

Approche eulérienne mésoscopique des écoulements anisothermes turbulents gaz - particules.

Enrica MASI*, Benoît BEDAT, Olivier SIMONIN

IMFT - Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse – UMR 5502 CNRS / INPT / UPS

Allée du Professeur Camille Soula – 31400 Toulouse

*(auteur correspondant : masi@imft.fr)

Résumé - L'approche eulérienne mésoscopique proposée par Février [1] pour la modélisation dynamique des écoulements turbulents gaz - particules, est utilisée dans le cadre de l'étude d'un jet temporel gazeux turbulent anisotherme chargé en particules. Dans ce travail cette approche est étendue à la température des particules et utilisée pour analyser les résultats de simulations numériques couplant une DNS gazeuse avec un suivi lagrangien d'une nappe des particules froides.

1. Introduction

De nombreuses études expérimentales et numériques récentes des écoulements gaz - particules ont mis en évidence le rôle prépondérant de l'inertie des particules sur les mécanismes de dispersion et de concentration préférentielle en écoulement turbulent. En particulier, il a été montré que les vitesses de particules proches, faiblement inertielles, sont fortement corrélées en raison de l'interaction locale avec la même turbulence fluide. En revanche, les vitesses de particules proches présentant une grande inertie, et donc un plus grand temps de réponse à la turbulence, sont décorréélées suite à la mémoire qu'elles gardent des interactions avec l'écoulement fluide à des distances comparables ou supérieures à l'échelle intégrale spatiale de la turbulence. Par conséquent, dans le cas limite du scalaire passif la fonction de corrélation spatiale des vitesses d'une paire de particules suit une forme exponentielle décroissante analogue à celle du fluide ([2]), alors que les particules, présentant une très grande inertie, possèdent des distributions de vitesse proches de celles données par la théorie cinétique des gaz ([3], [4]). Une approche statistique, le Formalisme Eulérien Mésoscopique (MEF), a été développée par Février et al. [5] pour pouvoir séparer les deux aspects corrélé et décorrélé et ainsi faciliter l'interprétation et la modélisation de la distribution spatiale des vitesses de particules en écoulement turbulent. Dans ce papier, nous étendons l'approche mésoscopique à la température et nous l'appliquons ensuite aux résultats d'une « expérience numérique ». Cette « expérience numérique » consiste dans l'application de la simulation numérique directe (DNS) couplée avec le suivi lagrangien (DPS) d'un grand nombre de particules au calcul de la dispersion d'un jet turbulent gazeux froid, chargé en particules, dans une turbulence homogène isotrope chaude monophasique.

2. Le Formalisme Eulérien Mésoscopique et son extension à la température

L'approche mésoscopique est basée sur l'hypothèse qu'en régime dilué la corrélation spatiale entre particules est induite par les interactions des particules avec l'écoulement fluide turbulent et non par les collisions entre particules ou les interactions hydrodynamiques. Cette approche découle du comportement chaotique de particules inertielles interagissant avec une même réalisation de l'écoulement fluide. En effet, les petites variations dans les conditions initiales des particules sont très largement amplifiées à cause de leur nature inertielle.

Cette approche permet la décomposition de la vitesse en deux contributions :

- un champ continu d'une variable locale et dépendante du temps, appelée Vitesse Eulérienne Mésoscopique (MEPV) ou vitesse corrélée, qui est partagée par toutes les particules;
- une distribution de vitesse lagrangienne dite Quasi-Brownienne (QBVD) ou décorrelée (RUV) qui vérifie l'hypothèse du chaos moléculaire.

De la même façon, en écoulement anisotherme il doit exister une corrélation spatiale entre les températures des particules et, en écoulement dilué, il est également légitime de supposer que cette corrélation est induite uniquement par les transferts avec la phase fluide et non par les transferts entre particules. On doit donc pouvoir appliquer l'approche mésoscopique à la température des particules et définir ainsi une Température Eulérienne Mésoscopique (MEPT) ou corrélé, et une Température Quasi-Brownienne (QBTD) ou decorré (RUT).

2.1. L'écriture du formalisme pour la température

Les statistiques de la phase dispersée peuvent être décrites en termes d'une fonction de densité de probabilité à une particule, obtenue à partir d'un grand nombre $\mathcal{N}_{f\&p}$ de réalisations $\mathcal{H}_{f\&p}$ du même écoulement turbulent gaz – particules ([8]). Mais cette approche ne contient plus aucune information concernant les corrélations spatiales ou temporelles entre les vitesses des particules. Pour pallier cette limitation, l'approche mésoscopique propose de caractériser les statistiques de la phase dispersée associées à une réalisation fluide particulière quelconque \mathcal{H}_f . Pour obtenir ces statistiques on fait l'hypothèse qu'il existe un grand nombre \mathcal{N}_p de réalisations \mathcal{H}_p de la phase dispersée pour une seule réalisation fluide qui peuvent s'obtenir par des modifications négligeables (d'un point de vue macroscopique) sur les conditions initiales. Si on applique la moyenne d'ensemble, pour les \mathcal{N}_p réalisations \mathcal{H}_p associées à une réalisation fluide \mathcal{H}_f , à la fonction $W_p^{(m)}$ qui décrit une particule quelconque m dans l'espace des phases,

$$W_p^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau | \mathcal{H}_p, \mathcal{H}_f) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(m)}(\tau)) \delta(\mathbf{c}_p - \mathbf{v}_p^{(m)}(\tau)) \delta(\xi_p - t_p^{(m)}(\tau)), \quad (1)$$

on peut définir la fonction de distribution de probabilité (p.d.f.) qui représente le nombre moyen de particules ayant le centre en \mathbf{x} , possédant une vitesse de translation $\mathbf{v}_p^{(m)}(\tau) = \mathbf{c}_p$, une température $t_p^{(m)}(\tau) = \xi_p$ au temps τ et qui s'écrit:

$$\tilde{f}_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, \mathcal{H}_f) = \lim_{\mathcal{N}_p \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}_p} \sum_{\mathcal{N}_p} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}_p} W_p^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, | \mathcal{H}_p, \mathcal{H}_f) \right] \quad (2)$$

Les moments associés à la p.d.f seront alors : la densité numérique locale et instantanée des particules

$$\tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \int \tilde{f}_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\xi_p, \quad (3)$$

la vitesse mésoscopique locale et instantanée

$$\tilde{v}_{p,i}(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \frac{1}{\tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f)} \int c_{p,i} \tilde{f}_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\xi_p, \quad (4)$$

et la température mésoscopique locale et instantanée

$$\tilde{t}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \frac{1}{\tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f)} \int \xi_p \tilde{f}_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\xi_p. \quad (5)$$

Toujours conditionnée par une réalisation fluide \mathcal{H}_f quelconque fixée, la vitesse et la température d'une particule m située en \mathbf{x} au temps τ peuvent s'écrire formellement

$$\mathbf{v}_p^{(m)}(\tau) = \tilde{\mathbf{v}}_p(\mathbf{x}_p^{(m)}(\tau), \tau, \mathcal{H}_f) + \delta \mathbf{v}_p^{(m)}(\tau), \quad t_p^{(m)}(\tau) = \tilde{t}_p(\mathbf{x}_p^{(m)}(\tau), \tau, \mathcal{H}_f) + \delta t_p^{(m)}(\tau), \quad (6)$$

comme la sommation d'une contribution eulérienne mésoscopique et d'une contribution résiduelle propre à chaque particule comme la vitesse $\mathbf{v}_p^{(m)}(\tau)$ et la température $t_p^{(m)}(\tau)$

définies tout au long de sa trajectoire. En définissant l'opérateur statistique de moyenne $\langle \cdot \rangle$ sur un grand nombre N_p de réalisations \mathcal{H}_p conditionnées à une seule réalisation fluide \mathcal{H}_f

$$\langle g | \mathcal{H}_f \rangle = \frac{1}{\tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f)} \int g \tilde{f}_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\xi_p \quad (7)$$

on peut écrire les moments d'ordre supérieur qui caractérisent la vitesse et la température Quasi-Browniennes:

$$\text{le tenseur des contraintes cinétiques} \quad \delta R_{p,ij}(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \langle \delta v_{p,i} \delta v_{p,j} | \mathbf{x}_p(\tau) = \mathbf{x}; \mathcal{H}_f \rangle, \quad (8)$$

$$\text{l'énergie cinétique d'agitation décorrélée} \quad \delta \theta_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \frac{1}{2} \langle \delta v_{p,i} \delta v_{p,i} | \mathbf{x}_p(\tau) = \mathbf{x}; \mathcal{H}_f \rangle, \quad (9)$$

$$\text{le flux de chaleur par le mouvement décorrélé} \quad \delta \Theta_{p,i}(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \langle \delta v_{p,i} \delta t_p | \mathbf{x}_p(\tau) = \mathbf{x}; \mathcal{H}_f \rangle, \quad (10)$$

$$\text{et la variance de température décorrélée} \quad \delta \theta_\theta(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \langle \delta t_p \delta t_p | \mathbf{x}_p(\tau) = \mathbf{x}; \mathcal{H}_f \rangle. \quad (11)$$

Cette approche permet la description de la dynamique et de la thermique des particules à travers l'écriture d'un système d'équations eulériennes locales et instantanées.

2.2. Les grandeurs macroscopiques

On définit une vitesse et une température moyenne

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_p \rangle_p(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{\mathbf{v}}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}, \quad \langle \tilde{t}_p \rangle_p(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{t}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle} \quad (12)$$

$$\text{selon l'opérateur de moyenne} \quad \langle g \rangle_p = \frac{1}{n_p(\mathbf{x}, \tau)} \int g f_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau) d\mathbf{c}_p d\xi_p \quad (13)$$

$$\text{avec} \quad f_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau) = \lim_{N_f \& p \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}_{f \& p}} \sum_{N_f \& p} \sum_{m=1}^{N_p} W_p^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau, | \mathcal{H}_p \mathcal{H}_f) \right] \quad (14)$$

$$\text{et} \quad n_p(\mathbf{x}, \tau) = \int f_p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, \xi_p, \tau) d\mathbf{c}_p d\xi_p = \langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle \quad (15)$$

et on dérive les fluctuations instantanées

$$\tilde{\mathbf{v}}'_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \tilde{\mathbf{v}}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) - \langle \tilde{\mathbf{v}}_p \rangle_p(\mathbf{x}, \tau), \quad \tilde{t}'_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) = \tilde{t}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) - \langle \tilde{t}_p \rangle_p(\mathbf{x}, \tau). \quad (16)$$

A partir de ces relations on peut écrire l'énergie cinétique d'agitation de particules et la variance de température corrélées

$$\tilde{q}^2_p(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{2} \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{v}'_{p,i}(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{v}'_{p,i}(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}, \quad (17)$$

$$\tilde{q}^2_\theta(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{t}'_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \tilde{t}'_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}. \quad (18)$$

Les grandeurs macroscopiques et mésoscopiques (respectivement moment d'ordre 2 de $f_p^{(1)}$ et $\tilde{f}_p^{(1)}$) sont reliées par les relations suivantes

$$q^2_p(\mathbf{x}, \tau) = \tilde{q}^2_p(\mathbf{x}, \tau) + \delta q^2_p(\mathbf{x}, \tau), \quad q^2_\theta(\mathbf{x}, \tau) = \tilde{q}^2_\theta(\mathbf{x}, \tau) + \delta q^2_\theta(\mathbf{x}, \tau) \quad (19)$$

où

$$\delta q^2_p(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \delta \tilde{\theta}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}, \quad \delta q^2_\theta(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \delta \tilde{\theta}_\theta(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle}{\langle \tilde{n}_p(\mathbf{x}, \tau, \mathcal{H}_f) \rangle} \quad (20)$$

représentent les contributions issues des résiduels de vitesse et température.

3. La simulation numérique

L'expérience numérique représente la dispersion d'un jet plan de gaz froid chargé en particules au sein d'un écoulement gazeux chaud turbulent homogène et isotrope. Les profils de vitesse et température initiales (en tangente hyperbolique) de la phase gazeuse sont imposés à partir de profils théoriques de jets plans auxquels s'ajoute une distribution turbulente statistiquement homogène et isotrope de vitesse. Les particules sont injectées à la même vitesse que le gaz selon une distribution spatiale aléatoire en nombre suffisant pour permettre le calcul des grandeurs moyennes mésoscopiques ([7]). La phase gazeuse est simulée par une approche de type DNS sur un maillage cartésien et la phase dispersée par une approche lagrangienne de type DPS. Le code de calcul utilisé est le code Euler-Lagrange NTMIX3D-2Φ, compressible parallèle, qui résout les équations NS avec une formulation adimensionnelle par une intégration temporelle du type Runge-Kutta d'ordre 3 et une discrétisation spatiale par schéma compacte d'ordre 6. L'avancement en temps pour la partie lagrangienne est aussi assuré par un Runge-Kutta d'ordre 3. Une interpolation par polynômes de Lagrange à l'ordre 3 est utilisée pour obtenir la vitesse et la température du fluide vues par chaque particule. Le domaine de calcul est un cube traité avec des conditions périodiques.

3.1. Les paramètres de la simulation

Les principales valeurs adimensionnées de la simulation sont affichées dans le tableau suivant :

DNS:		DPS:	
Taille du domaine L	2π	Largeur initiale du jet plan	1.6
Nombre de mailles	128^3	Nombre total des particules	80×10^6
Taille d'une maille Δx^3	0.049^3	Temps de relaxation dynamique τ_p en $y=0$	12.8
Viscosité cinématique ν	$1.82e-4$	Nombre de Stokes dynamique St (estimé à l'équilibre) en $y=0$	~ 0.9
Énergie cinétique turbulent initiale q_f^2	$3.37e-4$	Temps de relaxation thermique τ_θ en $y=0$	26
Dissipation initiale ϵ_f	$3.78e-5$	Nombre de Stokes thermique St_T (estimé à l'équilibre) en $y=0$	~ 1.8
Vitesse moyenne initiale U_0 du jet	0.15		
Température moy. initiale T_0 du jet	2.0		
Température moy. externe T_∞ au jet	2.5		

Les équations lagrangiennes de la phase dispersée utilisées dans l'approche DPS et qui régissent le mouvement et les échanges de chaleur d'une particule dans un fluide sont :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(k)}(\tau)}{d\tau} = \mathbf{V}^{(k)}(\tau), \quad \frac{d\mathbf{V}^{(k)}(\tau)}{d\tau} = -\frac{1}{\tau_p}(\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}), \quad \frac{dT^{(k)}(\tau)}{d\tau} = -\frac{1}{\tau_\theta}(T^{(k)} - t_{f@p}) \quad (21)$$

où les grandeurs $\mathbf{u}_{f@p}$ et $t_{f@p}$ sont « vues » par les particules, c'est-à-dire qu'elles sont grandeurs du fluide localement non perturbé par la présence de la particule, et τ_p et τ_θ sont les temps de relaxation respectivement dynamique et thermique ainsi définis :

$$\tau_p = \frac{4\rho_p d_p}{3\rho_f C_D \|\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}\|} \quad \text{et} \quad \tau_\theta = \frac{1}{6} \frac{\text{Pr} d_p^2 C_{pp} \rho_p}{Nu \mu C_p} \quad (22)$$

$$\text{avec } C_D = \frac{24}{\text{Re}_p} (1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}), \quad \text{Re}_p = \frac{\|\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}\| d_p}{\nu} \quad \text{et} \quad Nu = 2 + 0.55 \text{Re}_p^{0.5} \text{Pr}^{0.33}. \quad (23)$$

C_p et C_{pp} sont les capacités calorifiques à pression constante respectivement du fluide et des particules. Les hypothèses de base sont : pour la dynamique, un diamètre des particules

plus petit que l'échelle de Kolmogorov et une masse volumique des particules beaucoup plus grande de celle du fluide; pour la thermique, une température uniforme au sein des particules, qui revient à supposer une conduction thermique infinie, pas d'échange de masse, et une expression du nombre de Nusselt en régime stationnaire. Les données lagrangiennes obtenues sont ensuite exploitées pour extraire les données eulériennes dans le cadre du formalisme mésoscopique. Pour estimer le nombre de Stokes dynamique de la simulation qui caractérise l'efficacité de l'entraînement des particules par les grandes échelles de la turbulence, l'agitation des particules est supposée en équilibre local avec la turbulence du fluide (hypothèse de Tchen) pour les composantes de la vitesse transverses à l'axe du jet ([6]). Cette hypothèse permet de calculer un nombre de Stokes effectif en fonction du ratio entre les variances des vitesses du fluide et des particules. Ce nombre de Stokes représente le ratio entre le temps de relaxation des particules et une échelle de temps caractéristique de la turbulence vue par les particules $St = \tau_p / \tau'_f$ et il permet finalement de définir un nombre de Stokes thermique selon la relation $St_T = \tau_\theta / \tau'_f$.

3.2. Résultats

La Figure 1 montre deux coupes d'évolution temporelle de la densité numérique de particules.

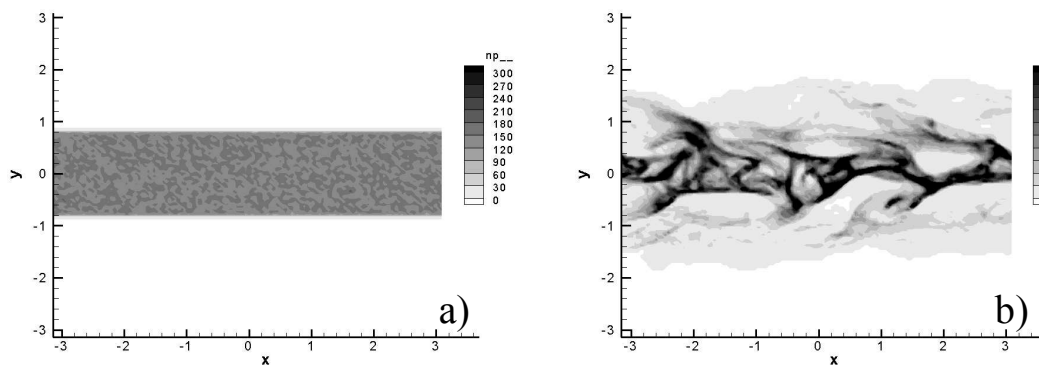


Figure 1 : coupe à $Z=64$ pour un temps a) $\tau=0\tau_f$ et b) $\tau=4.8\tau_f$.

Les figures 2 et 3 présentent les résultats de la simulation à l'instante $\tau=4.8\tau_f$.

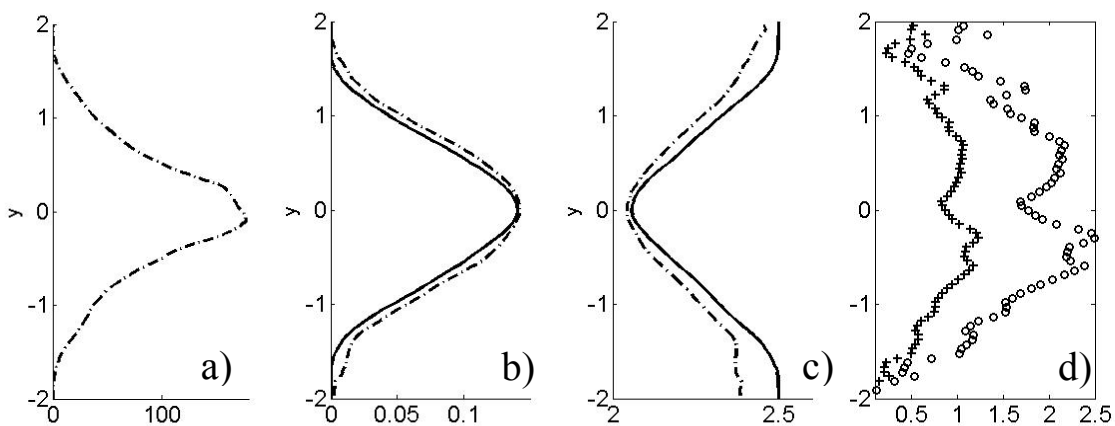


Figure 2 : profils de, a) densité numérique des particules, b) vitesses des particules (ligne trait - point) et du fluide (ligne continue), c) température des particules (ligne trait - point) et du fluide (ligne continue), d) nombres de Stokes dynamique St (+) et thermique St_T (o).

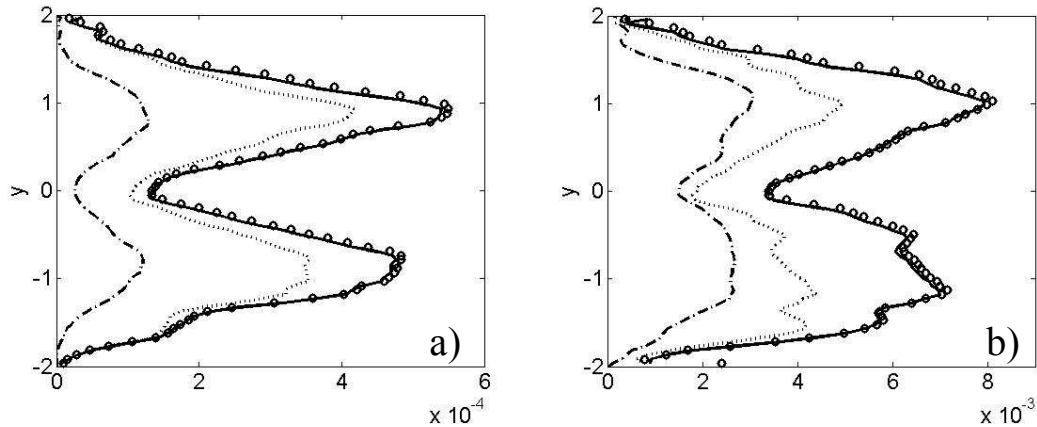


Figure 3 : profils de, a) énergie d'agitation des particules, b) variance de température des particules. Cercles : moyenne d'ensemble données lagrangiennes, ligne pointillé : grandeur corrélée, ligne trait – point : grandeur decorrélée et ligne continue : total corrélée+decorrélée.

4. Conclusion

Dans ce papier nous avons étendu l'approche mésoscopique aux écoulements anisothermes et nous l'avons utilisée pour analyser la distribution de température dans une configuration d'un jet temporel chargé en particules obtenue par DNS+DPS. Nous avons montré que la température de la phase dispersée peut être caractérisée par la décomposition en deux contributions mésoscopique et quasi-brownienne. Cette décomposition pourrait être utilisée pour améliorer l'interprétation des distributions de température des particules en écoulement turbulent et ainsi améliorer la compréhension et la modélisation des phénomènes comme l'évaporation des gouttes.

Références

- [1] P. Février, Étude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesse de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire, *Thèse de doctorat*, INP Toulouse (2000).
- [2] J. O. Hinze, *Turbulence*, McGraw-Hill (1975).
- [3] J. Abrahamson, Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid, *Chem. Eng. Sci.*, 30, 1371-1379 (1975).
- [4] M. W. Reeks, On the dispersion of small particles suspended in a isotropic turbulent field, *J. Fluid Mech.*, 83, 529-546 (1977).
- [5] P. Février, O. Simonin, K.D. Squires, Partitioning of particle velocities in gas – solid turbulent flows into a continuous field and spatially uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study, *J. Fluid Mech.*, 533 (2005), 1-46.
- [6] O. Simonin, Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flow, in *Lecture Series 2000-06*, VKI for Fluid Dynamics (2000).
- [7] M. Moreau, Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique, *Thèse de doctorat*, INP Toulouse(2006).
- [8] O. Simonin, Prediction of the dispersed phase turbulence in particulate laden jet, *Proc. 4th Intl Symp. on Gas-Solid Flows*, ASME FED, 121, 197-206 (1991).

Remerciements

Le calcul a été effectué sur la machine IBM Power4 du centre de calcul numérique intensif de très haute performance IDRIS (Institut du Développement et de Ressources en Informatique Scientifique) du CNRS.