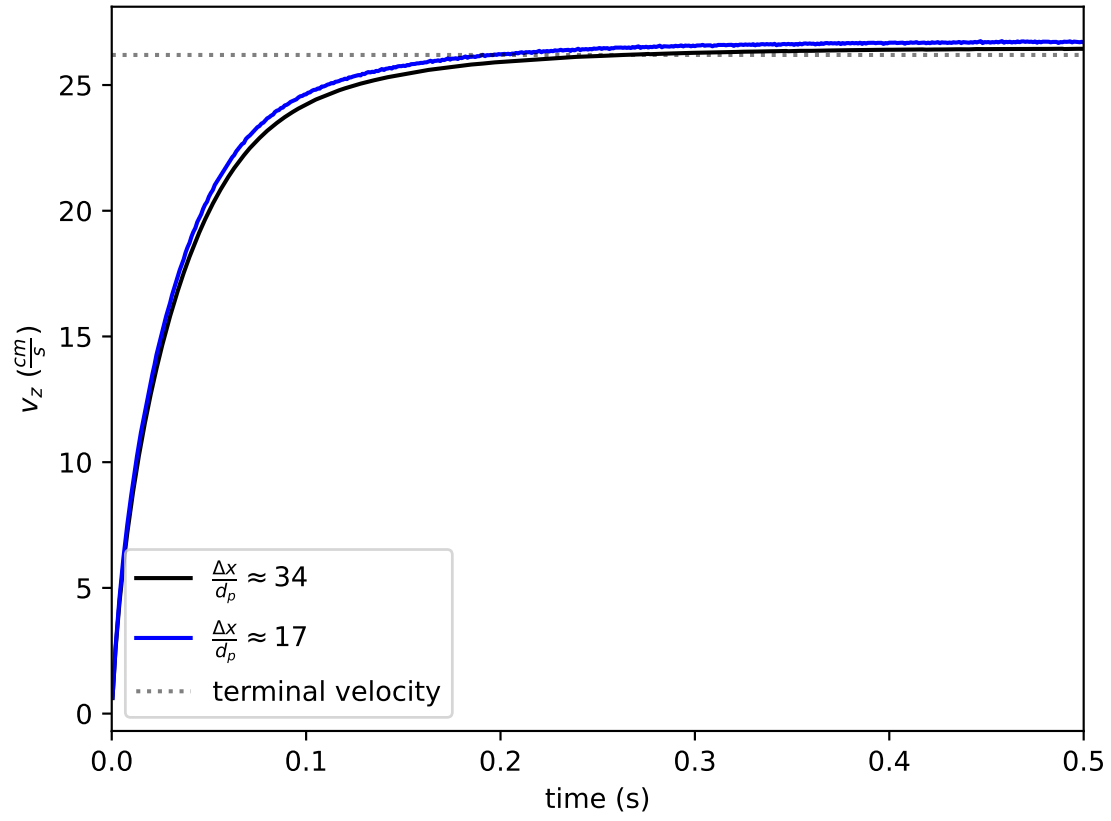


Figure A.1 Vertical velocity of a lone particle floating compared to its terminal velocity. The particle-to-fluid density ratio is 0.01, highlighting the stability of the scheme for a very low particle-to-fluid density ratio.

ANNEXE B FORCE MODELS DETAILS

This appendix presents each of the force models used in the ROM. Note that the drag force, lift force, and induce torque models are presented in Section 7.3.

B.0.1 Drag force

The drag force applied to the particle is defined by the ANN regression. The regression is performed on data scaled by the drag coefficient of a lone particle (see Equation (7.1)), implying that it must be multiplied back by the drag coefficient of a lone particle (Cd_0).

$$Cd = Cd_0(\text{Re})Cd_{ANN}(\text{Re}, r^*, \theta) \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{f}_i^d = -\frac{1}{8}\rho_f\pi d_p^2 Cd \mathbf{v}_i ||\mathbf{v}_i|| \quad (\text{B.2})$$

The resulting expression for drag correlation is too complex to detail here. For example, the resulting coefficient mapping as a function of the particle position relative to a reference particle for a given Reynolds number of 10 is presented in Figure B.1. Cd_{ANN}

B.0.2 Lift force

The lift force applied to the particle is defined by the ANN regression. The regression is performed on data scaled by the drag coefficient of a lone particle (see Equation (7.1)), implying that it must be multiplied back by the drag coefficient of a lone particle (Cd_0).

$$Cl = Cd_0(\text{Re})Cl_{ANN}(\text{Re}, r^*, \theta) \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}_i}{||\mathbf{v}_i||^2} \mathbf{v}_i \quad (\text{B.4})$$

$$\mathbf{f}_i^l = \frac{1}{8}\rho_f\pi d_p^2 Cl ||\mathbf{v}_i||^2 \frac{\mathbf{r}_\perp}{||\mathbf{r}_\perp||} \quad (\text{B.5})$$

The resulting expression for lift correlation is too complex to detail here. For example, the resulting coefficient mapping as a function of the particle position relative to a reference particle for a given Reynolds number of 10 is presented in Figure B.2.

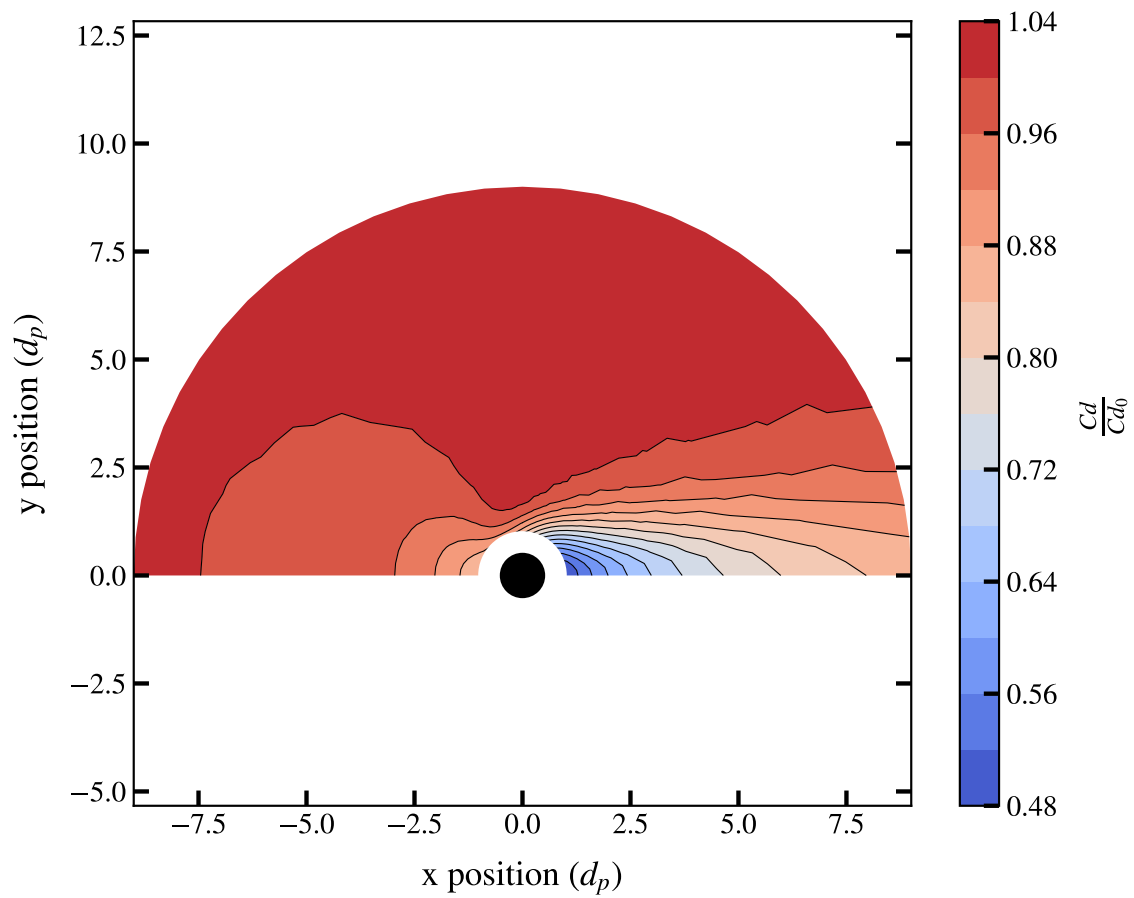


Figure B.1 Drag coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. In this figure, the velocity of the particle is negative in x.

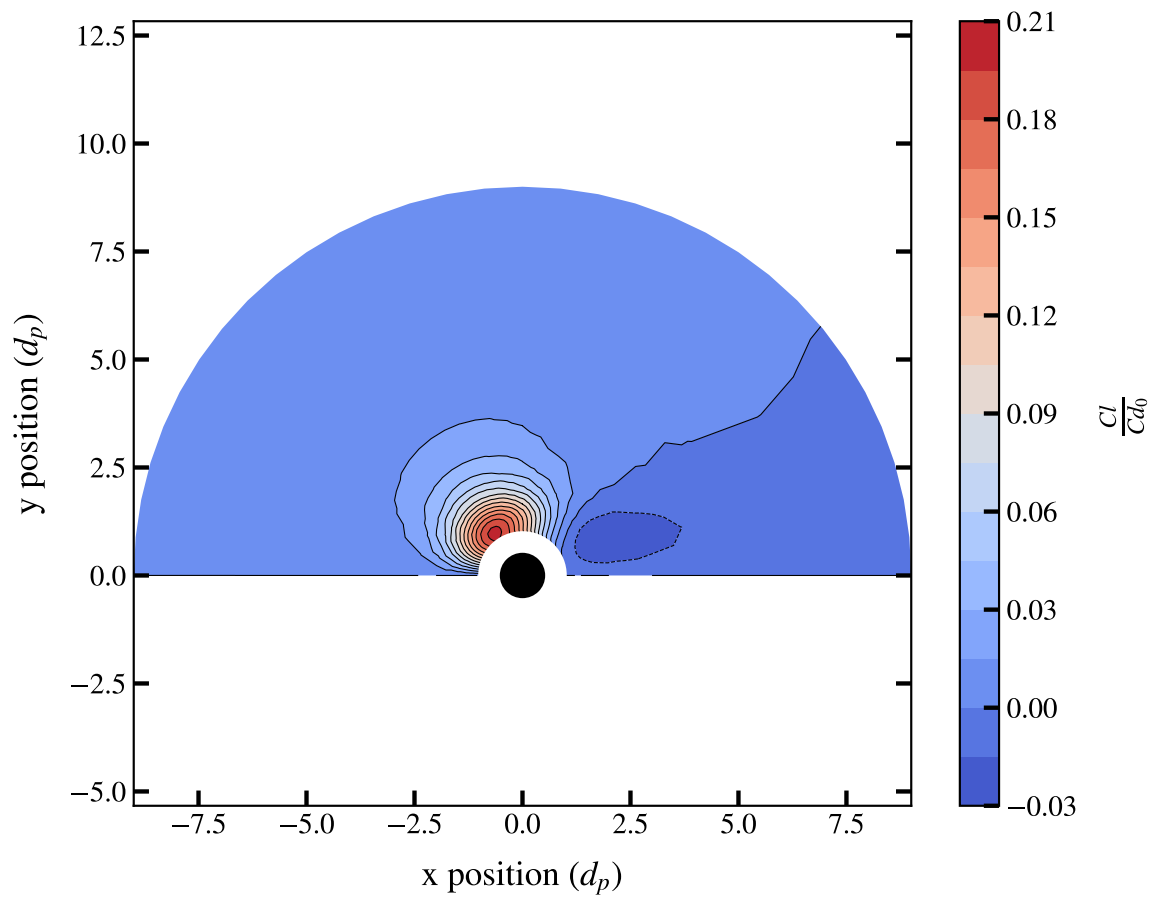


Figure B.2 Lift coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. In this figure, the velocity of the particle is negative in x.

B.0.3 History force

The history force model use is defined based on the work of Parmar *et al.* [64] and Dorgan *et al.* [63], both works are based on the work of Mei *et al.* [62]. The history force is decomposed into two components the near proper history $\mathbf{f}_{i,near}^h$ and the improper history $\mathbf{f}_{i,imp}^h$ that contains the singularity of the history kernel. Here, we drop the far-history terms and only conserve the near-history terms since the evaluation cost of the full history in the case of two particles is not prohibitive.

$$\mathbf{f}_i^h = \mathbf{f}_{i,imp}^h + \mathbf{f}_{i,near}^h \quad (\text{B.6})$$

The two terms are defined as follows. The subscript $_r$ refers to the particle state at the initial time step. Since the particles are at rest at the initial time step, a Reynolds number of $1e - 3Re_{v_f}$ is used to evaluate the initial particle state. Here, v_f is the terminal velocity

of the particle.

$$c_1 = 2.5 \quad (\text{B.7})$$

$$c_2 = 0.126 \quad (\text{B.8})$$

$$gH = \frac{0.75 + c_2 Re}{Re} \quad (\text{B.9})$$

$$t_r = \frac{d_p^2 \rho}{4\mu} \left(\frac{256}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} gH_r^2 \quad (\text{B.10})$$

$$m_r = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} d_p^3 \rho_f \left(\frac{256}{\pi} \right)^{\frac{1}{6}} gH_r \quad (\text{B.11})$$

$$l_r = \frac{d_p}{2} \quad (\text{B.12})$$

$$r_i = \left(\frac{gH_r}{gH} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{B.13})$$

$$\Delta t^* = \Delta t / t_r \quad (\text{B.14})$$

$$\gamma = r_i^{\frac{1}{3}} \Delta t^{*\frac{1}{4}} \quad (\text{B.15})$$

$$K_0 = \frac{2}{9} r_i^{-\frac{2}{3}} (-0.3722\gamma + 12.16\gamma^2 - 6.488\gamma^3) \quad (\text{B.16})$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u} \frac{t_r}{l_r} \quad (\text{B.17})$$

$$\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i \frac{t_r}{l_r} \quad (\text{B.18})$$

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{u}^*}{d\tau^*} - \frac{d\mathbf{v}_i^*}{d\tau^*} \quad (\text{B.19})$$

$$\mathbf{f}_{i,imp}^h = K_0 \mathbf{a}|_{t^*} \frac{m_r l_r}{t_r^2} \quad (\text{B.20})$$

$$K_i(t^*, \tau^*) = \left((t^* - \tau^*)^{\frac{1}{2c_1}} + r_i(t^* - \tau^*) \right)^{-c_1} \quad (\text{B.21})$$

$$\mathbf{f}_{i,near}^h = \frac{m_r l_r}{t_r^2} \int_0^{t^* - \Delta t^*} K_i(t^*, \tau^*) \mathbf{a}|_{\tau^*} d\tau^* \quad (\text{B.22})$$

The integral that defines $\mathbf{f}_{i,near}^h$ is evaluated using the trapezoidal rule over the history of the particle acceleration. The constant c_1 and c_2 are taken from Kim *et al.* [224] works and seem to agree more with the simulations results than other values found in the literature.

B.0.4 Virtual Mass and Meshchersky forces

The virtual mass force for a pair of particles is derived from the work of Béguin *et al.* [204]. In a pair of particles with index 0 and 1, the virtual mass force on the particle 0 ($\mathbf{f}_0^v$) is defined as follows.

$$C_{m,\perp,\perp} = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{3}{256} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^6 + \frac{3}{256} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^8 + \frac{27}{4096} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^{10} \right] \quad (\text{B.23})$$

$$C_{m,\parallel,\parallel} = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{3}{64} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^6 + \frac{9}{256} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^8 + \frac{9}{512} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^{10} \right] \quad (\text{B.24})$$

$$C_{m,\perp,\perp}^i = \frac{1}{2} \left[\frac{3}{16} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^3 + \frac{3}{4096} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^9 + \frac{3}{2048} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^{11} \right] \quad (\text{B.25})$$

$$C_{m,\parallel,\parallel}^i = -\frac{1}{2} \left[\frac{3}{8} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^3 + \frac{3}{512} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^9 + \frac{9}{1024} \left(\frac{d_p}{\|\mathbf{r}\|} \right)^{11} \right] \quad (\text{B.26})$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_x^2 & r_x r_y & r_x r_z \\ r_y r_x & r_y^2 & r_y r_z \\ r_z r_x & r_z r_y & r_z^2 \end{bmatrix} \quad (\text{B.27})$$

$$\mathbf{M} = -\rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} \left[(C_{m,\parallel,\parallel} - C_{m,\perp,\perp}) \mathbf{R} - C_{m,\perp,\perp} \boldsymbol{\delta}_{ij} \right] \quad (\text{B.28})$$

$$\mathbf{M}^i = -\rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} \left[(C_{m,\parallel,\parallel}^i - C_{m,\perp,\perp}^i) \mathbf{R} - C_{m,\perp,\perp}^i \boldsymbol{\delta}_{ij} \right] \quad (\text{B.29})$$

$$\mathbf{f}_0^v = \mathbf{M} \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} + \mathbf{M}^i \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} \quad (\text{B.30})$$

In these equations, the $\boldsymbol{\delta}_{ij}$ is the Kronecker delta, and the variables r_x , r_y and r_z are the three spacial components of the vector $\mathbf{r}$. These coefficients are obtained by keeping only the first three terms of the infinite series that define these coefficients.

The Meshchersky force represents the force due to the virtual masse force coefficient variation. It is defined in the work of Zoghلامي *et al.* [68]. Using the previously defined variables for the virtual masse force. The Meshchersky force is defined as follows:

$$\mathbf{f}_0^m = \frac{d\mathbf{M}}{dt} \mathbf{v}_0 + \frac{d\mathbf{M}^i}{dt} \mathbf{v}_1 \quad (\text{B.31})$$

B.0.5 Lubrication force

The lubrication force model is defined using the model of Cooley *et al.* and O'Neil *et al.* [78, 79]. The implementation is based on the work of Simeonov *et al.* [189].

$$\epsilon = 2 \frac{\|\mathbf{r}\| - \frac{d_{p_i} + d_{p_j}}{2}}{d_{p_i}} \quad (\text{B.32})$$

$$\kappa = \frac{d_{p_i}}{d_{p_j}} \quad (\text{B.33})$$

$$\epsilon_{max} = 4 \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbf{e}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \quad (\text{B.35})$$

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i \quad (\text{B.36})$$

$$\boldsymbol{\omega}_{ij} = \boldsymbol{\omega}_j + \boldsymbol{\omega}_i \quad (\text{B.37})$$

$$\mathbf{f}_i^{lub^n} = \left(\frac{\kappa^2}{(1+\kappa)^2} \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon_{max}} \right) - \frac{\kappa(1+7\kappa+\kappa^2)}{5(1+\kappa)^3} \ln \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_{max}} \right) \right) \quad (\text{B.38})$$

$$\begin{aligned} & \cdot 3\pi\mu d_{p_i} \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij} \\ \mathbf{f}_i^{lub^{tt}} = & - \left(\frac{4\kappa(2+\kappa+2\kappa^2)}{15(1+\kappa)^3} \ln \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_{max}} \right) \right) \\ & \cdot 3\pi\mu d_{p_i} (\mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij}) \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

$$\mathbf{f}_i^{lub^{tr}} = 1.5\pi\mu d_{p_i}^2 \frac{2\kappa^2}{15(1+\kappa)^2} \ln \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_{max}} \right) (\boldsymbol{\omega}_{ij} + 4\kappa^{-1}\boldsymbol{\omega}_i + 4\kappa\boldsymbol{\omega}_j) \mathbf{e}_{ij} \quad (\text{B.40})$$

$$\mathbf{f}_i^{lub^*} = \mathbf{f}_i^{lub^n} + \mathbf{f}_i^{lub^{tt}} + \mathbf{f}_i^{lub^{tr}} \quad (\text{B.41})$$

$$\mathbf{T}_i^{lub^{tt}} = -2\pi\mu d_{p_i}^2 \left(\frac{\kappa(4+\kappa)}{10(1+\kappa)^2} \ln \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_{max}} \right) \right) \mathbf{e}_{ij} \times \mathbf{v}_{ij} \quad (\text{B.42})$$

$$\mathbf{T}_i^{lub^{tr}} = \pi\mu d_{p_i}^3 \frac{2\kappa}{5(1+\kappa)^2} \ln \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_{max}} \right) \left(\left(\boldsymbol{\omega}_i + \frac{\kappa\boldsymbol{\omega}_j}{4} \right) - \left(\boldsymbol{\omega}_i + \frac{\kappa\boldsymbol{\omega}_j}{4} \right) \cdot \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ij} \right) \quad (\text{B.43})$$

$$\mathbf{T}_i^{lub^*} = \mathbf{T}_i^{lub^{tt}} + \mathbf{T}_i^{lub^{tr}} \quad (\text{B.44})$$

To avoid the singularity when two particles are in contact in the current models, we also limit the dimensionless minimal interparticle distance (ϵ) to ϵ_{min} . This model is valid in the limit of creeping flow, meaning the gap between the particles must be sufficiently small to obtain accurate results. For this reason, we add a threshold to limit the application of this force model when the interparticle distance is above a given threshold (ϵ_{max}). Outside of this threshold, the lubrication force is 0. To avoid a jump in the force applied to the particle, we subtract the lubrication force associated with the maximal gap (ϵ_{max}), which gives the following model.

$$\mathbf{f}_i^{lub} = \begin{cases} 0 & \epsilon > \epsilon_{max} \\ \mathbf{f}_i^{lub*} & \epsilon \leq \epsilon_{max} \text{ \& } \epsilon > \epsilon_{min} \\ \mathbf{f}_i^{lub*}|_{\epsilon=\epsilon_{min}} & \epsilon \leq \epsilon_{min} \end{cases} \quad (\text{B.45})$$

$$\mathbf{T}_i^{lub} = \begin{cases} 0 & \epsilon > \epsilon_{max} \\ \mathbf{T}_i^{lub*} & \epsilon \leq \epsilon_{max} \text{ \& } \epsilon > \epsilon_{min} \\ \mathbf{T}_i^{lub*}|_{\epsilon=\epsilon_{min}} & \epsilon \leq \epsilon_{min} \end{cases} \quad (\text{B.46})$$

In this paper, $\epsilon_{max} = 4$ and $\epsilon_{min} = \frac{1}{32}$. ϵ_{min} can be interpreted as a measure of surface roughness. $\epsilon_{max} = 2d_p$ was obtained through calibration of the contact lubrication dynamics of the Ten Cate experiments.

B.0.6 Magnus force

The Magnus lift is obtained using the correlation proposed by Loth [53].

$$\Omega^* = \frac{||\boldsymbol{\omega}_i||d_p}{||\mathbf{u} - \mathbf{v}_i||} \quad (\text{B.47})$$

$$C_{l,\Omega} = 1 - [0.675 + 0.15(1 + \tanh(0.28(\Omega^* - 2)))] \quad (\text{B.48})$$

$$\mathbf{f}_i^{mag} = \frac{p_i}{8} d_p^3 \rho_f [C_{l,\Omega}(\mathbf{u} - \mathbf{v}_i) \times \boldsymbol{\omega}_i] \quad (\text{B.49})$$

B.0.7 Contact force

The contact force is derived from the linear contact model of Cundall *et al.* [216], and its implementation in Lethe [133].

$$l = ||\mathbf{r}|| - \frac{d_{p_i} + d_{p_j}}{2} \quad (\text{B.50})$$

$$\delta_n = \begin{cases} -l & l < 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{B.51})$$

$$\mathbf{v}_{ij} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} + (0.5d_p\boldsymbol{\omega}_0 + 0.5d_p\boldsymbol{\omega}_1) \times \frac{\mathbf{r}}{||\mathbf{r}||} \quad (\text{B.52})$$

$$\mathbf{v}_{rt} = \mathbf{v}_{ij} - \left(\mathbf{v}_{ij} \cdot \frac{\mathbf{r}}{||\mathbf{r}||} \right) \frac{\mathbf{r}}{||\mathbf{r}||} \quad (\text{B.53})$$

$$\boldsymbol{\delta}_t = \int_{t_{c0}}^t \mathbf{v}_{rt} dt \quad (\text{B.54})$$

$$r_e = \left(\frac{2}{d_{p0}} + \frac{2}{d_{p1}} \right)^{-1} \quad (\text{B.55})$$

$$m_e = \left(\frac{1}{m_0} + \frac{1}{m_1} \right)^{-1} \quad (\text{B.56})$$

$$Y_e = \left(\frac{1}{Y_0} + \frac{1}{Y_1} \right)^{-1} \quad (\text{B.57})$$

$$k_n = \frac{16}{15} \sqrt{r_e} Y_e \left(\frac{15m_e ||\mathbf{v}_{ij}|_{t_{c0}}||^2}{16\sqrt{r_e} Y_e} \right)^{\frac{1}{5}} \quad (\text{B.58})$$

$$c_n = \frac{-2\ln(e)}{\sqrt{(\ln(e))^2 + \pi^2}} \sqrt{m_e k_n} \quad (\text{B.59})$$

$$k_t = 0.4k_n \quad (\text{B.60})$$

$$c_t = \frac{-2\ln(e)}{\sqrt{(\ln(e))^2 + \pi^2}} \sqrt{m_e k_t} \quad (\text{B.61})$$

$$\mathbf{f}^{c_n} = - \left(k_n \delta_n + c_n \frac{d\delta_n}{dt} \right) \frac{\mathbf{r}}{||\mathbf{r}||} \quad (\text{B.62})$$

$$\mathbf{f}^{c_t^*} = -k_t \boldsymbol{\delta}_t - c_t \frac{d\boldsymbol{\delta}_t}{dt} \quad (\text{B.63})$$

$$\mathbf{f}^{c_t} = \begin{cases} \mathbf{f}^{c_t^*} & ||\mathbf{f}^{c_t^*}|| < \mu_c ||\mathbf{f}^{c_n}|| \\ \mathbf{f}^{c_t^*} \frac{||\mathbf{f}^{c_n}|| \mu_c}{||\mathbf{f}^{c_t^*}||} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{B.64})$$

$$\mathbf{f}^c = \mathbf{f}^{c_n} + \mathbf{f}^{c_t} \quad (\text{B.65})$$

In these equations, m_i is the mass of the particle i , Y_i is the Young's modulus of the particle, e is the effective restitution coefficient, μ_c is the contact friction coefficient, t_{c0} is the initial point in time where the particle contact. With this force, we can define the contact torques

as follows:

$$\mathbf{T}^c = \mathbf{f}^{c_t} \times \frac{\mathbf{r}d_p}{2||\mathbf{r}||} \quad (\text{B.66})$$

For all cases presented in the current work, the friction coefficient was set to 0, the restitution coefficient to 1, and the Young modulus to 10 MPa. The young modulus is small since increasing it didn't change the results but significantly reduced the time step needed to run the simulation.

B.0.8 Viscous torque

The viscous torque model comes from the work of Ben Salam *et al.* [217] and its implementation by Loth [53].

$$Re_\omega = \frac{d_p^2 \omega_i \rho_f}{\mu} \quad (\text{B.67})$$

$$C_v = 1 + \frac{5}{64\pi} Re_\omega^{0.6} \quad (\text{B.68})$$

$$\mathbf{T}^v = -\pi C_v d_p^3 \omega_i \mu \quad (\text{B.69})$$

We only use the low Reynolds value since the rotational Reynolds (Re_ω) in our case is sufficiently small. The fluid vorticity is neglected here since the bulk fluid velocity is assumed to be zero.

B.0.9 Induced torque

The induced torque applied to the particle is defined by the ANN regression. The regression is performed on data scaled by the drag coefficient of a lone particle (see Equation (7.1)), implying that it must be multiplied back by the drag coefficient of a lone particle (Cd_0).

$$Ct = Cd_0(\text{Re}) Ct_{ANN}(\text{Re}, r^*, \theta) \quad (\text{B.70})$$

$$\mathbf{n}_{v,r} = \mathbf{v}_i \times \mathbf{r} \quad (\text{B.71})$$

$$\mathbf{T}_{ij}^I = \frac{1}{16} \rho_f \pi d_p^3 Ct ||\mathbf{v}_i||^2 \frac{\mathbf{n}_{v,r}}{||\mathbf{n}_{v,r}||} \quad (\text{B.72})$$

The resulting expression for torque correlation is too complex to detail here. For example,

the resulting coefficient mapping as a function of the particle position relative to a reference particle for a given Reynolds number of 10 is presented in Figure B.3.

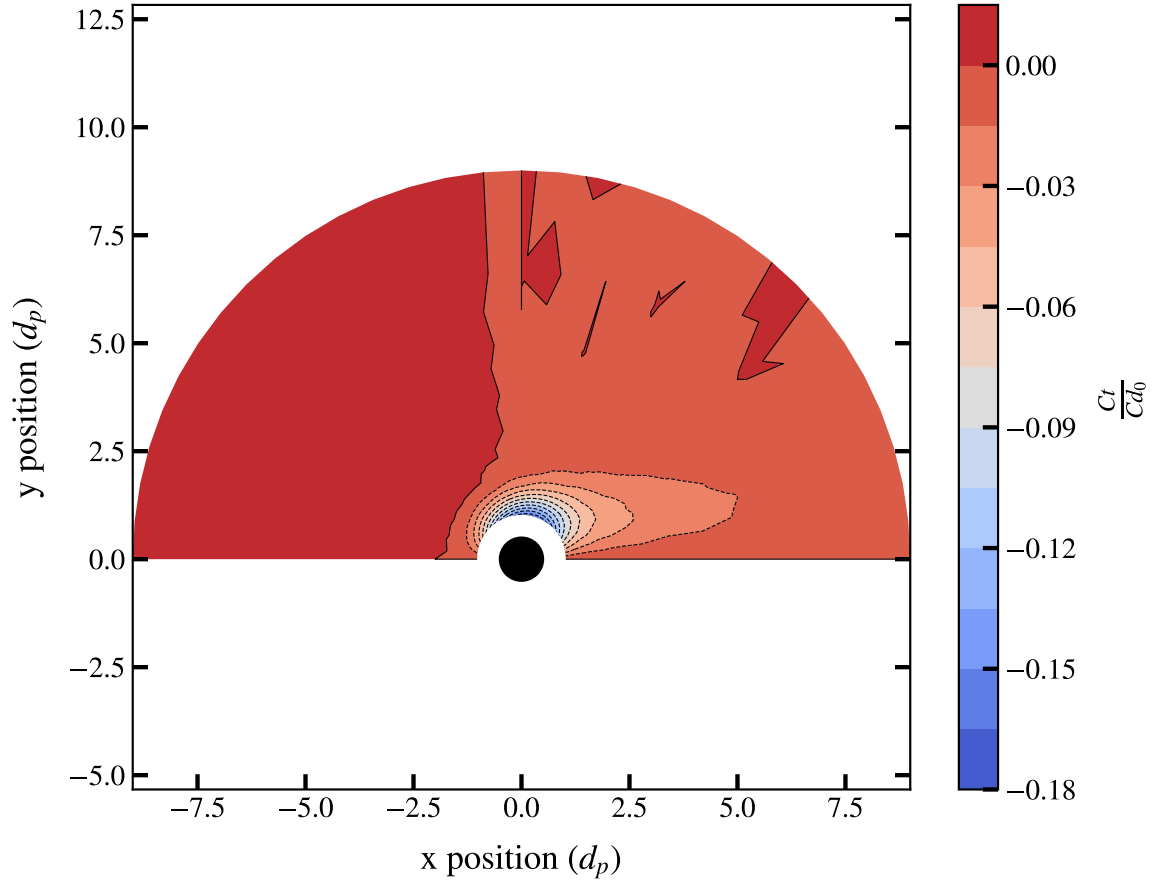


Figure B.3 Torque coefficient correction factor at a Reynolds number of 10. The velocity of the particle is assumed to be negative in x for in this figure

ANNEXE C FLUID RESPONSE TIME

Assuming the fluid flow response time (t) to reach a steady state after a perturbation of the flow is dependent on the following variable: $||\mathbf{v}||$, μ , ρ_f , d_p . The dimensional analysis leads to the following two dimensionless numbers if we choose the repeating variables to be μ , ρ_f , d_p .

$$\Pi_1 = \text{Re} = \frac{||\mathbf{v}||\rho_f d_p}{\mu} \quad (\text{C.1})$$

$$\Pi_2 = \frac{t\mu}{\rho_f d_p^2} = \frac{t}{t_f} \quad (\text{C.2})$$

These two numbers are the Reynolds number and the dimensionless time associated with the flow response time. Isolating the characteristic fluid time from the dimensionless time we get the $t_f = \frac{\rho_f d_p^2}{\mu}$.

ANNEXE D ARTICLE 4: ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO PREDICT THE POWER NUMBER OF AGITATED TANKS FED BY CFD SIMULATIONS

Valérie Bibeau, Lucka Barbeau, Daria Camilla Boffito, Bruno Blais

Contribution de Lucka Barbeau: Conservation des données ; méthodologie ; logiciels ; validation ; rédaction - révision et édition.

Publié dans The Canadian Journal of Chemical Engineering, volume 101, number 10, pages 5992-6002, January 26, 2023.

Abstract: The power consumption of the agitator is a critical variable to consider in the design of a mixing system. It is generally evaluated through a dimensionless number known as the power number N_p . Multiple empirical equations exist to calculate the power number based on the Reynolds number Re and dimensionless geometrical variables that characterize the tank, the impeller, and the height of the fluid. However, correlations perform poorly outside of the conditions in which they were established. We create a rich database of 100k computational fluid dynamics (CFD) simulations. We simulate paddle and pitched blade turbines in unbaffled tanks from Re 1 to 100 and use an artificial neural network (ANN) to create a robust and accurate predictor of the power number. We perform a mesh sensitivity analysis to verify the precision of the N_p values given by the CFD simulations. To sample the 100k mixers by their geometrical and physical properties, we use the Latin Hypercube Sampling (LHS) method. We then normalize the data with a MinMax transformation to put all features in the same scale and thus avoid bias during the ANN's training. Using a grid search cross-validation, we find the best architecture of the ANN that prevents overfitting and underfitting. Finally, we quantify the performance of the ANN by extracting 30% of the database, predicting the N_p using the ANN, and evaluating the mean absolute percentage error. The mean absolute error in the ANN prediction is 0.5% and its accuracy surpasses correlations even for untrained geometries.

D.1 Introduction

Mixing is one of the most important unit operations in chemical engineering. Applications such as homogenization, emulsification, and aeration for fermentation processes require agitation. To design mixing systems, important quantities need to be considered, such as the power consumption of the agitator and the dimensionless mixing time. The choice of the

agitator is often motivated by the regime of operation (laminar or turbulent), the kinematic viscosity, and the volume of the fluid being mixed. Different kinds of impellers are used for different operating conditions. For example, axial or radial discharge turbines (propellers, Rushton, hydrofoils, pitched blades) are used for fluids with lower viscosity, whereas close-clearance impellers (helical ribbons, anchors) are used for viscous fluids [225].

To characterize the power consumption, engineers rely extensively on the dimensionless power number N_p , which relates the power consumption of the agitator to the inertial work in the fluid and characterizes the energy requirement of an agitated system:

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (\text{D.1})$$

with ρ fluid's density, N the impeller rotational speed, D the impeller diameter, and P the power consumption [15, 46, 225].

The power number depends on dimensionless geometrical properties that describe a given mixing system as well as the on the Reynolds number Re :

$$Re = \frac{D^2 N}{\nu} \quad (\text{D.2})$$

with ν the kinematic viscosity [15, 46, 225].

The power number N_p can be obtained through two approaches: empirical correlations and CFD simulations.

Empirical correlations are power curves where N_p is a logarithm function of Re and geometrical ratios using the impeller diameter D as the reference length. These correlations are generally built using experimental data gathered on mixing systems [226].

$$N_p = f \left(Re, \frac{T}{D}, \frac{H}{D}, \frac{C}{D}, \frac{l}{D}, \frac{w}{D} \right) \quad (\text{D.3})$$

Here, T is the width of the tank, H the height of the fluid inside the tank, C the clearance of the impeller from the bottom, l the length of the blades, and w the width of the blades.

Those power curves behave differently for the laminar regime (at low Reynolds) and for the turbulent regime (at higher Reynolds). In the laminar regime, $N_p \propto Re^{-1}$, meaning that the slope of N_p is constant in logarithmic scale. On the other hand, in the turbulent regime, N_p becomes constant. Usually, the transition between the laminar regime and the turbulent

regime occurs around $Re = 200$ [225].

Multiple correlations can be used to estimate the power consumption of paddle and PBT impellers [227–230]. These correlations are generally fit of the power number obtained experimentally.

Computational Fluid Dynamics (CFD) is a robust and accurate tool to simulate mixing systems. With a validated software and an appropriate mesh, velocity field, pressure and torque can be easily computed from CFD simulations [15].

These two approaches present some limitations. On one hand, the correlations do not generalize to multiple geometries without requiring new experimental data. Indeed, the dependency between the power number N_p and the mixer geometry is so complex and non-linear that an algebraic function cannot adequately represent all possibilities. Furthermore, only few variations of geometrical characteristics are investigated in the experiments, which leads to undercoverage biases and, thus, inaccuracies in the calculation of the power number N_p .

On the other hand, if we use CFD simulations to predict the power consumption of a mixing system, a mesh sensitivity analysis and multiple simulations are needed to establish a power curve. This requires significant time, computational resources and expertise in meshing and CFD.

Artificial Neural Networks (ANNs) are statistical models that can predict continuous values through a regression technique. By propagating signals through multiple interconnected nodes that form a deep network, ANNs take into account non-linear relationships between inputs and outputs, like empirical correlations [231]. ANNs have been shown to be able to model accurately multiple chemical engineering problems such as internal faults detection in heat exchangers [232], process control using model predictive control (MPC) [233], and also kinetic modeling to optimize fluidized bed reactor performance [234]. In mixing applications, it was demonstrated that ANNs coupled with empirical correlations can predict the power and head characteristics of pump-mixers from experimental data [235]. Nonetheless, ANNs have never been used as an independent model to predict the power number N_p .

To overcome the lack of generality of the traditional correlations and to avoid gathering an unrealistic amount of experimental data, we propose the combination of CFD and machine learning to estimate the power number of impellers. CFD can simulate mixing systems in large numbers (e.g. 100k configurations) in a relatively small time thanks to high-performance clusters. The machine learning approach gives a simpler and faster predictor of the power number than CFD and a more precise statistical regressor than correlations.

The main objective of this study is to predict power curve from Re 1 to 100 of paddle and

pitched blade turbines (PBT) mixers given their geometrical characteristics and operating conditions. First, we present the CFD methods and settings to predict the power number for a mixing configuration. We then describe the sampling method used to generate efficiently a hundred thousand (100k) mixing simulations for the purpose of feeding a rich and large database to the ANN. Using a grid search with cross-validation, we construct the ANN’s architecture by finding its optimized hyperparameters. Finally, we test and analyse the performance of the ANN’s training by evaluating the loss function and by comparing the ANN’s results to an empirical correlation.

Using an effective sampling method of the CFD simulations and performing a data pre-processing, the ANN is able to predict the power number with an absolute error of 0.5%. It significantly outperforms the correlation because it is able to generalize its predictions of the power number to a larger breadth of geometrical configurations.

D.2 Models and methods

D.2.1 Database generation

This section discusses the strategy employed to generate the mixer database. We describe the dimensionless parametrization of the geometry, the meshing procedure, the CFD solver and the sampling strategy.

Domain parametrization

The geometry of the mixer is defined by seven different parameters, some of which are shown in Figure D.1. The tank is unbaffled, has a diameter of T , and the fluid inside the tank has a height of H . The impeller has a diameter D . The blades of the impeller have a width of W , a thickness of E , and can be tilted with an angle θ . Finally, the impeller has a clearance C from the bottom of the tank. The geometry is scaled using common ratios seen in the literature to generate a dimension-independent problem: T/D , H/T , T/C , D/W and E/W [15, 226, 236–238]. The reference dimension is set to $T = 1$.

CFD simulations

The open-source software Gmsh is used to generate a finite element mesh of tetrahedral elements [239]. The open-source Lethe software is used to solve the incompressible Navier-Stokes equations using a continuous Galerkin SUPG-PSPG formulation [11]. We use P1-P1 interpolation for both velocity and pressure. The mixer is simulated in steady state regime at

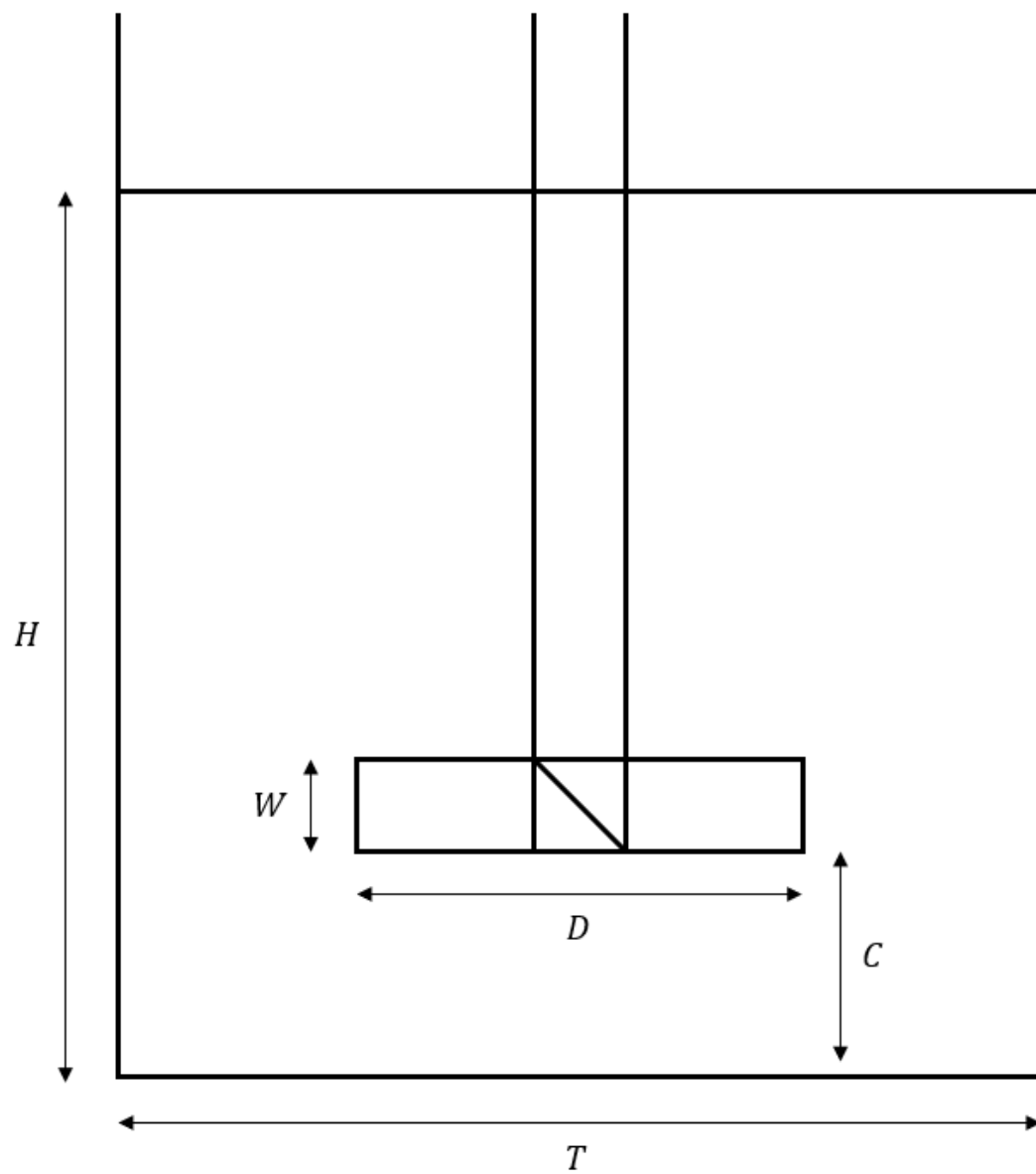


Figure D.1 Scheme of the mixing rig used for the simulations.

a low Reynolds number ($Re \in [1, 100]$) where a stable stationary solution is reached. A single rotating frame (SRF) technique is used, meaning that the rotational velocity is imposed on the lateral and bottom walls while the impeller has a zero velocity condition [240]. The fluid interface at the top has a slip condition to mimic the liquid's free surface. Note that this method is limited to vessels of a single shaft with no baffle, because the static part of the tank needs to stay invariant by rotation [15].

Because of the SRF, the Coriolis and centrifugal forces are added to the Navier-Stokes equations as follows [15, 46]:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{D.4})$$

$$\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + 2\rho \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u} + \rho \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (\text{D.5})$$

where $\mathbf{u}$ is the velocity, ρ the density, $\boldsymbol{\omega}$ the angular velocity of the SRF, r the distance to the axis rotation, p the pressure and $\boldsymbol{\tau}$ is the deviatoric stress tensor [11, 15, 46]:

$$\boldsymbol{\tau} = \nu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (\text{D.6})$$

with ν the kinematic viscosity of the fluid.

The rotational speed of the reference frame N is set to one rotation per second (or $\|\boldsymbol{\omega}\| = 2\pi \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$) and the kinematic viscosity is changed in the simulation parameters to satisfy a specified Reynolds number Re described by Equation D.2.

The torque is obtained by integrating the stress tensor on the impeller. The power consumption P is a function of the torque Γ and the rotational speed N [15, 46, 225].

$$P = 2\pi \Gamma N \quad (\text{D.7})$$

The power number N_p is obtained from the power consumption P following Equation D.1.

Sampling strategy

To generate 100k samples that are standardized in all geometrical ratios and Re , Latin Hypercube Sampling (LHS) is used. LHS is a sampling method that stratifies the features

to represent uniformly the inputs space [212]. The open-source library pyDOE is used to generate the 100k combinations of the input variables. Table D.1 lists the interval of the dimensionless geometrical ratios and the Reynolds numbers that are used to sample the mixers.

The 100k simulations are launched on the Narval computer cluster owned by the Digital Research Alliance of Canada. Each simulation is launched on a single core of one CPU and takes approximately 40 minutes to reach convergence at a relative tolerance of 10^{-8} . A script is launched to gather the torque output of all the simulations and the power numbers N_p are stored in a data file.

D.2.2 Artificial Neural Network

The architecture of the ANN is a deep structure composed of multiple layers of neurons. Figure D.2 represents an example of a deep neural network with one input layer of seven neurons, two hidden layers and an output layer of the variable of interest N_p . The input layer regroups all the variables that characterize agitation: six geometrical parameters (ratios) and one physical parameter (Re). Giving all dimensionless parameters as inputs to the ANN allows more stability to the training.

When training an ANN, the goal is to find the right weights between the interconnected nodes from a layer $[i - 1]$ to another layer $[i]$ and construct the best hypothesis function that links the inputs to the outputs. Each set of nodes $\mathbf{z}^{[i]}$ is a linear combination of their input neurons $\mathbf{a}^{[i-1]}$ and their respective weights $W^{[i]}$. A bias $\mathbf{b}^{[i]}$ is added as a constant to the linear function [241].

Table D.1 Input variables and their interval.

Inputs	Minimum	Maximum
T/D	2	4
H/T	1	1.5
T/C	2	5
D/W	3	6
E/W	0.1	0.2
θ	0	$\pi/3$
Re	1	100

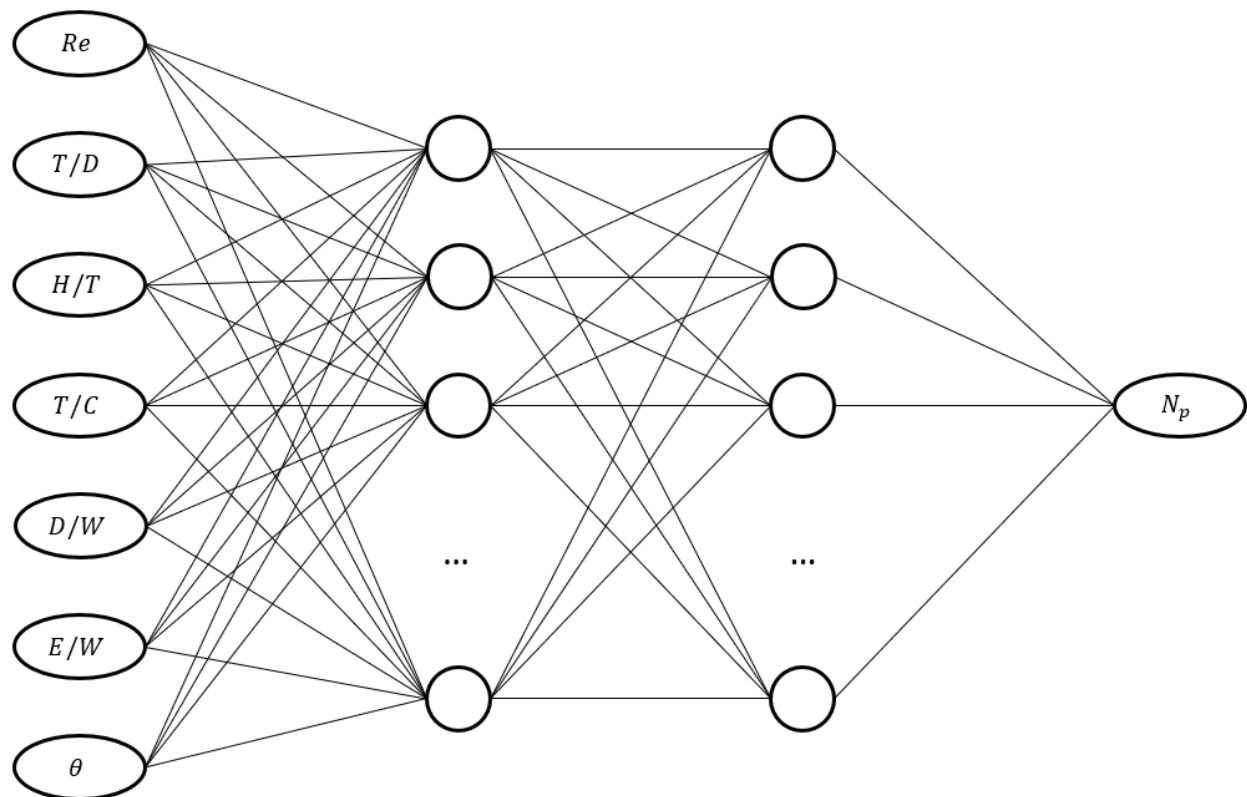


Figure D.2 Artificial Neural Network (ANN) architecture with two hidden layers to predict the power number based on features that describes the mixer.

$$\mathbf{z}^{[i]} = W^{[i]} \mathbf{a}^{[i-1]} + \mathbf{b}^{[i]} \quad (\text{D.8})$$

The number of layers $[i]$ and the number of neurons in one layer (size of $\mathbf{a}^{[i]}$) are hyperparameters that affect the performance of the ANN. Another hyperparameter to study is the non-linear activation function σ that transforms a set of nodes $\mathbf{z}^{[i]}$ into neurons $\mathbf{a}^{[i]}$.

$$\mathbf{a}^{[i]} = \sigma(\mathbf{z}^{[i]}) \quad (\text{D.9})$$

Some activation functions, such as the rectified linear unit function (ReLU) and the hyperbolic tangent function (tanh), are more commonly used for deep networks and will be further investigated in this study. The activation function for the output layer should differ from the hidden layers. Given that the problem to be solved is a linear regression, the output neuron is activated using a linear function [231].

The quantification of the ANN's performance needs to be consistent with the formulation of the problem. As the power number is a continuous variable, the loss function L computed at the output layer that verifies the ANN's performance is the squared error between the predicted output $\hat{y}^{(i)}$ and the known value $y^{(i)}$. In this study, $y^{(i)}$ is the power number (N_p) calculated using CFD simulations.

$$L(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) = (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (\text{D.10})$$

The cost function J is the mean squared error (MSE) over all the outputs.

$$J = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m L(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (\text{D.11})$$

The optimization problem of an ANN is to minimize the cost function J , which means that the derivative of the cost function with respect to the weights needs to converge close to zero. Backpropagation allows the evaluation of the derivatives automatically. The algorithm that performs the optimization is the gradient descent technique. It updates the weights according to a learning rate α and a direction given by the derivatives [231].

$$W^{[i]} := W^{[i]} - \alpha \frac{\partial J}{\partial W^{[i]}} \quad (\text{D.12})$$

When the algorithm completes one pass of all the dataset over the neural network, one epoch (iteration) is considered finished. The number of epochs is also another important hyperparameters to consider.

The learning may be slow and the ANN may not converge to a global minimum. Some strategies are implemented to optimize the gradient descent algorithm. First, the Adam optimizer uses a momentum optimization by keeping track of past gradients to accelerate the convergence [231]. Second, the weights W are initialized using the Glorot uniform distribution. This technique randomly initializes the connection weights depending on the number of neurons in each layer. The Glorot distribution has been proven to improve the flow of the signal through the layers in the forward and backward directions [214].

Pre-processing

Before training the ANN, pre-treatment of the input data is important to avoid biases. Normalization of data consists in bringing all the features on the same interval. Indeed, the Reynolds number does not have the same order of magnitude as the geometrical ratios. The update of the weights of the ANN in the backward pass can be affected by the different scales of the features. Training performed on unnormalized mixers data tended to converge to high MSE, which indicates poor performance.

The normalization method used for the purpose of inputs pre-treatment is the MinMax scaling. Each feature x_i is normalized into x'_i using the minimum x_{min} and the maximum x_{max} of the given feature.

$$x'_i = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (\text{D.13})$$

When MinMax scaling is applied to the data, each variables is exactly scaled between 0 and 1 and keeps the covariance structure of the original data [242]. A principal component analysis (PCA) on the normalized data shows that there are no dominant directions where the variance of the features is higher. Therefore, all features will be used in the training of the ANN, with no dimensionality reduction being employed.

Training

The architecture of the ANN is set with an exhaustive grid search with cross-validation (CV) that consists of selecting the most suitable hyperparameters. The normalized data are divided into three sets: training, validation and testing. 70% of the data is used for the training and 30% is used for testing the performance of the ANN. To validate the ANN, cross-validation is used to monitor the training in real time and to verify if the model is over-fitted [231]. The grid search allows to train different architectures by changing the number of hidden layers and neurons. The best ANN structure is chosen based on the lowest validation MSE averaged over multiple folds of the data. The cost function of the validation over each epochs is also checked. If the cost function increases, the model is more biased on the training set and fails to generalize. Finally, when the best architecture is found, all the training data is used to fit the model with the right number of epochs that prevents overfitting. Predictions are then made with the testing set to verify the performance of the ANN. The grid search CV is implemented using the Sklearn library in Python [243]. All the implementation and the training of the ANN is done with the Tensorflow and Keras libraries in Python [134]. All the code programs, scripts and data files of the ANN's implementation are available on a public repository [244].

D.3 Mesh sensitivity

In CFD, the mesh impacts the quality of the results and the computation time. The mesh around the impeller needs to be sufficiently fine to have an adequate prediction of the flow and thus to adequately predict the torque. Using Gmsh, we locally refine the mesh near the agitator. The characteristic length L_c (the representative size of a tetrahedral element), is ten times smaller near the blades and the shaft than for near the walls. The value of L_c is 0.003 near the agitator and 0.03 near the walls. Figure D.3 shows the velocity in the radial direction while Figure D.4 shows the velocity in the axial direction of the same vessel with $T/D = 3$, $H/T = 1$, $T/C = 3$, $D/W = 4$, $E/W = 0.1$, $\theta = \pi/4$ and $Re = 100$. Both figures are in an Eulerian reference and use a refined mesh as illustrated in Figure D.5.

To evaluate the error on the torque caused by the CFD simulations, we need to do a mesh sensitivity analysis. We gradually refine the global mesh by reducing the characteristic length of the elements and evaluate the torque on the impeller. We do a mesh sensitivity using both an average geometry (medium impeller in a medium tank) at low Reynolds ($Re = 5$), defined as the average case, and a more complex geometry (smaller impeller in a larger tank) at higher Reynolds ($Re = 100$), defined as the worst case.

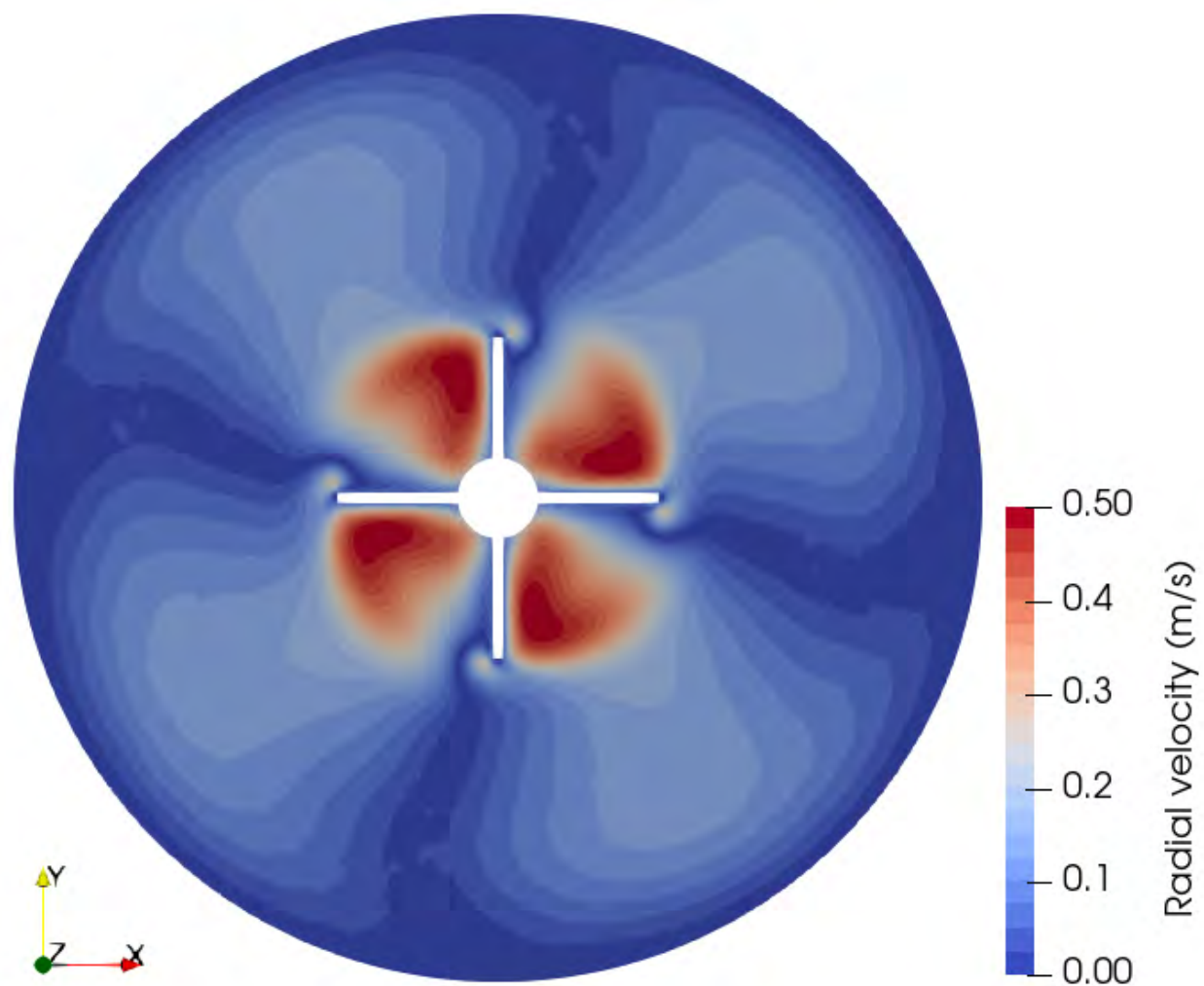


Figure D.3 Velocity in the radial direction in a mixer at $Re = 100$ in a top view perspective.

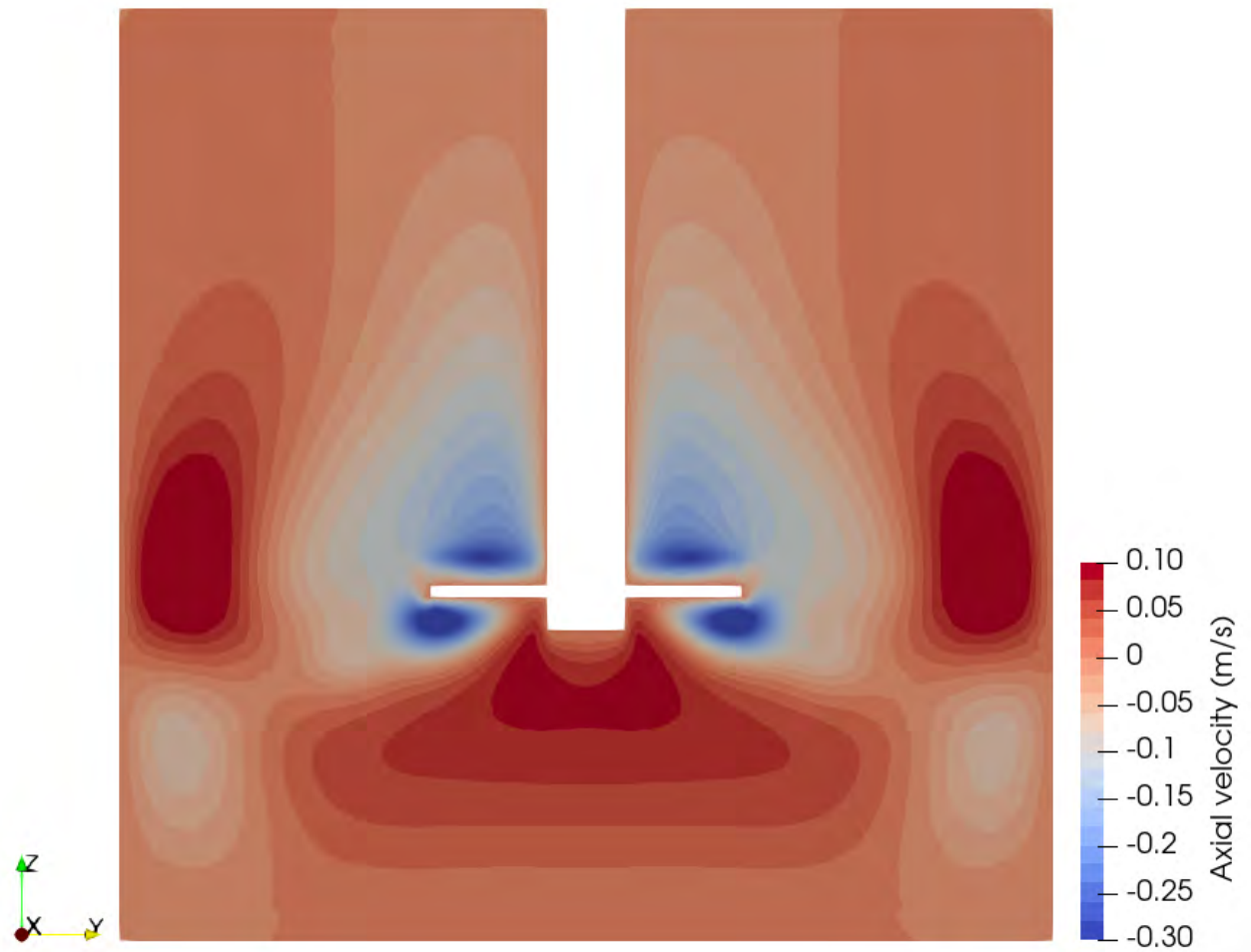


Figure D.4 Velocity in the axial direction at $Re = 100$ in a side view perspective.

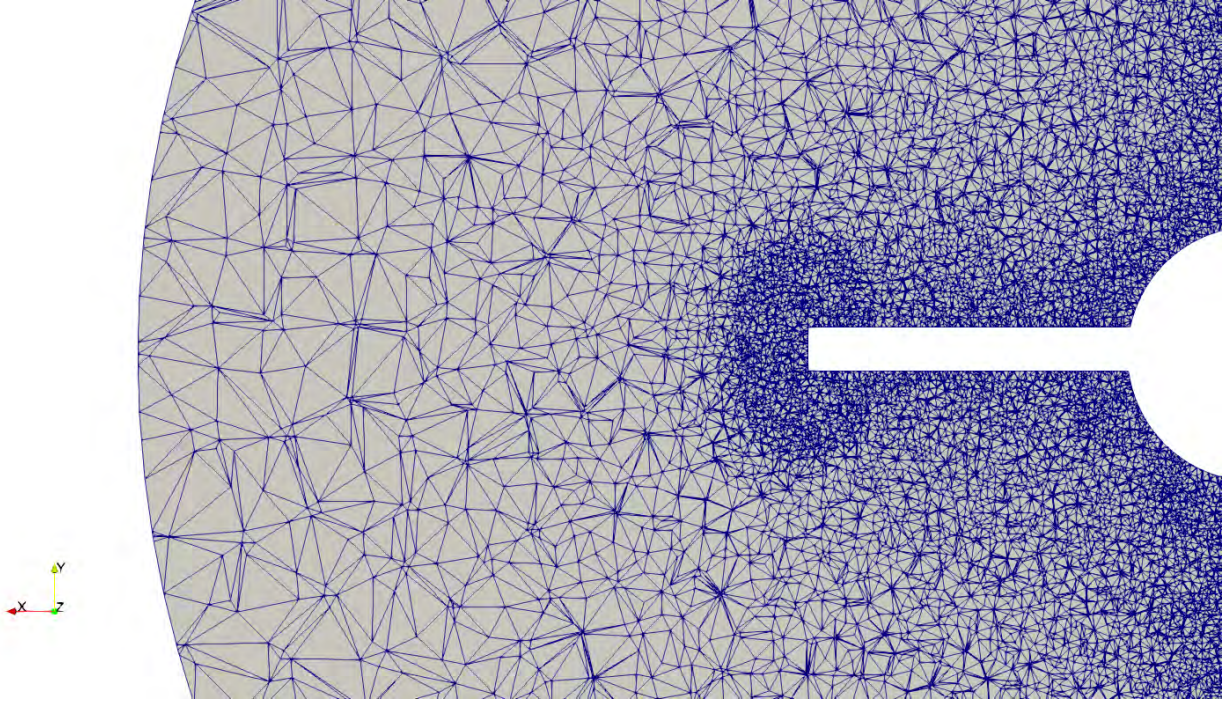


Figure D.5 Mesh refinement near the blades and the shaft of the impeller.

Figure D.6 shows the torque obtained with a given characteristic length normalized to the torque calculated with the mesh used in the 100k CFD simulations ($L_c = 0.03$). We observe that the torque is still mesh-dependent, even with the finer mesh which contains almost 100M elements. We use a generalized Richardson extrapolation to approximate the reference value of the torque and then to calculate the error caused by the domain discretization [137].

$$\hat{f} = f_h + \frac{f_h - f_{rh}}{r^p - 1} \quad (\text{D.14})$$

Here, $\hat{f}$ is the extrapolated value, or the approximation of the solution of the torque. f_h and f_{rh} are the torque evaluated on elements of different characteristic lengths h . r is the refinement factor between the meshes and p is the order of convergence of the torque, which is 1.

The extrapolated normalized torque is 1.07 for the average mixer and 1.14 for the worse mixer. With these values, it is possible to have an estimation of the relative error of the torque e_r .

$$e_r = \frac{|\hat{f} - f_{0.03}|}{\hat{f}} \quad (\text{D.15})$$

Relative errors of 7% for the average mixer and 12% for the worse mixer are obtained with a mesh of a maximum characteristic length of 0.03. These errors are not significant, as they are equivalent to an uncertainty on the impeller speed of about 2%.

Furthermore, the run time of a simulation using a mesh of 3 million elements ($L_c = 0.03$) is 40 minutes on a single CPU while a mesh of 5 million elements ($L_c = 0.025$) takes 80 minutes to simulate, which is two times longer. Simulations with close to 100M cells required a full cluster node in order to have sufficient memory.

Using a coarser mesh is a good compromise between computational time and accuracy. Using this characteristic length, the cost a single simulation was approximatively $1.2 \cdot 10^{-4}$ core-year. In total, the simulations carried out in this work consumed 12 core-years.

D.4 Results and discussion

The grid search CV finds the right balance between the complexity of the architecture (number of parameters) and the cycles of training (amount of times the parameters are updated). An ANN with 3 layers and 50 neurons in each layer is the architecture that gives the lowest averaged MSE over all the cross-validation folds. In this case, the tanh activation function converges more rapidly than the ReLU function. A smaller batch size of 200 updates more frequently the weights during one epoch and stabilizes the variation of the MSE during training.

After cross-validation, the ANN was trained for 5,000 epochs with the optimal architecture on all the training set. Table D.2 shows the MSE, the mean absolute error (MAE) and the mean absolute percentage error (MAPE) of the training and testing sets with the raw data. The scale of each performance metric is the same for the training and testing, meaning that there is no underfitting nor overfitting of the data. The MAPE of the testing set, which was never seen by the ANN before, is lower than 1%.

Figure D.7 shows the predictions of the ANN and the estimations of a correlation developed by Hiraoka et al. for paddle impellers [229,245] using a portion of the testing set. The correlation is detailed in Table D.3. It uses a friction factor f , a laminar term C_L , a turbulent term C_t , a term that characterize the transition from laminar to turbulent flow C_{tr} , an exponent term m and other coefficients. It also uses a modified Reynolds number Re_G . Note that n_p is the

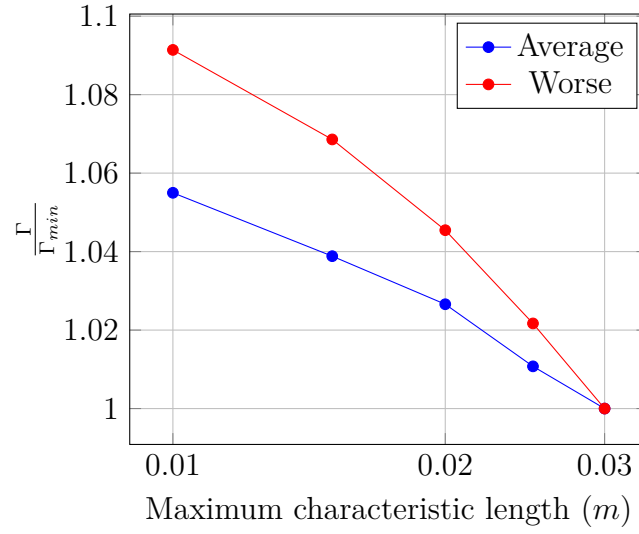


Figure D.6 Normalized torque Γ according to the maximum characteristic length of the mesh near the agitator for average and worse geometries.

Table D.2 Performance metrics on each set.

Set	MSE (10^{-4})	MAE (10^{-2})	MAPE (%)
Training	6.10	1.84	0.538
Testing	7.60	1.88	0.540

number of blades, which is 4 in this case.

According to Figure D.7, the ANN's predictions are really close to the true power number values and the errors are normally distributed, with no apparent outliers. These results show that the ANN performs well. Normalization of the data plays a major role in obtaining low error metrics. The correlation of Hiraoka et al. exceeds mostly the 25% error threshold illustrated in Figure D.7, showing its poor performance. The correlation severely underpredicts and overpredicts N_p .

To further validate the accuracy and the robustness of the ANN, we consider impeller configurations which were not included in the database and compare the predictions that are made with the ANN with new CFD simulations and the correlation developed by Hiraoka et al. over the entire range of Reynolds number considered. The results of the comparison is shown in Figures D.8 and D.9.

In Figures D.8 and D.9, predictions agrees almost perfectly with the Lethe simulations of the same mixer geometry, proving that the ANN performance is related to the pre-processing of the 100k runs (LHS sampling, coherent CFD tolerance, proportional refinement of the mesh, etc.).

According to Figure D.9, even when compared to results obtained with a finer mesh (smaller element size L_c), the ANN predictions are extremely close to the CFD simulations. This shows that the precision of the torque due to the mesh resolution does not affect the performance of the ANN. Having a discretization error of 7% on the torque is more than acceptable and allows the ANN to obtain significantly better results than the correlation of Hiraoka et al.

Indeed, the correlations do not fit the N_p values predicted by the ANN or calculated by Lethe. In Figure D.8, the correlation deviates close to $Re = 100$. It is well known that in this area of the power curve, the transition between the laminar flow regime and the turbulent flow regime is difficult to predict [246, 247]. While in Figure D.9, the correlation completely deviates from the CFD simulations and the ANN predictions. Because correlations reproduce only few experimental values, they are ill-posed to estimate the power number for higher Reynolds, where the transient regime occurs, and for other specific geometries. Lethe has been verified and validated for mixing problems, thus it is able to simulate the flow of complex systems and accurately predict the power number.

To prove the validation furthermore, we compared the N_p values predicted by the ANN with experimental data [15]. Figure D.10 shows that the ANN's predictions are within the error intervals of the experiments. The correlation deviates more from the experimental values than the ANN's predictions and it often lies outside of the error bounds, especially at higher

Table D.3 Correlation equations for the power number for pitched and paddle impellers in unbaffled condition.

$$\begin{aligned}
 N_p &= ([1.2\pi^4\beta^2] / [8D^3 / (T^2H)]) f \\
 f &= C_L/Re_G + C_t \left([(C_{tr}/Re_G) + Re_G]^{-1} + (f_{\sim}/C_t)^{1/m} \right)^m \\
 Re_G &= ([\pi\eta \ln (T/D)] / (4D/\beta T)) Re \\
 C_L &= 0.215\eta n_p (D/H) \left[1 - (D/T)^2 \right] + 1.83 (W \sin \theta / H) (n_p/2 \sin \theta)^{1/3} \\
 C_t &= \left[(1.96X^{1.19})^{-7.8} + (0.25)^{-7.8} \right]^{-1/7.8} \\
 m &= \left[(0.71X^{0.373})^{-7.8} + (0.333)^{-7.8} \right]^{-1/7.8} \\
 C_{tr} &= 23.8 (D/T)^{-3.24} (W \sin \theta / T)^{-1.18} X^{-0.74} \\
 f_{\sim} &= 0.0151 (D/T) C_t^{0.308} \\
 X &= \gamma n_p^{0.7} W \sin^{1.6} \theta / H \\
 \beta &= 2 \ln (T/D) / [(T/D) - (D/T)] \\
 \gamma &= \left[\eta \ln (T/D) / (\beta T/D)^5 \right]^{1/3} \\
 \eta &= 0.711 \left(0.157 + [n_p \ln (T/D)]^{0.611} \right) / \left(n_p^{0.52} \left[1 - (D/T)^2 \right] \right)
 \end{aligned}$$

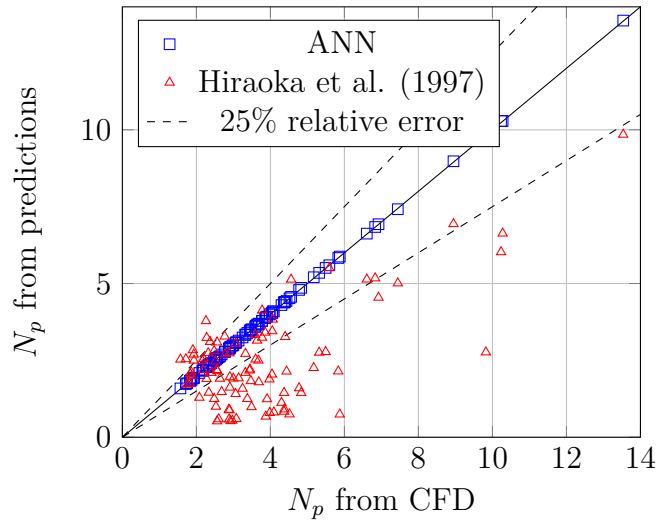


Figure D.7 Predictions using the ANN and the correlation from Hiraoka et al. (1997) versus values of the power number N_p from the CFD simulations.

Reynolds numbers.

In general, the ANN greatly surpasses the correlation in terms of fitting the CFD data and, consequently, is in much better agreement with the experimental data.

D.5 Conclusions

The determination of power consumption is a key step in designing a mixing system. The power number N_p represents the energy requirement of the agitator depending on its geometry and the Reynolds number Re . The power number can be obtained from correlations. However, these correlations do not generalize when the mixing system at study slightly deviates from those used to build and verify the correlations.

To overcome this lack of generality, we proposed in this work to couple CFD simulations with an ANN. On one hand, CFD simulations provide the database of 100k different PBT mixers that are used as an input of the ANN. On the other hand, the ANN learns non-linear patterns within the database and ultimately estimates the power consumption of a PBT mixing system.

We presented the methodology behind the generation of the 100k mixers, such as the domain parametrization, the CFD settings and the latin hypercube sampling method. We also presented the pre-processing of the data and the grid search cross-validation that allowed to have an optimized architecture and an effective training of the ANN.

Finally, we presented the performance of the ANN by keeping 30% of the data and making predictions of the power number N_p over the testing set using the ANN correlation. The ANN reached a MAPE of 0.5%, which is an incredibly low metric error. The key to get such a low MAPE is in the pre-processing of the data and the monitoring of the training:

- Features were sampled using a LHS method, so that all inputs represents faithfully the dimensions of the problem.
- Mesh generation was standardized and all simulations converged to the same tolerance.
- Normalization of the data using a MinMax scaling helped the ANN to overpass inevitable biases.
- Grid search CV was essential to validate the architecture and to monitor the training, so that the ANN does not overfit nor underfit the data.

Also, we presented some comparisons between the ANN predictions and the correlations from Hiraoka et al. The results showed that the predictions of the power number N_p made by the ANN outperforms the correlation for all cases considered, even for mixers that has never been trained by the ANN.

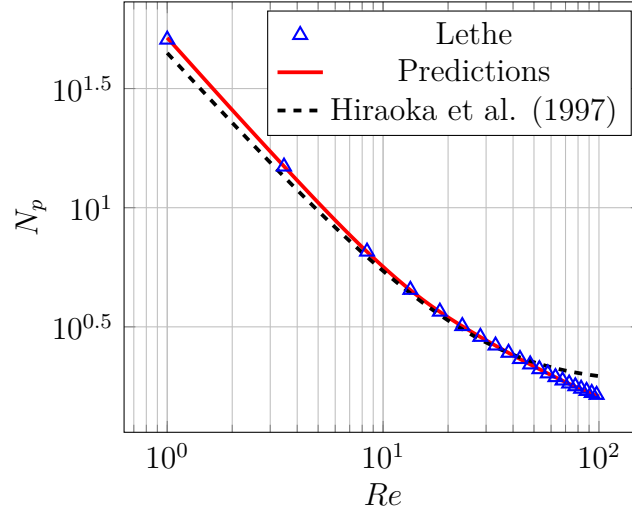


Figure D.8 Power number versus Reynolds number for a specified geometry ($T/D = 3$, $H/T = 1$, $T/C = 4$, $D/W = 5$, $E/W = 0.1$, $\theta = \pi/4$) using the ANN, CFD simulations (Lethe) and Hiraoka et al. (1997) correlation.

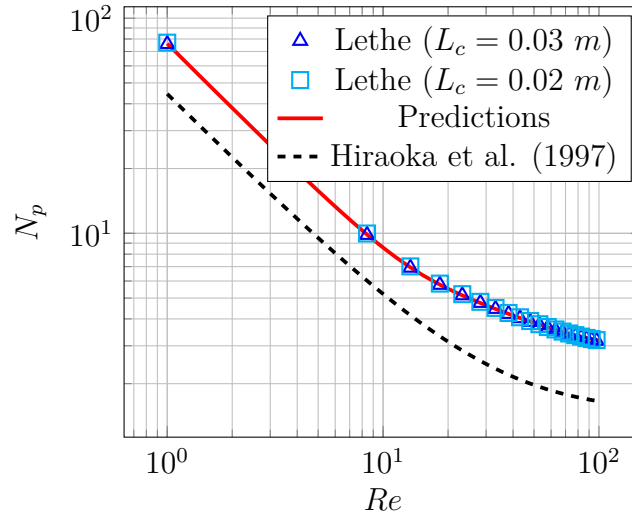


Figure D.9 Power number versus Reynolds number for a specified geometry ($T/D = 2.5$, $H/T = 1.2$, $T/C = 3$, $D/W = 3.5$, $E/W = 0.15$, $\theta = \pi/6$) using the ANN, CFD simulations (Lethe) of two different element sizes L_c and Hiraoka et al. (1997) correlation.

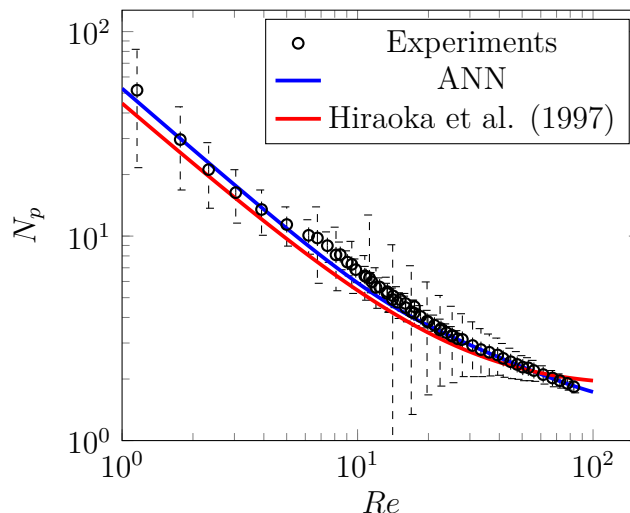


Figure D.10 Validation of the ANN's prediction of a power curve for a specified geometry ($T/D = 3$, $H/T = 1$, $T/C = 4$, $D/W = 5$, $E/W = 0.15$, $\theta = \pi/4$).

With these results, we demonstrated that Artificial Neural Networks, trained with CFD data, accurately predict the power consumption of paddle and pitched blade impellers. This approach can be easily generalized to other types of impellers or to the turbulent regime by enriching the database with new simulations. It could also be extended to predict other quantities such as the mixing time, the pumping number, etc. We think that this work demonstrates that simulation-fed ANN are an ideal candidate to replace traditional correlations in the design of unit operations such as agitated tanks.

D.6 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge financial support from the “Institut de valorisation des données” (IVADO) through the Undergraduate introduction to research scholarship. Computations were made on clusters Beluga and Narval managed by Digital Research Alliance of Canada. In particular, the authors would like to acknowledge the efficient support received from Calcul Québec systems analysts.

ANNEXE E ARTICLE 5: AN EXTENSIVE STUDY OF SHEAR THINNING FLOW AROUND A SPHERICAL PARTICLE FOR POWER-LAW AND CARREAU FLUIDS

Carole-Anne Daunais, Lucka Barbeau, Bruno Blais

Contribution de Lucka Barbeau: Méthodologie, logiciels, collecte de données, rédaction - révision et édition.

Publié dans Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, volume 311, article 104951, November 19, 2022.

Abstract: We develop and implement a high-order finite element formulation to solve incompressible shear thinning flows using power-law and Carreau rheology models. We verify the implementation using the Method of Manufactured Solutions (MMS) and demonstrate that the implementation preserves the order of accuracy of the FEM scheme. We run high-order flow-past-a-sphere simulations for $Re \in [0.1, 100]$ for Newtonian and shear thinning flows. Power-law simulations cover $n \in [0.3, 0.9]$, Carreau simulations cover the same range of n and dimensionless relaxation times $\Lambda \in [0.1, 100]$. We use 3D Cartesian grids, adopting a high-order sharp-interface immersed boundary method (IBM) to impose the no-slip boundary condition on the surface of the sphere. We use dynamic mesh adaptation with a Kelly error estimator to adaptively refine the grid. Newtonian drag coefficients are compared to Clift *et al.*'s model. Using the power-law model for shear thinning flow, results show that when

decreasing n : the drag coefficient increases for $Re \lesssim 5$, it decreases for $Re \gtrsim 5$, and that for higher Reynolds the wake region is longer and the separation point is moved upstream. These drag coefficient results are in adequation with previously established simulation results. We provide a new drag coefficient correlation for power-law fluids that is valid for a wide range of n and for $Re \in [0.1, 100]$, with $R^2 = 0.998$. The power-law model is singular in the zero-shear limit, and this limit is bound to occur in a flow-past-a-sphere geometry. For that matter, the Carreau model is well-posed. As the Carreau-modeled results show, the drag force on the sphere is considerably affected by the initial Newtonian plateau of the fluid. Drag coefficient results in the creeping flow regime are compared to experimental results, allowing validation of the numerical model. This work provides a better understanding of shear thinning flow past a sphere, for which the relationship between drag and flow regimes are highly nonlinear.

E.1 Introduction

Understanding the behavior of diluted particle suspensions in shear thinning flows is fundamental to the chemical processing industry. While water is a Newtonian fluid, many water-based cosmetic, pharmaceutical, and agrifood products will experience shear thinning behaviors, meaning that their viscosity will decrease when shear is applied [248]. Molten plastics also play a massive part in the shear thinning fluid industry. Various unit operations treat shear thinning fluids using spherical particles such as packed and fluidized beds, or mechanical/chemical separation [249].

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

The drag force on a single sphere in non-Newtonian fluids has been studied for over half a century. This section draws a brief overview of this study. On power-law modeled flow past a sphere [250], Adachi *et al.* (1973) studied the impact for $n \in [0.8, 1.0]$ at $\text{Re} = 60$ as well as for creeping flow using a statistical method (method of moments) [251]. They concluded that the drag force increases when decreasing n notwithstanding the flow regime. They also determined that the wake region is longer for shear thinning flows. Acharya *et al.* (1976) are seemingly the first to experimentally study the case of a falling sphere in inelastic and elastic shear thinning fluids for $\text{Re} \in [0.001, 1000]$ with $n \in [0.45, 1]$ [252]. They developed an expression for the drag coefficient as a function of n and Re . With a finite difference scheme, Lockyer *et al.* (1980) extended the n range to $[0.4, 1.0]$, without specifying the Reynolds number range [253]. To our best knowledge, they were the first to capture that the drag force on spheres in shear thinning flow increases for what they define as low Reynolds numbers and decreases for what they define as high Reynolds numbers when compared to Newtonian flow, which does not necessarily contradict the previous authors. They proposed an expression for the drag coefficient as a function of n for creeping flow. The article, however, omits to report a grid convergence analysis and a domain size analysis. Dahzi & Tanner (1985) introduced a finite element solver for power-law Stokes flow with $n \in [0.1, 1.0]$, and they also proposed an expression for the drag coefficient as a function of n [254]. Grid convergence results were not reported, but we assume the authors performed their simulations with due diligence. Still considering a creeping flow regime, Kawase & Moo-Young (1986) employed a perturbation approximation using an expression for the stream function to quantify the drag force for $n \in [0.6, 1.1]$, also concluding that the drag force increases as n decreases [255]. Tripathi *et al.* (1994) enlarged their flow regime range to $\text{Re} \in [0.01, 100]$ with $n \in [0.4, 1.0]$

around spheroids, numerically solving using a finite element method [34]. They performed a domain size convergence analysis in conjunction with a mesh size analysis (using cylindrical coordinates in 2D). However, the analyses results are not portrayed in the article, and the Re and n values used for these analyses are not specified. Tripathi *et al.* again observed that, as n decreases, the drag force is higher for low Re and lower for high Re , and they additionally found that this switch in the shear thinning effect happens between $Re = 2$ and $Re = 5$. They established that the wake length decreases for high Reynolds as n decreases, which thus contradicts Adachi *et al.* Renaud *et al.* (2004) gathered experimental drag coefficients from other authors for $Re \in [0.1, 1000]$ and developed a correlation for C_D a function of Re and n for $n \in [0.2, 1.0]$. Their correlation for C_D has an average error of 21% for $Re \leq 1$ and 16% for $Re \geq 1$. This error is mainly attributable to viscoelastic and wall effects. They also acknowledge the switch in drag at $Re = 5$ [256]. Dhole *et al.* (2006) adopted a finite volume method approach to simulate power-law modeled flow for $Re \in [5, 500]$ and $n \in [0.5, 2.0]$ [2]. They performed a domain size analysis along with a grid size analysis. They observed that the drag force decreases in shear thinning fluids, which meets with Tripathi *et al.*'s conclusions. Like Adachi *et al.* predicted, they noticed that the wake is larger as n decreases. Song *et al.* (2009, 2011) simulated a falling sphere in power-law fluids for $Re \in [1, 100]$ and $n \in [0.2, 1.0]$ using a FEM commercial software while comparing with experimental data [3, 35]. They performed a thorough study on the impact of the domain size, characterized by the ratio of the diameter of the sphere to the diameter of the cylindrical domain, on the simulation results. They must have carried out a mesh independence analysis but it is not shown in their work. They study the impact of n and of the domain size on the drag coefficient, the recirculation (wake) length and the separation angle. They provide an expression for C_D for a sphere over cylinder diameter ratio of over 0.21, that is out of scope of this present study. They also concluded that the wake region is larger as n decreases.

Regarding Carreau model studies, Chhabra & Uhlherr (1980) were seemingly the first to analytically derive an expression for the drag force considering a Carreau-modeled fluid for $n \in [0.2, 1.0]$ and dimensionless relaxation times $\Lambda \in [10^{-1}, 10^3]$ for creeping flow, that they experimentally validated [37]. They extended this study to intermediate flow regime (1980) for $n \in [0.52, 1]$, $Re \in [0.032, 394]$ and dimensionless relaxation times $\Lambda \in [0.032, 630]$ [257]. They developed an expression of C_D with a maximal deviation of 14% when compared to experimental data they gathered. They concluded that the variation in the drag force is a function of n and Λ , but is independent of Re . Bush & Phan-Thien (1984) took Chhabra & Uhlherr's work and extended their research to $n \in [0.1, 1.0]$ using a boundary element method [258]. They concluded that the drag force increases in shear thinning creeping flow up until $n = 0.3$ and started to decrease after that. Bush & Phan-Thien conducted a grid

convergence analysis only considering Newtonian creeping flow. Hsu *et al.* (2008) numerically studied the drag on a sphere in a particle suspension in Carreau fluids for $n \in [0.3, 1]$, for $\text{Re} \in [0.1, 100]$ with $\Lambda \in [0, 10]$ [259]. They simulated the flow around a single sphere for an artificial void fraction $\epsilon \in [0.27, 0.999]$. They perform a domain size analysis, while the choice of mesh (FEM) is not discussed. They developed an expression for C_D for $\epsilon < 0.7$, which is highly appropriate for the study of particle suspensions but slightly out of scope for this paper since we are interested in the flow around a single sphere. They concluded that the drag decreases when increasing Λ ; this agrees with the observations of Chhabra & Uhlherr in the creeping flow regime.

What emerges from this overview is that most of the studies center on creeping flow around the sphere, and the numerical analyses often lack in depicting a thorough investigation of the grid refinement convergence as well as a domain size independence with regards to the calculated drag force. Most articles do not detail the procedure they underwent to obtain an expression for the drag coefficient using numerical and experimental data. Additionally, there were few Carreau fluid studies in the past due to the complexity of the model, although shear thinning fluids will inevitably experience a Newtonian plateau (η_0) in the limit of zero shear rate where the power law model is ill-posed.

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

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

E.2 Governing equations and numerical implementation

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

$$\partial_l u_l = 0 \quad (\text{E.1})$$

and

$$\partial_t u_k + u_l \partial_l u_k = -\frac{1}{\rho} (\partial_k p + \partial_l \tau_{lk}) + f_k \quad (\text{E.2})$$

where the viscous stress term τ_{lk} is defined by

$$\tau_{lk} = -\eta (\partial_l u_k + \partial_k u_l) \quad (\text{E.3})$$

with u_k the k velocity component, ρ the fluid's constant density, p the fluid's pressure, η the fluid's dynamic viscosity and f_k a source term.

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

E.2.1 Shear thinning flow

A shear thinning flow is a flow for which the viscosity locally decreases when high shear stresses are applied [250]. At low shear rates, the fluid's viscosity will be constant at η_0 (see region 1 in Fig. E.1). This is the initial Newtonian plateau. For very high shear rates, the viscosity of some fluids will reach a second Newtonian plateau at $\eta_\infty \ll \eta_0$ (region 4). A viscosity drop occurs after a critical shear rate (region 3) intrinsic to the fluid. The slope in region 2 characterizes the level of this shear thinning behavior.

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

Power-law model

This model only requires two parameters and its parameters may easily be found from rheological measurements by linear regression [250]. The viscosity is given by:

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (\text{E.4})$$

where K is the viscosity for a shear rate magnitude of 1.0 s^{-1} , $n - 1$ is the slope of $\log(\eta) = f(\log(\dot{\gamma}))$ and $\dot{\gamma}$ is the shear rate magnitude. It adequately captures region 2 (Fig. E.1) but fails to represent the η_0 and η_∞ plateaus. It is ill-posed in regions of low to no shear, as the viscosity reaches infinity. This is highly problematic from a computational fluid dynamics (CFD) perspective, since regions of no shear are bound to happen at a point during the

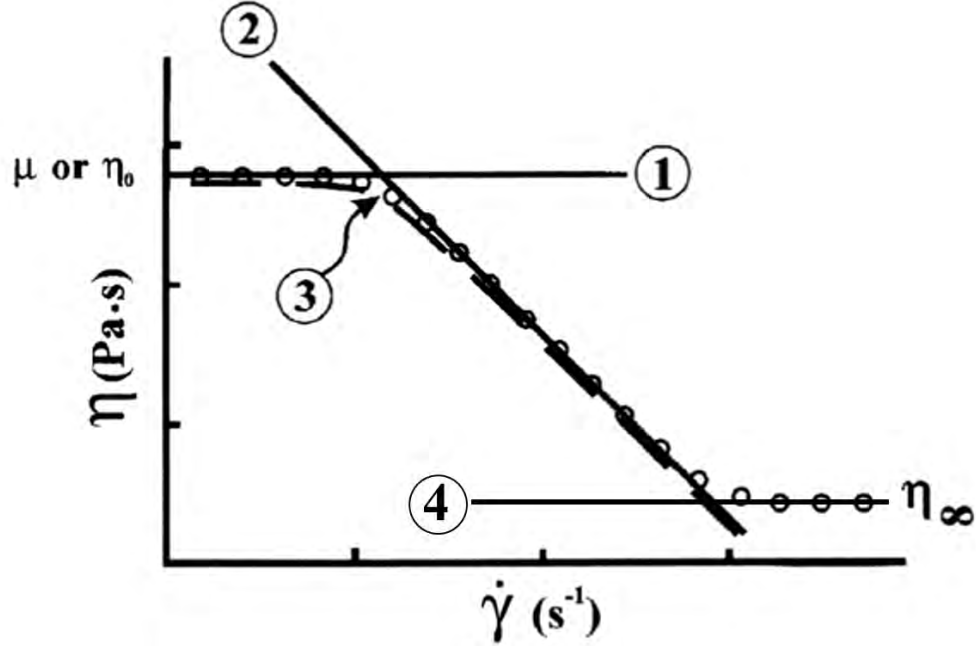


Figure E.1 Viscosity regions for shear thinning flows, in log-log scale, with two Newtonian plateaus (1 & 4), a transition (3) to the descending section (2) (adapted from [28]).

solution process.

Since the viscosity is no longer constant, there is an obvious need to redefine the Reynolds number that takes the shear thinning effect around the sphere into account. As demonstrated in [28], an *a priori* Reynolds number for power-law flow past a sphere is given by:

$$\text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}|^{2-n} D^n}{K} \quad (\text{E.5})$$

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

$$\dot{\gamma}_{\text{app}} = \frac{|\mathbf{u}|}{D} [=] \text{ s}^{-1} \quad (\text{E.6})$$

with $\mathbf{u} = u_k$.

We note that the given Re in equation (E.5) represents an *a priori* estimate of the effective Reynolds number. In reality, the shear rate and the viscosity vary abruptly in space. The *a priori* Re is widely used in the literature and helps to compare results.

Carreau model

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

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty})[1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}} \quad (\text{E.7})$$

where η_0 and η_{∞} are respectively the viscosity at rest and the viscosity at high shear rates, λ is the relaxation time, and n is the slope parameter, comparable to that of the power-law model. For the sake of reducing the number of parameters to investigate, and since we know that the shear rates inside Ω will stay in regions 1 and 2 (see Fig. E.1), we set $\eta_{\infty} = 0$. Introducing (E.6) and (E.7) into the Reynolds number equation, we get:

$$\text{Re} = \frac{\rho|\mathbf{u}|D}{\eta_0 \left(1 + \left(\lambda \frac{|\mathbf{u}|}{D}\right)^2\right)^{\frac{n-1}{2}}} \quad (\text{E.8})$$

E.2.2 Finite element formulation

The non-Newtonian solver is implemented in the open-source CFD software Lethe, based on the `deal.II` framework [131], that uses a Galerkin SUPG/PSPG stabilized finite element formulation approach (see [11] for further details). In this case, the viscosity will vary inside Ω and can no longer be considered a constant. Hence, the finite element weak formulation for steady-state flow becomes:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} q \partial_l u_l d\Omega + \sum_k \int_{\Omega_k} \mathcal{J}_s \cdot (\tau_{\text{PSPG}} \partial_l q) d\Omega_k &= 0 \\ \int_{\Omega} v_k (u_l \partial_l u_k - f_k) d\Omega - \int_{\Omega} \partial_k v_k (p) d\Omega + \int_{\Omega} \eta (\partial_l v_k) (\partial_l u_k) d\Omega \\ + \sum_k \int_{\Omega_k} \mathcal{J}_s \cdot (\tau_{\text{SUPG}} u_k \partial_l v_k) d\Omega_k &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

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

$$\tau_{\text{PSPG}} = \tau_{\text{SUPG}} = \left[\left(\frac{2|\mathbf{u}|}{h_{\text{conv}}} \right)^2 + 9 \left(\frac{4\nu}{h_{\text{diff}}^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (\text{E.10})$$

with $h_{\text{conv}} = h_{\text{diff}} = h$ the characteristic size of the cell [260]. The viscosity gradient $\partial_l \eta$ is evaluated using the chain derivative rule:

$$\partial_l \eta = \frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} \partial_l \dot{\gamma} \quad (\text{E.11})$$

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

$$\partial_l \dot{\gamma} = 2 \cdot \frac{1}{\dot{\gamma}} \cdot \partial_m u_k (\partial_l \partial_m u_k + \partial_l \partial_k u_m) \quad (\text{E.12})$$

Implementation challenges

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

A similar problem is encountered when calculating η using equation (E.4) and when calculating $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$ for power-law fluids. Indeed, neither η nor $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}}$ are defined for $\dot{\gamma} = 0$ for the power-law model (unlike the Carreau model). Additionally, for low shear rates, since the viscosity is not capped, it can reach excessively high values that are not physical, and that greatly affects the stability of the solver. When using the power-law model, a minimal shear rate $\dot{\gamma}_{\min}$ is required. This technique is recurrent in commercial CFD software, namely in *Ansys Fluent* [261]. The equivalent maximal viscosity will depend on the chosen K and n parameters (see (E.4)).

E.2.3 Drag force

The total drag force felt on a arbitrary object is:

$$F_D = - \left(\int_A (\underline{\sigma} \cdot \underline{n}) \, dA \right) \cdot \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \quad (\text{E.13})$$

with A the total surface of the object in contact with the fluid, $\underline{\sigma}$ the total stress tensor on the surface, $\underline{n}$ a unit vector normal to the surface of the object, and $\mathbf{u}$ the velocity of the fluid far from the object [71]. The negative sign indicates that we are considering the force of the fluid applied on the particle, in the opposite direction of $\underline{n}$, and the $\frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}$ term allows to only consider the drag component to be in the same direction as $\mathbf{u}$. The total stress tensor has a viscous stress component and a pressure component (E.14) [250]. The $\underline{\tau}$ is significantly

affected by the shear thinning behavior on the surface of the object and this changes the resulting viscous drag force (or friction drag force).

$$\underline{\sigma} = \underline{\tau} + p\underline{I} \quad (\text{E.14})$$

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

$$\mathbf{F}_D = \left(\frac{1}{2} A_{\text{eff}} \rho |\mathbf{u}|^2 C_D \right) \frac{\mathbf{u}}{||\mathbf{u}||} \quad (\text{E.15})$$

where A_{eff} is the effective area of the particle seen from the fluid moving towards it in the $\mathbf{u}$ direction, hence $\pi D^2/4$ for a sphere, and C_D is the drag coefficient [262].

E.3 Verification of the model using the Method of Manufactured Solutions

We perform a code verification using the Method of Manufactured Solutions (MMS) [137]. This method consists in manufacturing an exact solution for $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ and $p(\mathbf{x}, t)$ on a given calculation domain, regardless of its physical plausibility, that is sufficiently complex to ensure a thorough code verification [263]. This means that $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ and $p(\mathbf{x}, t)$ should be elements of $\mathcal{C}_{(m+p)}$, where m is larger than the number of times either $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ or $p(\mathbf{x}, t)$ is derived in the differential equation and p is the order of the FEM scheme. We then integrate these manufactured solutions in the Navier-Stokes continuity (E.1) and momentum (E.2) equations to calculate a source term for the differential equation. We consider the following 2D exact solution in a calculation domain defined by $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$:

$$u = \sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \quad (\text{E.16})$$

$$v = -\cos(\pi x) \sin(\pi x) \sin(\pi y)^2 \quad (\text{E.17})$$

$$p = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) \quad (\text{E.18})$$

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

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} u\partial_x u + v\partial_y u + \frac{1}{\rho} \left(\partial_x p + \partial_x \tau_{xx} + \partial_y \tau_{yx} \right) \\ u\partial_x v + v\partial_y v + \frac{1}{\rho} \left(\partial_y p + \partial_x \tau_{yx} + \partial_y \tau_{yy} \right) \end{bmatrix} \quad (\text{E.19})$$

We use both implemented rheological models for code verification, but we only present the results for Carreau model verification in this article for brevity. Deriving an expression for the shear rate magnitude throughout the domain from (E.16) and (E.17), we get that $\dot{\gamma} \in [0, \pi]$. To get an exhaustive verification of the Carreau model by simulating the transition between the initial Newtonian plateau and the descending section of the viscosity (see Fig. E.1), we set the following Carreau parameters : $\eta_0 = 1$, $\eta_\infty = 0$, $a = 2$, $\lambda = 1$ and $n = 0.5$, which give us the subsequent expression for viscosity :

$$\eta = (1 + \dot{\gamma}^2)^{-0.25} \quad (\text{E.20})$$

Hence, the range of viscosity is between 0.551 and 1.000 m²/s.

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

E.4 Non-Newtonian flow past a spherical particle : Results

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

E.4.1 Methodology

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

$$\Lambda = \lambda \dot{\gamma}_{\text{app}} \quad (\text{E.21})$$

with $\dot{\gamma}_{\text{app}}$ developed in (E.6).

The geometry for the simulations is given in Fig. E.3, where $u_\infty = \mathbf{u}(x) = 1$ m/s, the particle's diameter D is 1 m, and the height H is determined in section E.4.1. Thus, for all simulations, $\dot{\gamma}_{\text{app}}$ is 1.0 s⁻¹, and the Reynolds numbers are set by changing K for power-law simulations, and η_0 for Carreau simulations (see equations (E.5) and (E.8) respectively). All

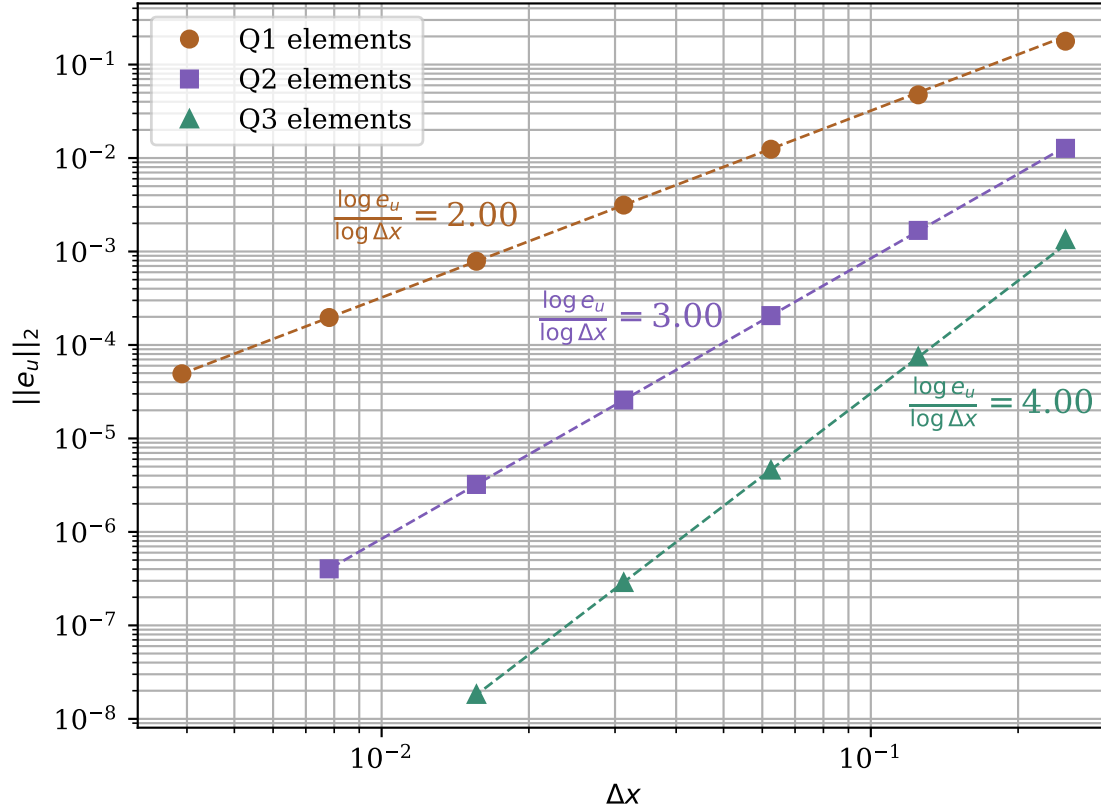


Figure E.2 Evolution of the $\mathcal{L}^2$ norm of the error on the velocity profile of a Carreau fluid for different scheme orders when operating a global mesh refinement. The order of convergence is consistent with the order of the underlying FEM interpolation.

lateral walls are given a `slip` boundary condition [11].

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

The particle is represented using a high-order sharp-interface immersed boundary method (see [16] for further information on the method). The grid is strategically refined around the particle using a 2-step adaptive refinement technique based on the Kelly error estimator on

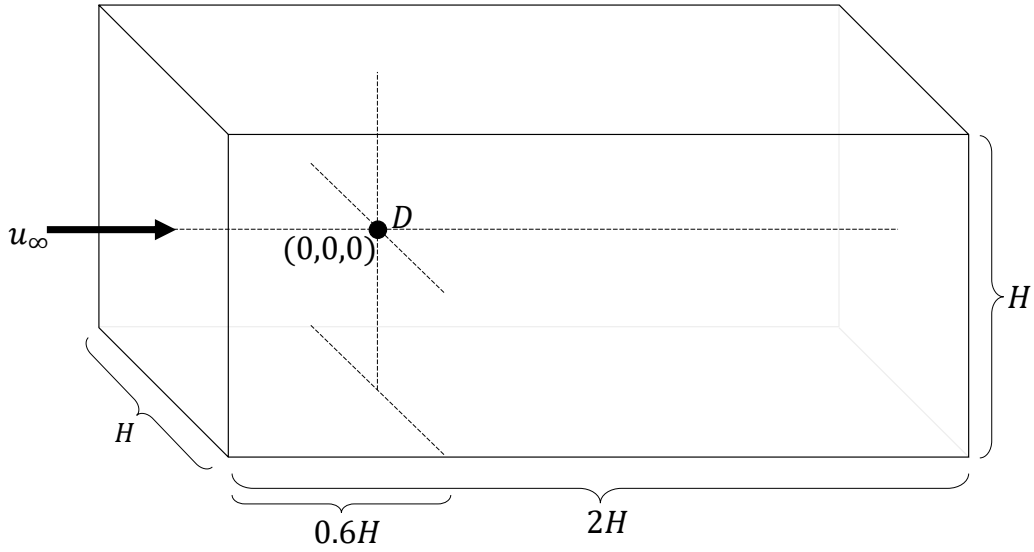


Figure E.3 Geometry of the calculation domain and position of the particle for all simulations, with D the diameter of the spherical particle. The dimension H will be determined in section E.4.1.

the velocity [94]. At each refinement step, the convergence criterion on the absolute norm of the solution residual is set to 10^{-5} , and a relative residual of 10^{-7} is obtained with respect to the initial residual. We use a Cartesian 3D grid and choose to simulate on a domain that totally surrounds the particle. If we had chosen to only consider a half or a quarter of the domain cutting through the particle at $(0,0,0)$ along the z -axis, mesh adaptation would have been hazardous along the axis of symmetry. Moreover, using a domain that encloses the spherical particle greatly helps the iterative solver.

A complete mesh analysis is presented in section E.4.1. The domain size and mesh-sensitivity analyses are carried out using the power-law model, as power-law fluids simulations are more mesh-sensitive and difficult to simulate.

Domain size

Considering laminar flow past a sphere, at $Re = 100$, the thickness of the boundary layer is small compared to the sphere diameter [264]. This means that the velocity close to the sphere rapidly reaches u_∞ . As the Reynolds number lowers down to 0.1, this boundary layer gradually thickens. The domain size H should be large enough to ensure that the resulting drag coefficient does not vary as the domain is further enlarged for low Re . We carry out the

domain size study at $Re = 0.1$ for Newtonian fluids, as the conclusions can be extended to shear thinning flow (see section E.4.2 along with Fig. E.11 for validation of this hypothesis). Notice that all studied domains keep the same proportions (see Fig. E.3).

Four H/D ratios were analyzed. For each ratio, we use the same $\frac{D}{\Delta x}$ factor close to the surface of the sphere, and we operate a 2-step adaptive mesh refinement targeting 20 % of the cells at each step (further details are given in section E.4.1). In Fig. E.4, we notice that, as the domain becomes larger, the error on the drag coefficient decreases compared to the largest domain. We consider that, for $H/D = 60$, a relative error of less than 0.5% is optimal to simultaneously minimize computational costs and error. The size of the particle is $D = 1$, hence $H = 60$. This domain size will be used for all simulations.

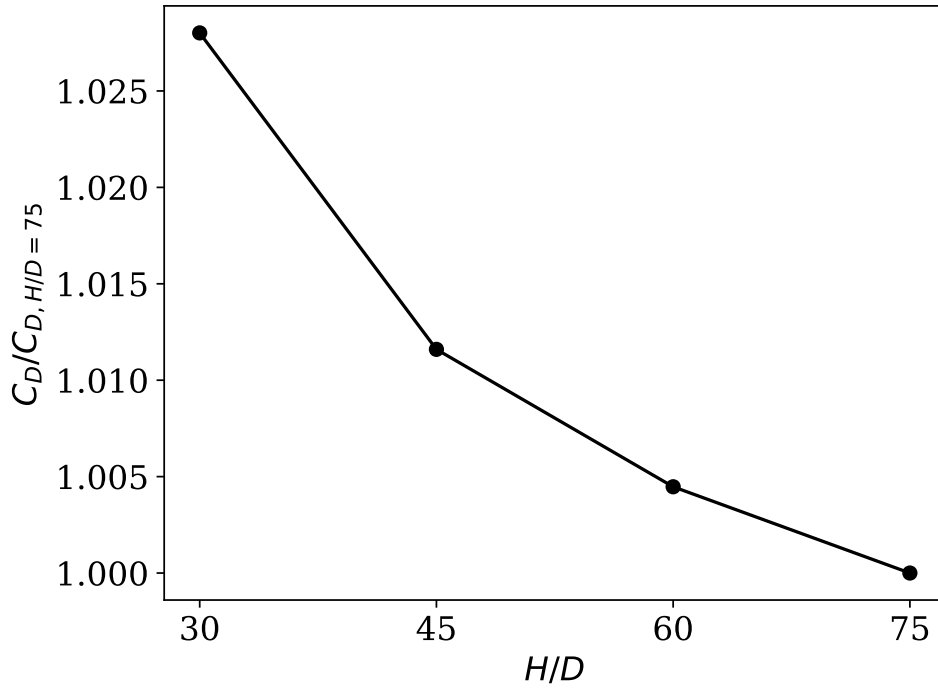


Figure E.4 Evolution of the drag coefficient C_D as H/D is increased at $Re = 0.1$ for Newtonian flow, considering $C_{D, H/D=75} = 244.7$. With an error of less than 1%, the H/D ratio of 60 is chosen.

Discretization

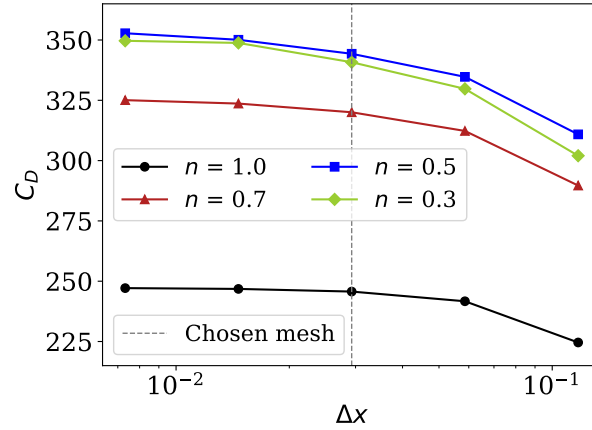
Because we are using an immersed boundary method to take the no-slip condition on the surface of the sphere into account, we will not use a conformal grid but rather mesh the entire calculation domain using a structured Cartesian mesh. This mesh should be fine close to the

particle surface to properly capture the flow pattern around it. The mesh should however be coarser farther from the particle, since the flow pattern will not vary as much. We are therefore using a homogeneous grid of $16 \times 8 \times 8$ cells, all of size 7.5^3 , that will later be refined around the particle. We then define a refinement zone close to the particle inside which the cells are refined six times. We choose a cubic refinement zone for low Reynolds simulations as the flow is nearly symmetrical on all three axes centering in $(0, 0, 0)$, and we narrow the refinement zone in the x -direction for higher Reynolds simulations. For example, at $\text{Re} = 0.1$, the refinement zone is defined by the cube inside $[-2, -2, -2] \times [2, 2, 2]$, and at $\text{Re} = 100$, all cells inside $[-1.5, -1, -1] \times [4, 1, 1]$ are refined six times. The refined cells inside this zone will be of size 0.117^3 . For all simulations, this grid is the initial grid, or initial level of refinement, where the smallest cells are of size 0.117^3 , and the biggest cells far from the particle are of size 7.5^3 . Hence, the initial grids used for the simulations have a characteristic mesh size of $\frac{\Delta x}{D} = 0.117$ around the particle's virtual boundaries (the rightmost points in Fig. E.5a and Fig. E.5b).

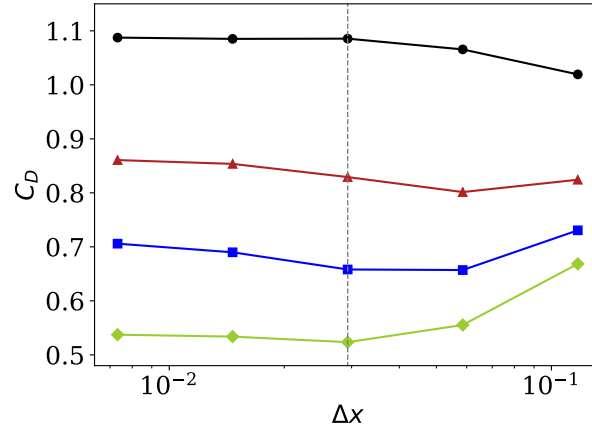
The idea is to keep refining until the simulated drag coefficient does not change any further. At each subsequent refinement step in the simulation (each subsequent points in Fig. E.5), we systematically refine each cell inside a hypershell zone located inside $0.5\frac{D}{2} \leq \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq 1.5\frac{D}{2}$. Simultaneously, we adaptively refine the grid targeting the cells with the greatest error based on the Kelly error estimator applied to the velocity field [94]. Hence, each point in figures Fig. E.5a and Fig. E.5b within a curve represent a level of refinement in the same launched simulation. We operate the analysis covering the n range for $\text{Re} = 0.1$ and $\text{Re} = 100$.

For each simulation, the mesh is refined four times for a total of five levels of refinement, from $\frac{\Delta x}{D} = 0.117$ ($\frac{D}{\Delta x} = 8.5$) to $\frac{D}{\Delta x} = 7.3 \times 10^{-3}$ ($\frac{\Delta x}{D} = 136$) (the leftmost points in Fig. E.5a and Fig. E.5b). We can observe in Fig. E.5 that for $\text{Re} = 0.1$ and for $\text{Re} = 100$, the Newtonian solution ($n = 1$) is rapidly mesh-independent. There is a relative error between the calculated drag coefficient for the median refinement at $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ and the finest mesh of 0.6% for $\text{Re} = 0.1$ and 0.2% for $\text{Re} = 100$. We also notice that the solution does not converge as rapidly for shear thinning cases. Indeed, in Fig. E.5a, the drag coefficient convergence is delayed as n decreases. For $\text{Re} = 100$ (Fig. E.5b), reaching a converged solution seems hazardous for shear thinning flow as the evolution of the drag force is not monotonic. This is due to the needed convergence on the viscosity profile, which is not the case for Newtonian simulations. The viscosity range throughout the domain becomes exponentially larger as n decreases; hence the nonlinear component of equation (E.9) becomes greater and results in a much stiffer problem. For this reason, a thorough mesh-independence study is needed and its importance is even more relevant as n decreases. Conclusions on mesh-independence cannot

be drawn from Newtonian simulations only.



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



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

Figure E.5 Evolution of the drag coefficient (C_D) as the cells near the particle are refined, for different n values for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$, using the power-law model. The chosen mesh size ($\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$) is in grey.

For all n , the average error calculated between the drag coefficient at $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ and the most refined mesh ($\frac{\Delta x}{D} = 7.32 \times 10^{-3}$) is below 2%, and the maximal error is encountered at $(\text{Re}, n) = (100, 0.5)$ (6.8%). Accessing the next level of refinement ($\frac{\Delta x}{D} = 1.46 \times 10^{-2}$) adds up to 2.4 times the computational costs of reaching the previous level at $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$, and exceptionally 11.1 times for the $(\text{Re}, n) = (100, 0.3)$ case. A level of refinement of $\frac{\Delta x}{D} = 2.93 \times 10^{-2}$ is chosen to minimize the error while maintaining reasonable computational costs.

Fig. E.6 presents two examples of meshes used for simulations at $\text{Re} = 0.1$ and $\text{Re} = 100$. The meshes present eight levels of cell refinement, with the coarsest cells of size 7.5 and the finest cells of size 2.93×10^{-2} . We notice in Fig. E.6a, for $\text{Re} = 0.1$, that cells far from the particle are refined due to velocity diffusion captured by the Kelly error estimator and that the refinement is relatively symmetrical. In Fig. E.6b, at $\text{Re} = 100$, with a thin boundary layer and a long wake downstream, the refinement focuses on the particle region and the wake region. We can also acknowledge that all cells inside $0.5 \frac{D}{2} \leq \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq 1.5 \frac{D}{2}$ have reached the maximal level of refinement.

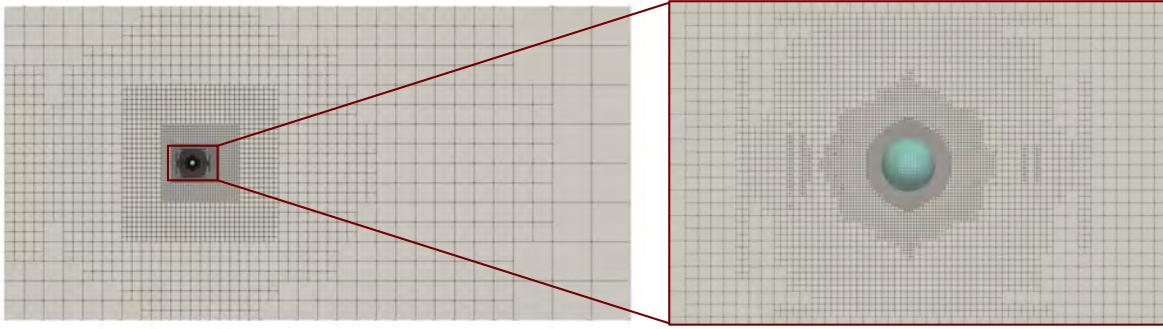
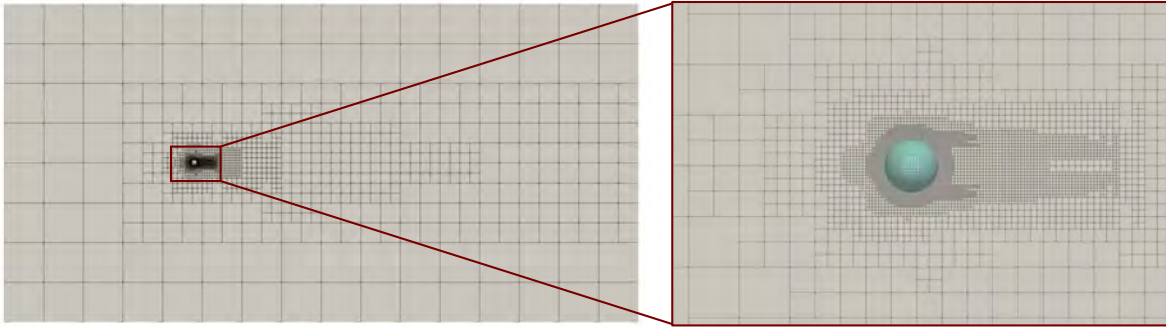
(a) $\text{Re} = 0.1$ (b) $\text{Re} = 100$

Figure E.6 Examples of xy -plane mesh slices used for (a) $\text{Re} = 0.1$ and (b) $\text{Re} = 100$, with $H/D = 60$ around the spherical particle (in turquoise).

On choosing a minimal shear rate for power-law simulations

As mentioned in section E.2.2, the power-law model is ill-posed for problems that encounter very low shear rates, which is the case for this problem. For $\text{Re} = 0.1$, a thorough resolution

of the velocity profile further from the particle is important to achieve a drag coefficient convergence. As pictured in Fig. E.7, using a $\dot{\gamma}_{\min} = 10^{-2}$ significantly alters the calculated velocity and viscosity profiles, it therefore alters the drag force. For each Re , it is crucial to perform a sensitivity analysis on the minimal shear rate. We choose a value that assures an accurate estimation of the drag force, while again minimizing computational costs and providing converged solutions.

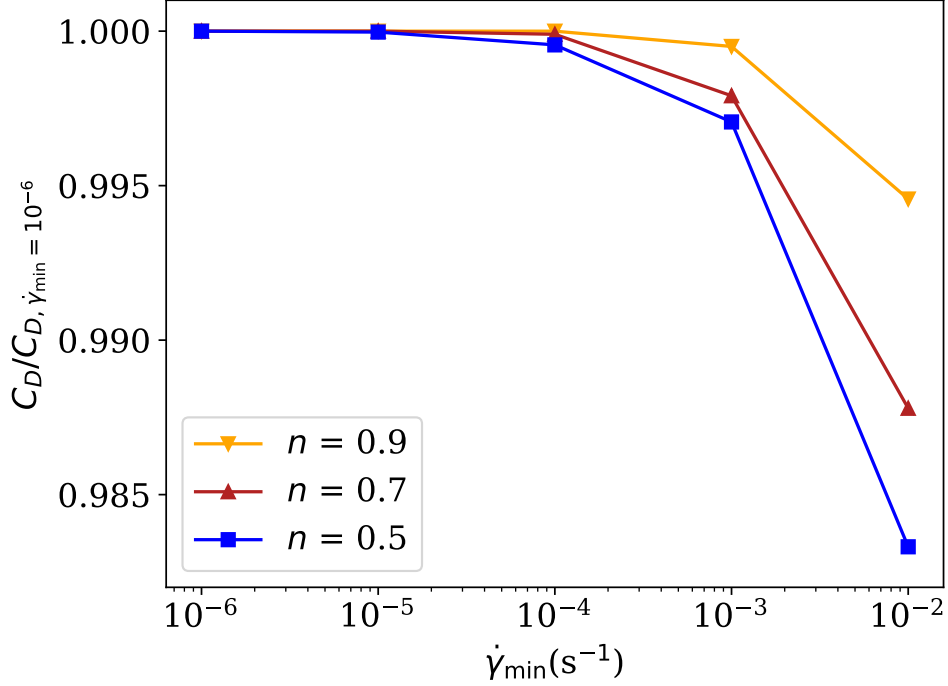


Figure E.7 Evolution of the drag coefficient (C_D) for $n = \{0.5, 0.7, 0.9\}$ for a series of minimal shear rate ($\dot{\gamma}_{\min}$) values used for power-law simulations, at $Re = 0.1$. A $\dot{\gamma}_{\min} < 10^{-4}$ is ideal for $Re = 0.1$, for all n .

E.4.2 Results and discussion

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

Model fitting for Newtonian flow

Many models in the literature that cover our simulations Re range (from 0.1 to 100) were compared to our results (see Fig. E.8) [2, 29–33, 265–267]. Most models are, in general, in

excellent agreement with our results (less than 4% error). Dhole *et al.*'s model is a drag correlation developed for shear thinning flows in which we have set n to 1. This model was initially developed to fit a wide range of n , leading to a more significant error (up to 5%) compared to the present work's results than other correlations restricted to Newtonian fluids. On the basis of a least squares method, the model given by Clift *et al.* (see (E.22)) is easily the most adequate for the range of Reynolds number investigated [29, 268].

$$C_{D,0} = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}} \left[1 + 0.1315 \text{Re}^{0.82 - 0.05 \log_{10} \text{Re}} \right], & \text{if } \text{Re} \leq 20 \\ \frac{24}{\text{Re}} \left[1 + 0.1935 \text{Re}^{0.6305} \right], & \text{if } \text{Re} \geq 20 \end{cases} \quad (\text{E.22})$$

$C_{D,0}$ represents an estimate of $C_D|_{n=1}$ for $\text{Re} \in [0.1, 100]$ using Clift *et al.*'s correlation, and $C_{D,0}/C_D|_{n=1}$ is pictured in Fig. E.8 in a thick yellow curve. All other models are shown in ascending order of $\mathcal{L}^2$ norm of the error.

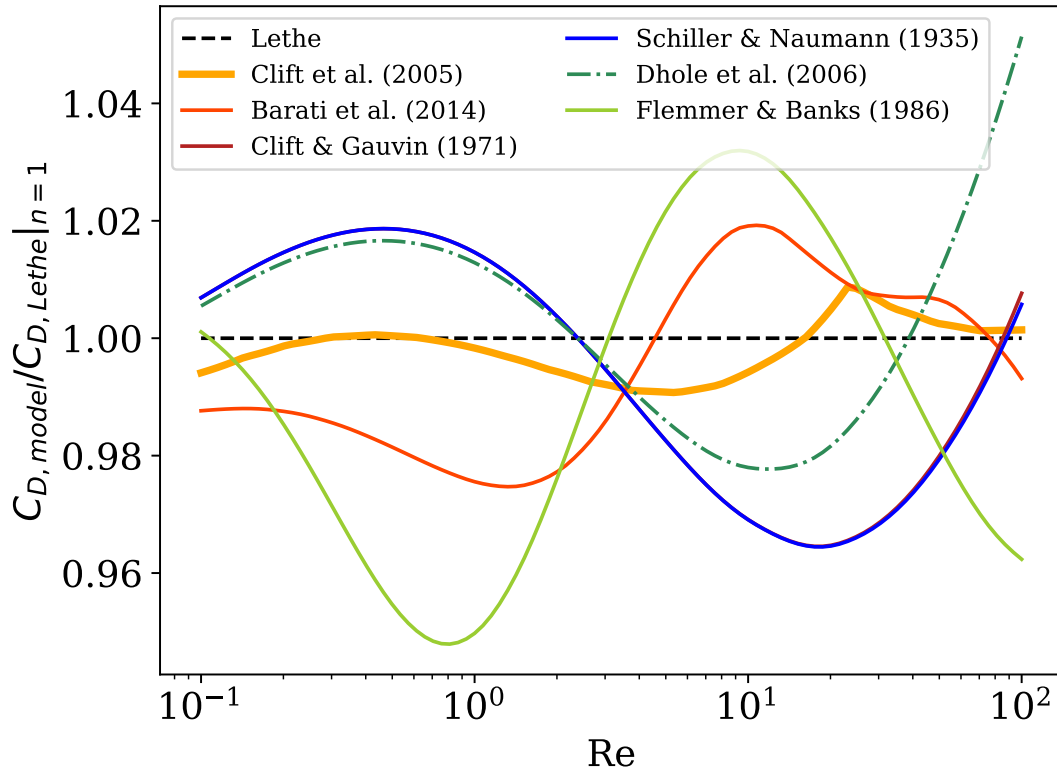


Figure E.8 Comparison between drag coefficient models given in the literature and our results for $\text{Re} \in [0.1, 100]$ at $n = 1$ (the ideal ratio is $C_D/C_{D,\text{Lethe}} = 1$, in black) [2, 29–33]. The chosen model is Clift *et al.*'s, in yellow. The abrupt slope change in the yellow curve at $\text{Re} \approx 23$ is due to the shift in the formulation at $\text{Re} = 20$ (see equation (E.22)).

Power-law simulation results

We first carry out power-law-modeled simulations for $n \in [0.3, 0.9]$. The drag coefficients for all n values through the Re range are compared to $C_{D,0}$ (E.22), in order to quantify the effect of shear thinning behaviors on the drag. As many researchers observed, we notice in Fig. E.9 that there is a switch in the shear thinning effect close to a Re of 5 or 6 [2, 34, 256, 269]. This phenomena is essentially due to the cessation of the viscosity dominated regime. It looks as though the switch is not at a constant Re for all n . On the right part ($\text{Re} \gtrsim 5$), we notice that when decreasing n , the drag is commensurately lower than for Newtonian fluids as Re increases. The change of slope for $n \geq 0.6$ at $\text{Re} \approx 23$ is due to the adjustment of the model for $C_{D,0}$ at $\text{Re} = 20$ (see (E.22)). On the left part ($\text{Re} \lesssim 5$), as n decreases, the drag seems to be larger as Re decreases up until $n = 0.4$, after which the shear thinning effect decreases. On both sides, the slopes are monotonic for the given Re extent, although they do not seem to diverge : the $C_D/C_{D,0}$ values tend to plateau. We design a correlation that reproduces this pattern.

The chosen form for $C_D/C_{D,0}$ (E.23) is a hyperbolic tangent centering in $\text{Re}_i(n)$, where $\alpha(n)$ is the amplitude, $\beta(n)$ defines the speed at which $C_D/C_{D,0}$ reaches $\alpha(n)$ on both sides of Re_i and the vertical displacement is set to 1. All three expressions are shown in equation (E.24). $\alpha(n)$ is a quadratic function due to the nonlinearity of $C_D/C_{D,0}|_{\text{Re}=0.1}$. On that matter, other researchers also observed a quadratic pattern in the correction factor for the drag coefficient for creeping flow; indeed, it is found that $C_D/C_{D,0}$ decreases for $n < 0.4$, as seen at the leftmost of Fig. E.9 [258, 270]. $\beta(n)$ seems to increase as $1 - n$ increases, and Re_i seems to linearly decrease as $1 - n$ increases. The $\mathcal{L}^2$ norm of the error on $C_D/C_{D,0}$ is minimized when splitting the Re extent in two, as the curve pattern is slightly different on both sides. We choose a Re of 6 to split the domain.

$$\frac{C_D}{C_{D,0}}(n, \text{Re}) = \alpha(n) \tanh \left(\beta(n) \log_{10} \left(\frac{\text{Re}}{\text{Re}_i(n)} \right) \right) + 1 \quad (\text{E.23})$$

$$\begin{aligned} \alpha(n) &= \alpha_1(1 - n)^2 + \alpha_2(1 - n) \\ \beta(n) &= \beta_1(1 - n) + \beta_2 \\ \text{Re}_i(n) &= \text{Re}_{i,1}(1 - n) + \text{Re}_{i,2} \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

Values in Tab. E.1 minimize the $\mathcal{L}^2$ norm of the error for $n \in [0.3, 0.9]$ while keeping a maximal error of 0.7% at the junction of each equation for $\text{Re} = 6$.

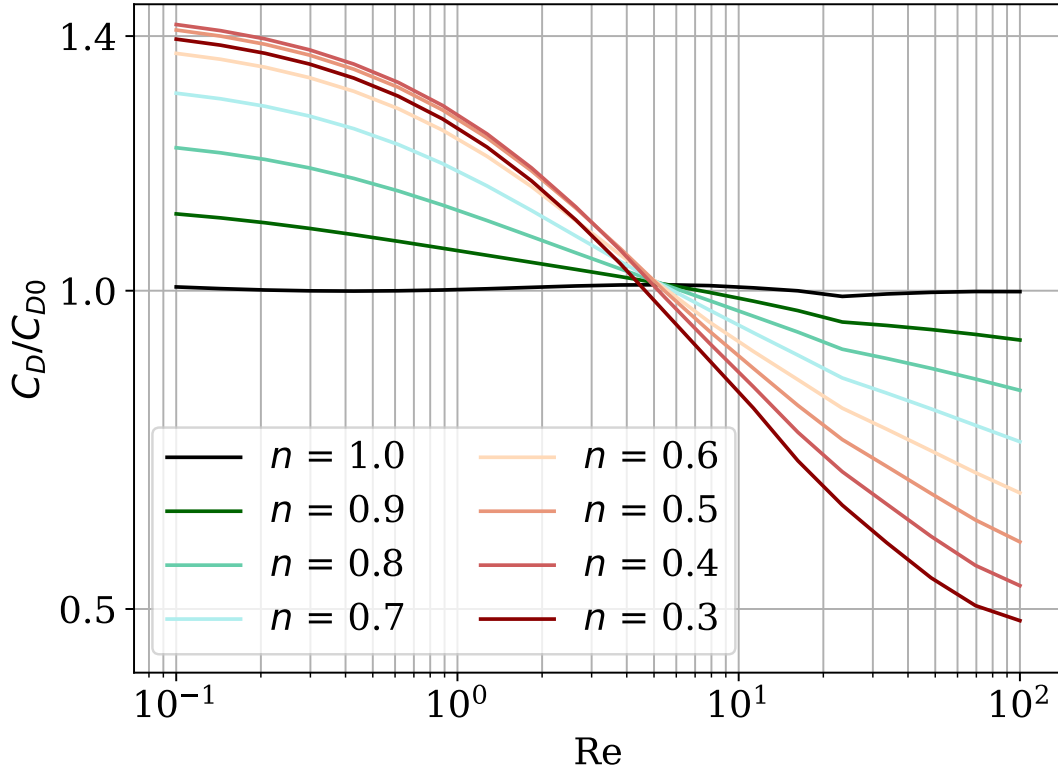


Figure E.9 Simulation drag coefficient ratios ($C_D/C_{D,0}$), with $C_{D,0}$ defined in (E.22), for Re from 0.1 to 100 for all simulated n values using the power-law model. The subtle slope change at $Re \approx 23$ is due to the formulation change in (E.22).

Fig. E.10 portrays the numerical results of the drag coefficients along with the correlation given in equation (E.23). The average coefficient of determination for the suggested correlation on all n is $R^2 = 0.998$. The drag coefficients are compared to other numerical results in the literature [2, 3, 34–36]. We observe a very satisfying agreement with the previous article’s results.

Fig. E.11a, E.11b and E.11c show flow patterns and streamlines close to the particle for Newtonian flow at $Re = 0.1$, 5.5 and 100, respectively. The subsequent figures show shear thinning flow patterns for n values of 0.7, 0.5 and 0.3.

We notice that, at $Re = 0.1$, there is no notable difference in the streamlines patterns between n values, but the velocity profile is narrower for lower n , meaning that the velocity around the particle will reach u_∞ more rapidly for lower n . For shear thinning flow, since there is a decrease in viscosity in high shear regions, namely close to the particle in this case, we observe a thinning of the boundary layer. The hypothesis made in section E.4.1 in which

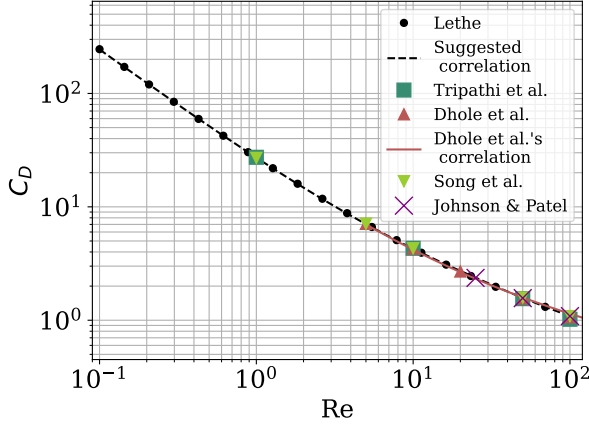
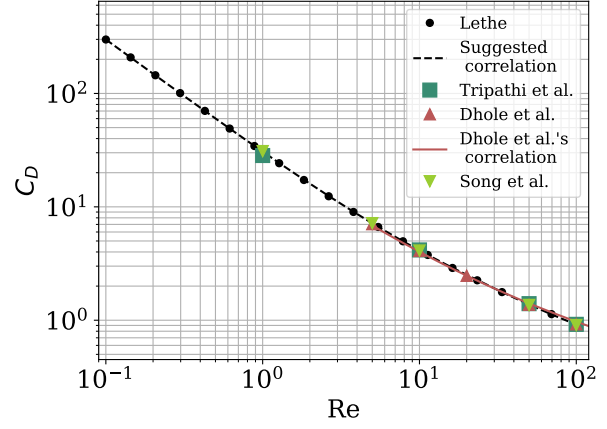
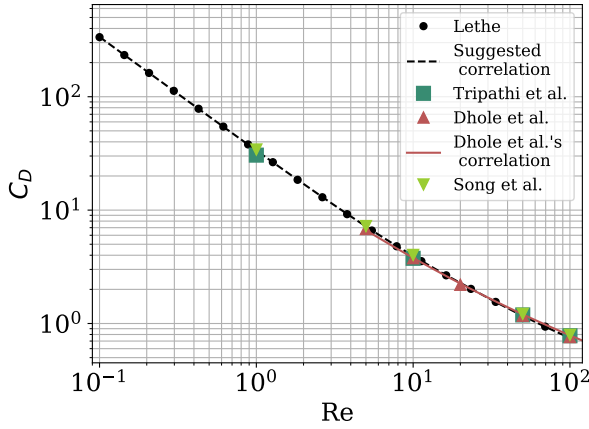
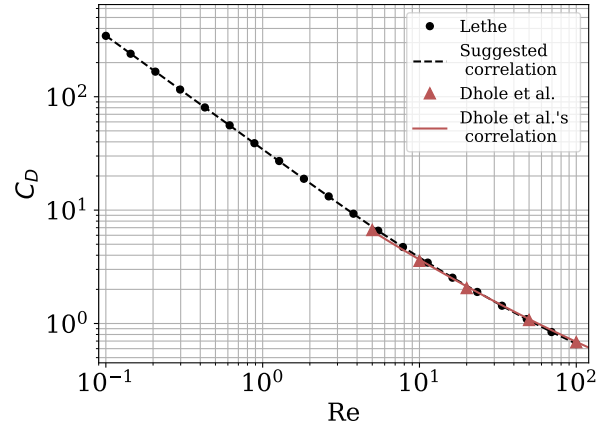
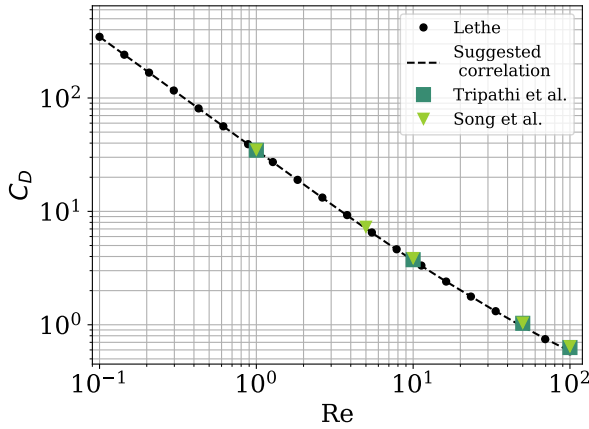
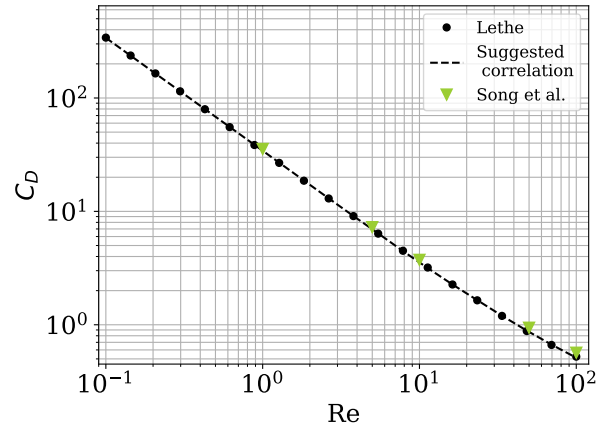
(a) $n = 1$ (b) $n = 0.8$ (c) $n = 0.6$ (d) $n = 0.5$ (e) $n = 0.4$ (f) $n = 0.3$

Figure E.10 Calculated drag coefficients for power-law fluids from the Lethe simulations and the suggested correlation compared to results from Tripathi *et al.* [34], Dhole *et al.* [2] and Song *et al.* [3, 35]. Newtonian results ($n = 1$ in (a)) are also compared to Johnson & Patel's [36].

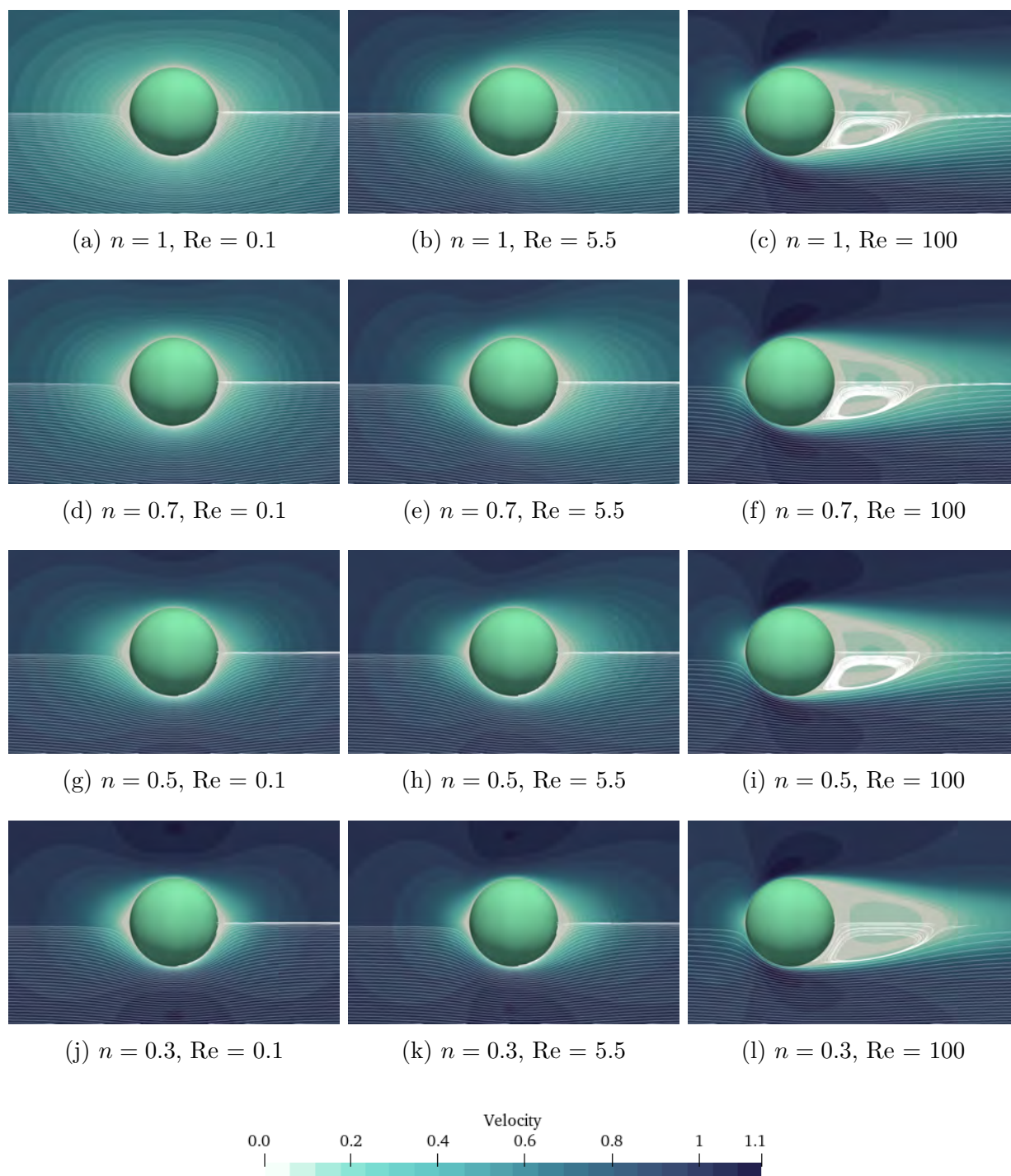


Figure E.11 xy -plane velocity profiles with streamlines (in white) around the spherical particle (in turquoise) for $Re = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.

Table E.1 Values for correlation equation (E.24).

Parameter	$\text{Re} \leq 6$	$\text{Re} \geq 6$
α_1	1.56444	0.50762
α_2	-1.67640	-1.34469
β_1	0.97094	0.25949
β_2	0.45533	0.57677
$\text{Re}_{i,1}$	-3.14987	
$\text{Re}_{i,2}$	6.93023	

we stated that the domain size analysis could be conducted for $n = 1$ and extended to shear thinning flow is validated, as it seems that the most diffusion of momentum occurs for Newtonian fluids. Although the viscosity is lower close to the spherical particle for lower n values, results show that shear rates observed are greater (see Tab. E.2), and that the viscous contribution to the drag does not noticeably change for $\text{Re} \lesssim 5$. We rather notice that, as n decreases, the upstream-downstream dimensionless pressure difference expands for $\text{Re} = 0.1$ (see Tab. E.3), and conclude that the increase of the pressure difference drives the increase on the drag. Indeed, Fig. E.12 shows that the pressure drag contribution is proportionally larger as n decreases, and that is the case for the entire Re extent.

Table E.2 Dimensionless maximal shear rate on the surface of the sphere for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.

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

Table E.3 Dimensionless upstream-downstream pressure difference on the surface of the sphere for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = \{1, 0.7, 0.5, 0.3\}$ using the power-law model.

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

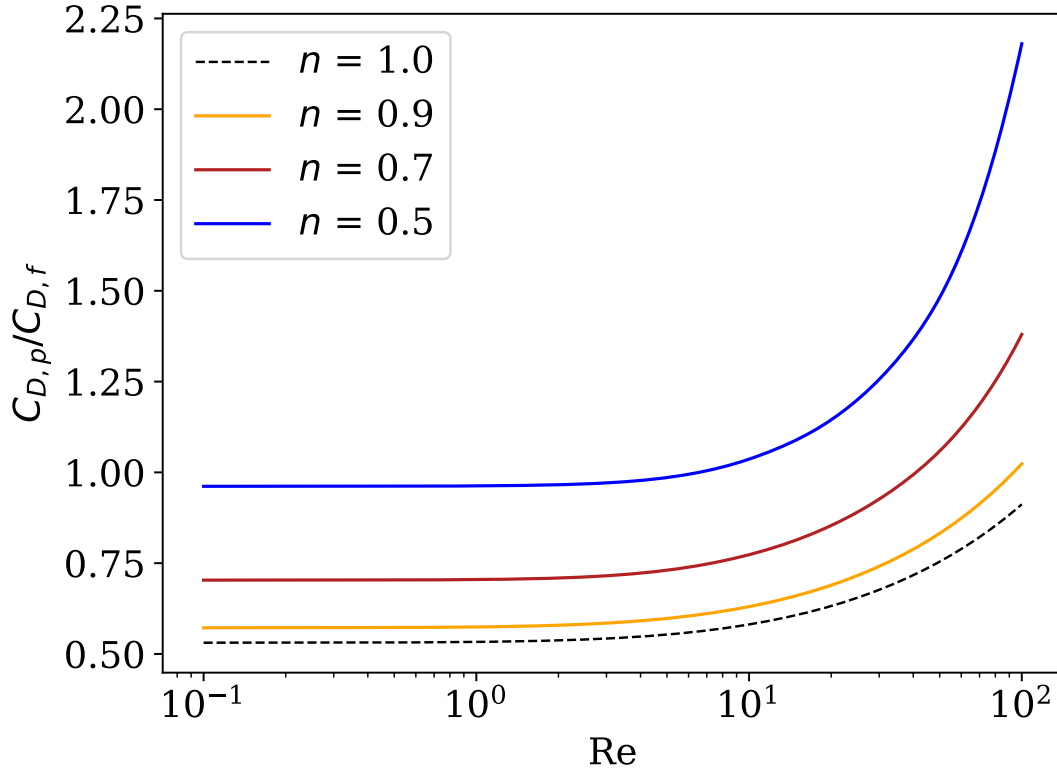


Figure E.12 Evolution of the ratio between the pressure drag ($C_{D,p}$) and the friction drag ($C_{D,f}$) for $n = \{1, 0.9, 0.7, 0.5\}$ when increasing the Reynolds number using the power-law model.

At $Re = 5.5$, all $C_D/C_{D,0}$ drag coefficient results are similar regardless of n (see Fig. E.9), but the velocity profiles are fairly different. It could mean that the slight gain in pressure drag (due to the increase of pressure difference (Tab. E.3)) is counterbalanced by a drop in viscous drag. From the velocity profiles, no circumstance would explain the switch at $Re = 5.5$, in addition to the fact that all Reynolds numbers are *a priori* calculated, and hence are not necessarily the effective Re .

At $Re = 100$, the velocity profile upstream barely changes with n , whereas downstream, the tail seems to be narrower and longer when n lowers (see Tab. E.4). As n decreases, the separation point is slightly moved upstream, and the wake is elongated. The enhancement of the tail results in more backflow towards the particle, which reduces the drag. In addition, we notice that the upstream-downstream pressure difference does not vary as n decreases, hence the pressure drag contribution does not vary. This can explain why, at $Re \gtrsim 5$, drag forces are lower as n decreases. To summarize, for $Re \lesssim 5$, the pressure drag increases as n

decreases, and for $\text{Re} \gtrsim 5$, the viscous drag decreases as n decreases, but the pressure drag does not.

Wake lengths at $\text{Re} = 100$ match those of Dhole *et al.* and Song *et al.*, as can be seen in Tab. E.4 [2, 3]. These results, along with comparisons shown in Fig. E.10, lend credibility to the developed framework and the results in the present work for the power-law model.

Table E.4 Comparison of the dimensionless wake length (L/D) between present work values and values from the literature [2, 3] for power-law fluids.

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

Carreau simulation results

As mentioned above, power-law fluids are ill-posed in the zero-shear limit. Carreau fluids have a Newtonian plateau and have a well-defined viscosity at zero shear. For a low dimensionless relaxation time (Λ) fluid, the transition from the plateau to the descending region (see Fig. E.1) is delayed to high shear rates. Its behavior will resemble the Newtonian behavior. Higher Λ will result in a more power-law-like pattern while never fully reaching it since the shear rate becomes asymptotically zero as the distance from the sphere increases.

Carreau fluids drag coefficient results are shown in Fig. E.13 for n values of 0.9, 0.7, 0.5 and 0.3, in which numerous relaxation times are portrayed and compared to power-law and Newtonian results.

For $\Lambda = 0.1$, the drag coefficients are relatively close to those for a Newtonian fluid for all n , as expected. As shown in Tab. E.2, the maximal shear rate on the surface of the sphere essentially increases when Re increases. For $\text{Re} \lesssim 5$, the shear rate at the surface of the particle is relatively low, and for $\Lambda \lesssim 1$, the maximal shear rate is still smaller than the transitioning point in Fig. E.1 (region 3). As Re increases, the shear rate close to the particle becomes larger, reaching the critical shear rate, at which point the viscosity decreases. This loss of viscosity, in higher shear rate regions, reduces the drag. Hence, for $\Lambda \lesssim 1$, a notable difference between the drag given by a Newtonian simulation and a Carreau simulation will only occur at high Reynolds ($\text{Re} \gtrsim 5$). There is therefore no significant change in the drag coefficient for ($\text{Re} \lesssim 5$) up until $\Lambda = 1$.

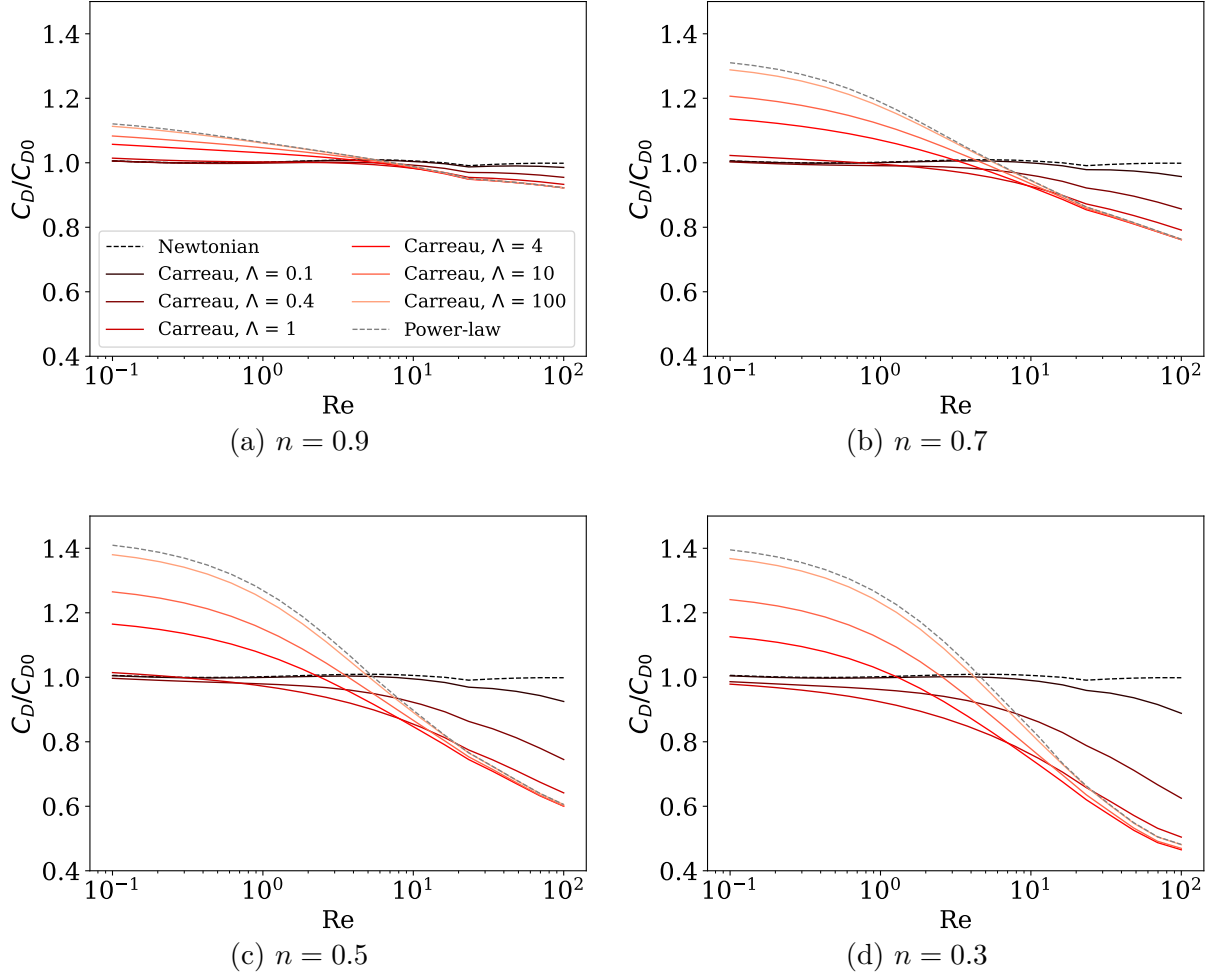


Figure E.13 Simulation drag coefficient ratios ($C_D/C_{D,0}$), with $C_{D,0}$ defined in (E.22) for Re from 0.1 to 100 comparing Newtonian flow, power-law modeled flow and all Carreau modeled simulations for (a) $n = 0.9$, (b) $n = 0.7$, (c) $n = 0.5$ and (d) $n = 0.3$.

Considering the given *a priori* Re definition (E.8), the *a priori* shear rate on the sphere is 1 s^{-1} . This would coincide with the order of magnitude of Λ at which the shear rate on the surface of the sphere is larger than the critical shear rate, even for $\text{Re} \lesssim 5$. For $\Lambda > 1$, as the critical shear rate is lowered (see Fig. E.1), the viscosity power-law region takes a more predominant scope, and the drag coefficient is more affected by its shear thinning behavior. We notice that for the highest value of Λ , the drag coefficient profile is very close to that of the power-law curve.

Surprisingly, the calculated drag coefficients for all Carreau fluids do not meet at $C_D/C_{D,0} = 1$ close to $\text{Re} = 5.5$ (see Fig. E.13). In fact, regardless of n , the drag coefficients for Carreau fluids never exceed either the power-law prediction or the Newtonian prediction. Using a Carreau model does not greatly change the viscosity on the surface of the particle, but at a great distance from the surface, since the viscosity is capped, the flow pattern will inevitably change. When using the power-law model, the drop in viscosity close to the particle reduces the drag, but the very high viscosity far from the particle has an important effect on the drag. With the Carreau model, the upper limit on the viscosity reduces the drag. This may explain why, at $\text{Re} \approx 5.5$, the Carreau calculated drag coefficients are systematically lower. Indeed, Carreau fluids benefit from a viscosity reduction on the surface of the particle, without having the very high viscosity far from the particle that the power-law model generates.

Flow patterns and streamlines for $n = 0.3$ with $\Lambda = \{0.4, 4\}$ are shown in Fig. E.14. In essence, for all pictured Reynolds numbers, the velocity profile has a pattern between the Newtonian flow and the power-law model flow for $n = 0.3$, respectively to their Reynolds number. The $\Lambda = 0.4$ velocity pattern looks closer to the Newtonian one, and the $\Lambda = 4$ resembles the power-law pattern. For $\text{Re} = 0.1$ and $\text{Re} = 5.5$, we appreciate the forming of a thinner boundary layer for $\Lambda = 4$. For $\text{Re} = 100$, a much longer wake region for $\Lambda = 4$ explains the large drop in the drag force observed in Fig. E.13d.

As mentioned in the previous section, it is nearly impossible to draw further conclusions comparing the drag coefficients between Λ values at a consistent Re; since all given Re are *a priori* estimations, they are inevitably not effective Re. In fact, many other researchers used a slightly different definition of Re, omitting the n and Λ values [37, 257, 259, 271].

Carreau results at $\text{Re} = 0.1$ are compared to experimental drag coefficients presented by Chhabra & Uhlherr in the creeping flow regime [37]. The fluids used in Chhabra & Uhlherr's work are chosen to have the least elastic properties, to best suit the Carreau model that treats inelastic fluids. The article presents results in the fashion of a correction factor to the drag coefficient predicted for Newtonian flow, where $C_{D,0} = 24/\text{Re}$ and the shear-thinning drag coefficient, in creeping flow, being $C_D = XC_{D,0}$. Chhabra & Uhlherr defined their

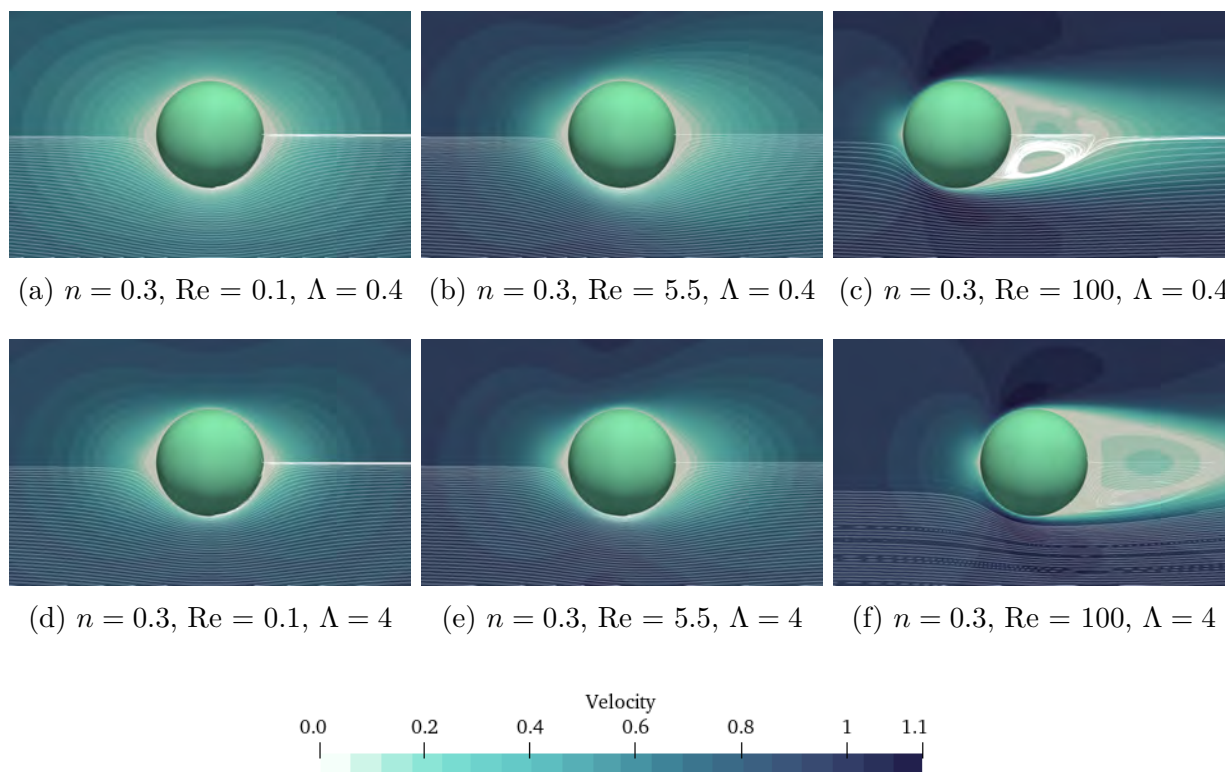


Figure E.14 xy -plane velocity profile with streamlines (in white) around spherical particle (in turquoise) for $\text{Re} = \{0.1, 5.5, 100\}$ and $n = 0.3$ using the Carreau model with $\Lambda = \{0.4, 4\}$.

Reynolds as $\text{Re} = \rho u_\infty D / \eta_0$, that is slightly different from equation (E.8). The present work's Reynolds numbers are adapted to their definition to compare the correction factors appropriately. Since $((1 + \Lambda)^2)^{\frac{n-1}{2}}$ of equation (E.8) is lesser than 1 for shear thinning flow, the newly calculated Re numbers for Lethe simulations are all less than 0.1. We are, therefore, well into the creeping flow regime. Their dimensionless relaxation times are also corrected, as they used a different definition ($2\lambda u_\infty D^{-1}$). Therefore, their Λ are divided by 2 to match equation (E.21).

The correction factors as a function of the dimensionless relaxation time are presented in Fig. E.15. As expected, upon decreasing Λ , X reaches 1 as the behavior of the fluid approaches the Newtonian behavior. The drag coefficient decreases as Λ increases; this was also observed by Hsu *et al.* [259]. Experimental results are shown for $n = \{0.75, 0.53\}$, indicating excellent agreement with the numerical results. This validation case lends further credibility to the proposed non-Newtonian framework.

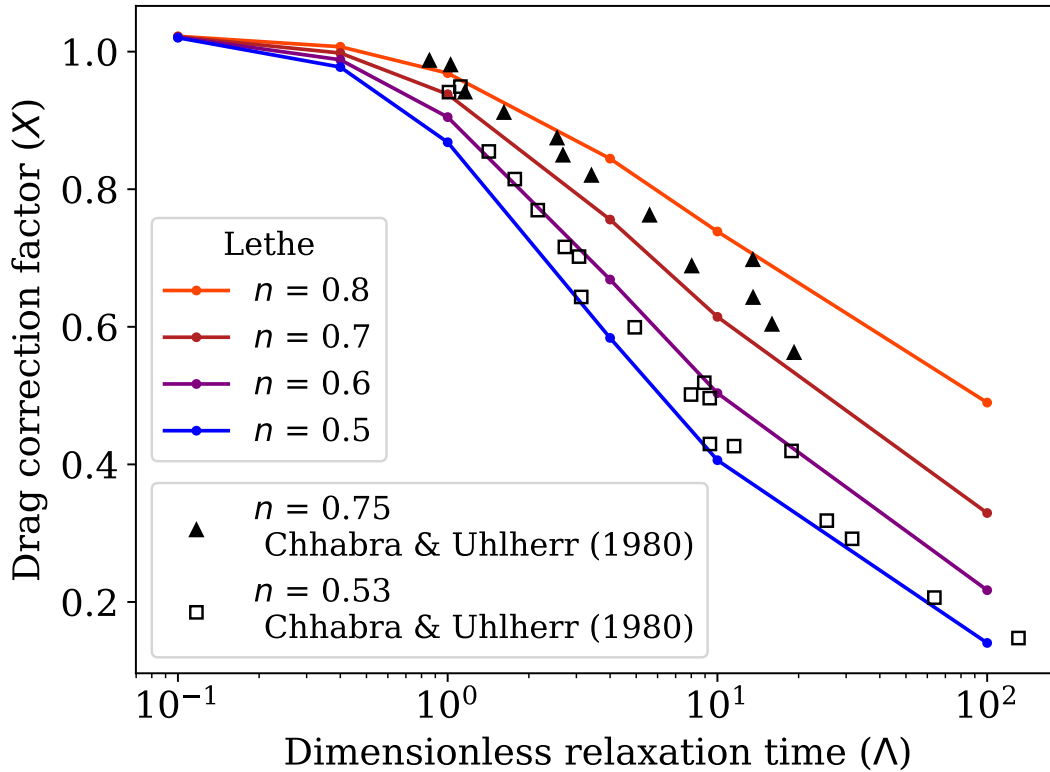


Figure E.15 Drag coefficient correction factors (X in $C_D = \frac{24}{\text{Re}} X$) at $\text{Re} = 0.1$ simulated in Lethe using the Carreau model as a function of the dimensionless relaxation time Λ , compared to experimental data provided by Chhabra and Uhlherr [37] in the creeping flow regime.

Drag coefficients for Newtonian, power-law and Carreau simulations are available [272].

E.5 Conclusion

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

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

Additionally, as Re increases, $C_D/C_{D,0}$ systematically decreases for $\text{Re} \in [0.1, 100]$, regardless of the relaxation time. Drag coefficient results using the power-law model are compared to numerical results in the literature and show good agreement. We propose a correlation for the drag coefficient of power-law fluids compared to Newtonian fluids. The correlation is particularly well-posed, we obtain a coefficient of determination $R^2 = 0.998$. It is observed that a logarithmic spacing between the Reynolds numbers used for the simulations greatly helped in generating a formulation that evenly minimized the error over the Re extent, as the behavior of C_D is $\log(\text{Re})$ -dependent. The authors believe this correlation can be further extended to lower n values because of the hyperbolic tangent behavior of the correction.

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

E.6 Acknowledgements

The authors of this article would like to warmly thank the `deall.II` community for their volunteer support. Carole-Anne Daunais is grateful for financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) through CSG Masters

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