

# Transport de particules : modèles, simulations, et applications

Notes de cours  
(version provisoire du 23 novembre 2020)

## Partie 4 : sprays



**Luc Mieussens**

Bordeaux INP (ENSEIRB-MATMECA)  
et  
Institut de Mathématiques de Bordeaux



Quatrième partie  
Modélisation des sprays



# Table des matières

<b>IV</b>	<b>Modélisation des sprays</b>	<b>3</b>
<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Description des particules</b>	<b>9</b>
2.1	Position et vitesse . . . . .	9
2.2	Rayon et température . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Modèle cinétique</b>	<b>11</b>
3.1	Densité de particules . . . . .	11
3.2	Équation cinétique . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Effet des particules sur le fluide</b>	<b>15</b>
<b>5</b>	<b>Modèles macroscopiques</b>	<b>17</b>
<b>6</b>	<b>Un exemple d'application : modélisation des embruns océaniques</b>	<b>19</b>
<b>7</b>	<b>TP : simulation d'un spray</b>	<b>21</b>
7.1	Écoulement de Poiseuille . . . . .	21
7.2	Aide d'utilisation de Paraview . . . . .	23
<b>A</b>	<b>Compléments</b>	<b>25</b>
A.1	La formule du transport de Reynolds . . . . .	25
	<b>Bibliographie</b>	<b>29</b>



# Chapitre 1

## Introduction

Les sprays sont des écoulements constitués d'au moins deux phases : une phase fluide porteuse, et une phase constituées de particules, solides ou liquides. Pour que ce mélange soit qualifié de spray, il faut que les particules soient suffisamment dispersées. Cela peut être quantifié par la fraction volumique des particules (c'est-à-dire la proportion du volume occupé par toutes les particules par rapport au volume total considéré) qui est entre  $10^{-2}$  et  $10^{-5}$ . On rencontre ce type d'écoulements dans de nombreuses situations, industrielles ou environnementales. Donnons trois exemples :

- le carburant injecté dans la chambre de combustion d'un moteur : le jet de carburant se sépare en une multitude de gouttelettes qui sont transportées dans l'air de la chambre. La phase porteuse est l'air, et la phase dispersée est le carburant. Les particules considérées ici sont donc des particules liquides : les gouttelettes de carburant.
- embruns océaniques : lors du déferlement d'un vague, un grand nombre de petites gouttelettes d'eau de mer sont arrachées à la surface et transportées par le vent. Là aussi, la phase porteuse est l'air, et les particules sont les gouttelettes d'eau.
- spray médical : un spray buccal comme de la ventoline est constitué d'un gaz porteur et d'une multitude de particules solides censées favoriser la désinflammation des bronches.

L'hypothèse générale est que ces particules sont suffisamment petites devant l'échelle macroscopique du problème pour être considérées comme ponctuelles (c'est la même idée qu'en théorie cinétique des gaz). Leur structure interne n'est donc pas décrite précisément (on n'utilise pas les équations de Navier-Stokes pour décrire l'intérieur des gouttes par exemple). Néanmoins, les particules portent une information relative à leur état global : leur position, vitesse, masse, température par exemple. Le modèle de base utilisé pour décrire le spray est donc constitué d'un modèle pour le fluide porteur (en général équations de Navier-Stokes incompressibles avec transfert thermique), et d'un modèle lagrangien décrivant les trajectoires des particules et l'évolution de leur état. L'influence du fluide porteur sur le transport des particules est prise en compte par des forces d'entraînement, et on peut aussi tenir compte de transformations des particules comme :

- la coalescence : fusion de deux particules après une collision ;
- la fragmentation : sous l'effet de la friction exercée par le fluide porteur, une instabilité de la surface de la particule fluide peut apparaître, qui génère une séparation de la goutte en plusieurs gouttes secondaires ;

- l'évaporation : le diamètre de la gouttelette diminue suite à une perte de masse ;
- le transfert de chaleur : la goutte acquiert ou cède de la chaleur au fluide porteur.

La modélisation des sprays est un domaine assez complexe qui fait l'objet de nombreux travaux de recherche à l'heure actuelle, motivés par des problèmes industriels très concrets, en particulier en aéronautique. Nous renvoyons le lecteur intéressé au livre de Marchisio et Fox [4], ou au bref article de Murrone et Villedieu [5].

Dans la suite de ce chapitre, nous nous attacherons à décrire brièvement les différents modèles pour les mélanges gaz/gouttelettes en mettant en avant les points communs avec les deux domaines abordés auparavant (gaz raréfiés et transfert radiatif), ainsi que leur spécificités. Nous concluons avec un exemple simple d'application.



# Chapitre 2

## Description des particules

Les particules sont en général considérées comme des sphères repérés par leur position  $x \in \mathbb{R}^3$ , vitesse  $v \in \mathbb{R}^3$ , rayon  $r > 0$ , et température  $T > 0$ . Le volume d'une particule est donc  $V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3$ , et si sa masse volumique est  $\rho_p$ , alors sa masse est  $m_p(r) = \rho_p V(r)$ . Pour décrire l'évolution des paramètres  $x, v, r, T$ , les particules sont assimilées à des points, ce qui est légitime si l'échelle d'observation est bien plus grande que  $r$ . Dans les sections suivantes, nous décrivons maintenant la façon dont varient ces paramètres.

### 2.1 Position et vitesse

La position et la vitesse évoluent selon la loi de la dynamique de Newton :

$$x'(t) = v(t) \quad \text{et} \quad m_p(r(t))v'(t) = F(t, x(t), v(t)). \quad (2.1)$$

La force  $F$  agissant sur la particule est la somme de plusieurs contributions. Nous décrivons ici les principales que sont la force de gravité et la force de traînée, mais il peut y en avoir d'autres qui doivent être prises en compte dans certains cas.

**Gravité.** Cette force est

$$F_g = m_p(r)g,$$

où  $g$  est le vecteur de l'accélération gravitationnelle.

**Force de traînée.** La force de traînée due au fluide environnant est

$$F_S = \frac{m_p(r)}{\tau_p}(u - v),$$

où  $u$  est la vitesse du fluide porteur et  $\tau_p$  un temps de relaxation propre à la particule. Cette force induit une relaxation de la vitesse de la particule vers la vitesse du fluide.

Dans le cas d'un fluide porteur modélisé par les équations de Stokes, et si le *nombre de Reynolds* de la particule  $\text{Re}_p = \frac{2r|v-u|}{\nu}$  est petit, alors le temps de relaxation est constant et vaut

$$\tau_p = \frac{2r^2}{9\mu}\rho_p,$$

et la force correspondante est appelée force de Stokes. Le coefficient  $\mu$  est la viscosité du fluide porteur.

Le nombre de Stokes  $S_t = \tau_p/\tau_f$ , où  $\tau_f$  est une échelle de temps caractéristique du fluide, permet d'identifier les régimes pour lesquels les particules sont plus ou moins sensibles à la vitesse du fluide. En effet, en prenant  $\tau_f$  comme échelle de temps d'observation, l'équation de Newton (2.1) adimensionnée s'écrit, dans le cas où seule la force de traînée est prise en compte,  $v'_p(t) = \frac{1}{S_t}(u - v)$  : donc  $v_p$  tend vers  $u$  d'autant plus vite que le nombre de Stokes est petit.

Si les effets inertiels ne peuvent être négligés, le temps de relaxation est

$$\tau_p = \frac{\rho_p \frac{8}{3} r}{\rho C_D \|u - v\|},$$

où  $\rho$  la masse volumique du fluide porteur, et  $C_D$  est le coefficient de traînée de la particule, de sorte que la force de traînée devient  $F_S = \frac{1}{2}\rho C_D \pi r^2 \|u - v\| (u - v)$ .

Souvent, le fluide porteur est turbulent. Cela est recherché en combustion, pour favoriser le mélange air/carburant. Cela s'observe aussi en océanographie, où il existe une couche limite turbulente au dessus de la surface de l'océan. La turbulence du fluide induit des fluctuations aléatoires de la position et vitesse des particules. Si le champ de vitesse du fluide porteur  $u$  n'est pas décrit à une échelle suffisamment fine (comme avec les modèles RANS), on doit tenir compte de ces fluctuations en modifiant les équations du mouvement des particules : on rajoute au système différentiel (2.1) un terme de bruit, et l'on obtient des équations différentielles stochastiques appelées équations de Langevin.

**Exercice 2.1.** En supposant le fluide porteur stationnaire et uniforme, et que le temps de relaxation de Stokes  $\tau_p$  est constant, montrer que la *vitesse terminale* d'une particule soumise à la gravité vaut  $v_t = \tau_p g + u$ .

## 2.2 Rayon et température

Les variations du rayon et de la température des particules fluides peuvent se modéliser par les équations différentielles

$$r'(t) = K(t, x, v, r, T) \quad \text{et} \quad T'(t) = H(t, x, v, r, T), \quad (2.2)$$

où  $K$  et  $R$  dépendent de l'état du fluide porteur. Ces taux de variations sont donnés par des formules assez complexes qui dépendent fortement du problème considéré. Nous renvoyons à [5] pour des formules utilisées en aéronautique et à [7] pour des taux utilisés pour les embruns marins. Les variations de taille due à la coalescence et à la fragmentation sont dus à des processus de collisions et ne peuvent pas se modéliser ainsi.

En théorie, il est possible de décrire l'évolution du spray en résolvant le modèle qui décrit le fluide (en général Navier-Stokes incompressible) et les équations lagrangiennes (2.1) et (2.2) qui décrivent les particules. En pratique, cela est assez difficile, car le nombre de particules est extrêmement grand. Il est alors intéressant de recourir à une modélisation cinétique, ce qui est décrit dans la section suivante.

# Chapitre 3

## Modèle cinétique

### 3.1 Densité de particules

Notons  $f(t, x, v, r, T)$  la densité numérique de particules dans l'espace position-vitesse-rayon-température (aussi appelé *espace des phases*). Autrement dit, le nombre de particules qui, à l'instant  $t$ , sont situées dans un volume élémentaire  $dx$  autour de la position  $x \in \mathbb{R}^3$ , et dont la vitesse, rayon, et température fluctuent dans  $dv$ ,  $dr$ , et  $dT$  autour de  $v \in \mathbb{R}^3$ ,  $r > 0$ , et  $T > 0$ , respectivement, est

$$dN = f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT.$$

Connaissant cette densité, ou distribution, on peut ainsi avoir accès à des quantités macroscopiques comme par exemple :

— le nombre de particules dans un domaine  $\Omega_x \in \mathbb{R}^3$  :

$$N = \int_{\Omega_x} \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT;$$

— le volume occupé par la phase dispersée : le volume occupé par les  $dN$  particules est  $dN \times V_p(r) = dN \times \frac{4}{3}\pi r^3$ , d'où le volume total

$$\mathcal{V} = \int_{\Omega_x} \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{4}{3}\pi r^3 f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT.$$

On peut aussi accéder à des densités réduites comme la densité de particules par unité de volume dans l'espace des positions-rayons, soit

$$n(t, x, r) = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT,$$

de sorte que le nombre de particules dans  $dx$  autour de  $x$  et de rayon dans  $dr$  autour de  $r$  vaut  $n(t, x, r) dx dr$ . Bien d'autres quantités de ce type peuvent ainsi être définies.

## 3.2 Équation cinétique

Cette équation est plus complexe à obtenir que pour la dynamique des gaz ou le transfert radiatif. Dans ces deux cas, l'équation était une simple conséquence du fait que la variation de  $f$  le long d'une trajectoire n'est due qu'aux collisions : en l'absence de collision,  $f$  ne varie pas, et on obtient facilement le terme de transport en calculant cette variation. Ici, la densité  $f$  varie le long d'une trajectoire, même sans collision, en raison de l'interaction avec le fluide : la vitesse, le rayon, et la température ne sont pas constants. Pour en tenir compte, il faut raisonner sur le nombre de particules plutôt que sur la densité, avec un argument parfois utilisé pour établir les lois de conservations.

On raisonne alors de la façon suivante : à l'instant initial  $t = 0$ , considérons un volume  $\Omega_0 = \Omega_{0,x} \times \Omega_{0,v} \times \Omega_{0,r} \times \Omega_{0,T}$  dans l'espace des phases, et calculons le nombre  $N_0$  de particules dans ce volume. Par définition de  $f$ , il vient

$$N_0 = \int_{\Omega_0} f(t, x_0, v_0, r_0, T_0) dx_0 dv_0 dr_0 dT_0,$$

où l'on a volontairement indicé par 0 les variables utilisées. On note ensuite  $\Omega(t)$  le volume qui à l'instant  $t$  contient toutes les particules qui étaient dans  $\Omega_0$  à l'instant initial, et uniquement celles-ci. Naturellement, le nombre de particules dans  $\Omega(t)$  est

$$N(t) = \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT, \quad (3.1)$$

et par définition, ce nombre n'a pas changé au cours du temps et l'on a  $N(t) = N_0$ . Ceci étant vrai pour tout temps, on peut affirmer que  $N'(t) = 0$ .

Pour traduire cette propriété sur  $f$ , il faut alors calculer la dérivée par rapport au temps de  $N(t)$  en utilisant (3.1), ce qui pose quelques difficultés, puisque la variable  $t$  apparaît à la fois dans l'intégrande  $f$ , mais aussi dans le domaine d'intégration  $\Omega(t)$ . Il existe une formule pour faire cela, appelée parfois théorème du transport de Reynolds, qui donne

$$\begin{aligned} N'(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT, \\ &= \int_{\Omega(t)} \left( \partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left( \frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) \right) dx dv dr dT, \end{aligned}$$

où  $F$ ,  $K$ , et  $H$  sont la force et les taux de variation intervenants dans les lois d'évolution (2.1) et (2.2). Cette relation étant valable quel que soit le domaine d'intégration, on en déduit que l'intégrande est nulle, ce qui donne l'équation

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left( \frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) = 0. \quad (3.2)$$

Dans le domaine des sprays, cette équation est appelée équation de Williams, ou de Williams-Boltzmann. Nous renvoyons à l'annexe A.1 pour une démonstration de la formule de Reynolds.

Les phénomènes de coalescence et de fragmentation peuvent être assimilés à des processus de collision : en suivant l'approche de Boltzmann pour la théorie cinétique des gaz, on peut construire des opérateurs qui modélisent ces phénomènes. Ils apparaissent ainsi au second membre de l'équation de Williams (3.2) pour donner

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left( \frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) = Q_{frag}(f) + Q_{coal}(f). \quad (3.3)$$

Pour des particules fluides (gouttelettes), la fragmentation dépend du *nombre de Weber* des gouttelettes, un nombre sans dimension défini par

$$We_{e,p} = \frac{\rho |u - v|^2 d}{\sigma_p}, \quad (3.4)$$

où  $\rho$  est la masse volumique du gaz,  $u - v$  la vitesse relative caractéristique des gouttelettes,  $d$  le diamètre d'une gouttelette, et  $\sigma_d$  sa tension superficielle. Il mesure le rapport entre les forces d'inerties et la force due à la tension superficielle. Quand ce nombre dépasse une valeur critique (évaluée à 12), des instabilités de type Kelvin-Helmoltz se développent à la surface de la gouttelette, et celle-ci se fragmente en plusieurs gouttelettes secondaires. À titre d'illustration, nous donnons ci-dessous une expression de l'opérateur de fragmentation (tirée de [6]) :

$$Q_{frag}(f)(r, v) = \int_0^s \int_{\mathbb{R}_v^3} \nu_{frag}(s', v') f(v', r') h(s, v, s', v') ds' dv' - \nu_{frag}(s, v) f(v, r),$$

où  $\nu_{frag}$  est la fréquence de fragmentation et  $h$  rend compte de la distribution des particules secondaires et est donnée de façon empirique. En outre,  $s$  désigne ici la surface de la goutte, soit  $s = 4\pi r^2$ .

La coalescence est un phénomène lui aussi très complexe. Sa fréquence dépend de la densité du spray : plus il y a de particules, plus celles-ci auront de chances d'entrer en collision. On peut définir un nombre de Knudsen pour quantifier cette notion, et l'on pose souvent  $Kn_p = \tau_c / \tau_p$ , où  $\tau_c$  est le temps caractéristique entre deux collisions, et  $\tau_p$  est le temps de relaxation de Stokes (celui nécessaire à la vitesse de la particule pour tendre vers la vitesse du fluide porteur). En outre, toute collision ne donnera pas lieu à de la coalescence : cela dépend de l'angle d'impact et du nombre de Weber, et on pourra observer un rebond, une coalescence définitive ou temporaire, une fragmentation, etc. Nous renvoyons donc à [6] pour des expressions de l'opérateur correspondant.



# Chapitre 4

## Effet des particules sur le fluide

Admettons que le fluide porteur soit bien décrit par les équations de Navier-Stokes compressibles

$$\begin{aligned}\nabla \cdot u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) + \nabla p &= \mu \Delta u + \mathcal{F},\end{aligned}\tag{4.1}$$

où  $\mathcal{F}$  représente une densité de forces extérieures agissant sur le fluide. Si le fluide est seulement soumis à la gravité, on a  $\mathcal{F} = \rho g$ .

Dans le cas d'un spray, nous avons vu que le fluide porteur exerce une force (la force de traînée) sur les particules. En retour, les particules exercent donc une force opposée sur le fluide que nous pouvons calculer comme suit.

Considérons un petit volume de fluide  $dx$  de vitesse  $u$  centré sur  $x$ . Il exerce sur une particule de vitesse  $v$ , de rayon  $r$ , et de température  $T$ , la force  $F_S = \frac{m_p}{\tau_p}(u - v)$ . La particule exerce donc en retour la force  $-F_S$ . Dans le volume  $dx$ , il y a  $dN = f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT$  particules dont la vitesse, le rayon, et la température fluctuent autour de  $v$ ,  $r$ , et  $T$ . La force exercée par toutes ces particules étant la somme des forces exercées par chaque particule, on trouve une force cumulée égale à  $-F_S \times dN = \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT$ . La force exercée par toutes les particules, quels que soient leurs vitesses, rayons, et température, est donc

$$F_{particules \rightarrow dx} = \left( \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dv dr dT \right) dx.$$

La densité de force associée s'obtient en divisant par  $dx$  pour trouver

$$\mathcal{F} = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dv dr dT,$$

qui doit être ajoutée à la densité de force de gravité  $\rho g$ .

**Exercice 4.1.** Par un adimensionnement adapté, déterminer sous quelles conditions la force exercée par les particules sur le fluide peut être négligée dans les équations de Navier-Stokes (4.1).





# Chapitre 5

## Modèles macroscopiques

Dans la majorité des codes de calculs industriels, l'équation (3.3) est résolue par méthode Monte-Carlo, une méthode basée sur un transport lagrangien des particules et une modélisation stochastique des collisions. Les particules simulées sont censées être représentatives d'un grand nombre de particules réelles. Cette méthode est ainsi utilisée dans de grands codes industriels comme le code KIVA [1] ou le code CEDRE de l'ONERA [5]. Une telle méthode est aussi majoritairement utilisée pour les gaz raréfiés, où elle prend le nom de Direct Simulation Monte Carlo (DSMC [2]), et aussi en transfert radiatif. Cela est cependant très coûteux quand les particules sont nombreuses, et la précision des résultats est dégradée dans les zones de faible densité de particules.

Une approche naturelle consisterait à discrétiser directement l'équation (3.3) dans l'espace position-vitesse-rayon-température. Cela est malheureusement impossible à l'heure actuelle (et le restera sans doute longtemps) : la place mémoire et le temps calcul nécessaires à la discrétisation d'un espace à 8 dimensions sont largement supérieurs à ce qu'il est possible d'atteindre avec les ordinateurs actuellement les plus puissants.

Une autre idée est alors de recourir à des modèles macroscopiques, comme on peut le faire en dynamique des gaz (modèles d'Euler ou Navier-Stokes) ou en transfert radiatif (modèle de diffusion). Pour cela, la première étape est toujours la même : écrire des équations de bilan sur des quantités macroscopiques. Dans un premier temps, il est raisonnable de considérer des moments en vitesse et température seulement : on ne prend pas de moment en rayon, car en général coexistent en un même point de l'espace des particules de rayon très différents, et il est important de garder cette information dans le modèle. Considérons par exemple les moments suivants, qui sont des densités par position et par rayon : la densité de masse

$$\bar{\rho}(t, x, r) = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT,$$

et la densité de quantité de mouvement

$$\bar{\rho}\bar{u}(t, x, r) = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v f(t, x, v, r, T) dv dT.$$

La barre au dessus des ces quantités est là pour les distinguer des variables associées au

fluide porteur. En intégrant (3.3) contre  $m_p(r)$ , on trouve l'équation suivante

$$\begin{aligned}
& \partial_t m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v \cdot \nabla_x f(t, x, v, r, T) dv dT \\
& + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \nabla_v \cdot \left( \frac{1}{m_p} F f \right) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \partial_r (K f) dv dT \\
& + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \partial_T (H f) dv dT \\
& = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} Q_{frag}(f) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} Q_{coal}(f) dv dT.
\end{aligned}$$

En intervertissant intégrales et dérivées, on trouve que les deux premiers termes font apparaître  $\bar{\rho}$  et  $\bar{\rho}\bar{u}$ . Le troisième terme est nul, car on intègre une divergence sur  $\mathbb{R}^3$ . De même pour le cinquième terme : en considérant que  $f$  est nulle pour  $T = 0$  ou  $T = +\infty$  (il n'y a pas de particules de température nulle ou infinie), on trouve aussi 0. Le quatrième terme et les seconds membres ne peuvent a priori pas s'écrire aussi simplement. On obtient alors l'équation

$$\partial_t \bar{\rho} + \nabla_x \cdot \bar{\rho}\bar{u} + m_p(r) \partial_r \left( \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} K f dv dT \right) = Q_{frag,1}(f) + Q_{coal,1}(f).$$

En intégrant (3.3) contre  $m_p(r)v$  et en utilisant les mêmes arguments, on trouve l'équation suivante

$$\begin{aligned}
& \partial_t \bar{\rho}\bar{u} + \nabla_x \cdot \left( \bar{\rho}\bar{u} + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} (v - \bar{u}) \otimes (v - \bar{u}) f(t, x, v, r, T) dv dT \right) \\
& - 3 \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} F f dv dT + m_p(r) \partial_r \left( \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v K f dv dT \right) \\
& = Q_{frag,2}(f) + Q_{coal,2}(f).
\end{aligned}$$

Ces équations contiennent des flux (ou moments d'ordre supérieur) qui ne peuvent a priori pas s'exprimer en fonction des inconnues  $\bar{\rho}$  et  $\bar{u}$ . De même, il peut être difficile d'exprimer les opérateurs de collisions intégrés en fonction de  $\rho$  et  $\bar{u}$ . En dynamique des gaz ou en transfert radiatif, ce problème existe aussi, mais il est résolu par une approche asymptotique (voir la partie 1, chapitre 10) : quand le nombre de Knudsen est petit, on sait que la distribution des molécules est proche d'une maxwellienne, et on peut donc approcher les flux par les flux maxwelliens. Dans le cas des sprays, cela n'est pas possible : ni la dynamique des collisions entre gouttelettes ni l'interaction avec le fluide n'induisent en général de convergence vers un certain état d'équilibre.

Ce problème, appelé "problème de fermeture", est un obstacle considérable à la mise au point de modèles macroscopiques pour les sprays. Il existe ainsi plusieurs classes de méthodes qui font toujours l'objet de recherches à l'heure actuelle. L'une d'elle, appelée "méthode de moments par quadratures", semble très prometteuse (voir [4]).

XXX mettre ici en exemple la fermeture à 1 noeud pour distrib en x,v, et étudier le pb de croisement (d'un pt de vue part et d'un point de vue modèle moments)

## Chapitre 6

# Un exemple d'application : modélisation des embruns océaniques

Le lecteur est invité à lire l'article [8], dans lequel un modèle cinétique du transport des embruns océaniques est proposé. Le modèle tient compte des échanges de masse, de quantité de mouvement, et de chaleur, entre les embruns et l'atmosphère. une



# Chapitre 7

## TP : simulation d'un spray

Le but de ce TP est de simuler le transport d'un spray par un écoulement de Poiseuille dans un canal.

### 7.1 Écoulement de Poiseuille

On considère un écoulement 2D dans un canal droit infini dans la direction  $x$ , dont les bords haut et bas sont repérés par l'ordonnée  $y = c$  et  $y = d$ . Le domaine de calcul est restreint par les abscisses  $x = a$  et  $x = b$ .

Le champ de vitesse est celui d'un écoulement de Poiseuille de vitesse maximale  $u_m$ .

Les particules sont supposées se trouver initialement dans une bande verticale, comprise entre les abscisses  $x = a_p$  et  $x = b_p$ , sur toute la hauteur du canal. Leur position initiale en  $x$  et en  $y$  est tirée aléatoirement selon la loi uniforme. Leur vitesse initiale est nulle. Toutes les particules ont le même rayon.

Le but de cette partie est de simuler le mouvement de ces particules, entraînées par le fluide, selon la loi de Stokes :

$$v'(t) = \frac{1}{\text{St}}(u(x(t)) - v(t)),$$

écrite ici en variables adimensionnées, où  $\text{St}$  est le nombre de Stokes d'une particule.

#### 7.1.1 Mouvement des particules

Voici quelques indications pour faire cette simulation :

1. attention : tout au long de l'écriture de votre programme, on conseille de compiler sans optimisation, avec l'option `-fcheck=all`, afin de détecter immédiatement les dépassements de tableau. Ce n'est qu'à la fin que vous pourrez compiler en mode optimisé `-O3`.
2. télécharger le fichier [outils.f90](#) contenant quelques modules utiles, ainsi que le squelette de code [poiseuille.f90](#)  
;

3. déclarer les paramètres de la simulation, et leur donner les valeurs suivantes :  $a = c = 0$ ,  $b = d = 1$ ,  $u_m = 1$ ,  $a_p = 0.2$ ,  $b_p = 0.3$ ,  $St = 0.01$  ;
4. on prendra aussi un nombre de particules  $n_p = 10$  pour commencer, pour passer à 10 000 quand le programme fonctionnera correctement ;
5. stocker les variables d'état des particules dans un tableau de rang 2, par exemple `part(1:4,1:np)`, où la deuxième dimension représente le numéro de la particule, et la première permet de stocker la position (indices 1 et 2), et la vitesse (indices 3 et 4) ;
6. l'initialisation des positions se fait avec la subroutine fortran

```
call random_number(part(1:2,:))
```

qui attribue une valeur aléatoire à chaque case du tableau en argument, selon la loi uniforme entre 0 et 1 ;

7. modifier le résultat pour que les positions soient dans la bande indiquée dans l'énoncé ;
8. avant d'aller plus loin, testez votre programme et visualisez les particules avec `paraview` (observez la subroutine correspondante dans le fichier `outils.f90`, puis voir section 7.2 quelques indications pour utiliser ce logiciel) ;
9. pour visualiser le champ de vitesse du fluide porteur, il faut définir un maillage, par exemple un maillage cartésien de  $i_{max} = 100$  mailles dans la direction  $x$  et  $j_{max} = 100$  mailles dans la direction  $y$ , et définir les coordonnées  $x$  et  $y$  des noeuds du maillage (numérotées de 0 à  $i_{max}$  pour  $x$  et de 0 à  $j_{max}$  pour  $y$ ), et les coordonnées  $x_c$  et  $y_c$  des centres des mailles (numérotées de 1 à  $i_{max}$  pour  $x_c$  et de 1 à  $j_{max}$  pour  $y_c$ ) ;
10. programmer la fonction `uf(x,y)` qui calcule la vitesse du fluide porteur, selon la formule

$$u_x(x, y) = -\frac{4u_m}{(d-c)^2}(y-c)(y-d), \quad \text{et} \quad u_y(x, y) = 0$$

et l'appliquer à toutes les mailles du maillage pour visualiser le champ avec `paraview` (à superposer aux particules) ;

11. il est maintenant temps de passer à la boucle en temps pour calculer l'évolution des particules : programmer une méthode numérique (Euler explicite pour commencer) de façon vectorielle, et déterminer un pas de temps qui garantisse la stabilité pour toutes les particules. La fonction second membre devrait être programmée dans une fonction, afin de pouvoir être réutilisée facilement pour un autre schéma. Le temps de simulation maximum sera pris à  $t_{max} = (b-a)/u_m$ . Il faudra faire au moins 10 sorties fichiers pendant la simulation. Le pas de temps devra donc être le minimum entre celui donnant la stabilité et celui permettant les 10 sorties. Quand une particule sort du domaine (forcément par la droite), la faire re-rentrer par la gauche (condition périodique).
12. visualisez le résultat sous `paraview`, et quand cela fonctionne correctement, passez à  $n_p = 10000$  particules.

### 7.1.2 Calcul de la densité numérique de particules

Dans le programme, à chaque fois que vous faites une sortie fichier, calculez une densité numérique de particules. Pour cela, utilisez le maillage défini pour visualiser le champ de vitesse du fluide porteur, et calculez une densité moyenne dans chaque maille. Stockez cette densité dans le tableau `dens(1:imax,1:jmax)` et utilisez la subroutine `sortie_densite` correspondante.

La seule difficulté ici est déterminer quelles particules se trouve dans chaque maille. Imaginez un algorithme adéquat.

Votre champ de densité (visualisé sous forme de contours) doit bien sûr être relativement proche de ce que vous voyez quand vous visualisez les particules.

Ce qui est intéressant ici et de voir l'influence de la résolution choisie : contrairement à ce que l'on pourrait croire au premier abord, il vaut mieux ne pas utiliser un maillage trop fin. Constatez qu'avec le maillage 100x100 et 10 000 particules, le champ de densité est très bruité, alors qu'il semble bien plus correct quand on prend un maillage plus grossier (par exemple 30x30).

### 7.1.3 Influence du rayon

Modifiez votre code pour pouvoir considérer un ensemble de particules de différents rayons. Les rayons devraient varier entre 0.001 et 1. L'inertie des particules est prise en compte dans le nombre de Stokes qui vaut maintenant  $St = \frac{2}{9}r^2$ . Vous pouvez générer les rayon de façon aléatoire.

Utilisez votre code sur le même problème que précédemment, et analysez l'influence du rayon des particules sur les résultats.

## 7.2 Aide d'utilisation de Paraview

### 7.2.1 Particules

- ouvrir le fichier `particules*vtk`
- choisir le « filter » « glyph »
- changer le type de glyph de « arrow » à « sphere »
- mettre le « scaling » en mode « scalar », avec un « factor » de 0.01 (pour 10 particules) ou de 0.005 (pour 10 000 particules)

### 7.2.2 Champ de vitesse du fluide

- ouvrir le fichier `fluide_porteur.vtk`
- pour la géométrie du domaine seulement, choisir « representation » à « outline »
- pour visualiser le champ de vitesse en norme, choisir « representation » à « surface » et « coloring » à `uf`

### 7.2.3 Visualisation de la densité

- ouvrir le fichier `densite*.vtk`
- choisir le « filter » « CellData to PointData », de façon à transformer les données cellule en données aux noeuds (de façon à obtenir des courbes isodensité)
- choisir le filtre « contour »
- pour avoir plusieurs contours : cliquer dans « Isosurface / Value range » sur le 3ème symbole sous les + et le -, puis choisir 10 contours
- pour avoir une couleur par contour, en fonction du niveau du champ de densité : dans « Contours by » décocher tout, puis cliquer sur « Compute scalars », et enfin plus bas dans « Coloring », choisir « Densite »



# Annexe A

## Compléments

### A.1 La formule du transport de Reynolds

Dans cette section, nous montrons comment on peut dériver par rapport au temps une expression comme (3.1), dans laquelle le temps apparaît à la fois dans l'intégrande et dans le domaine d'intégration. La difficulté essentielle étant la dépendance du domaine d'intégration par rapport au temps, on va utiliser un changement de variables qui élimine cette dépendance.

L'outil essentiel utilisé ici est le changement de variables lagrangien qui a tout état initial  $(x_0, v_0, r_0, T_0)$  d'une particule associe l'état  $(x, v, r, T)$  qu'elle occupe à l'instant  $t$ . Pour cela, nous avons besoin de quelques notations supplémentaires. Les équations d'évolution (2.1) et (2.2) d'une particule peuvent se noter sous la forme du système

$$X'(t) = \mathcal{F}(t, X(t)), \quad (\text{A.1})$$

où  $X(t) = (x(t), v(t), r(t), T(t))$  et  $\mathcal{F}(t, X) = (v, \frac{1}{m_p}F(t, X), K(t, X), H(t, X))$ . L'état  $X = (x, v, r, T)$  de la particule à l'instant  $t$  associé à l'état initial  $X_0 = (x_0, v_0, r_0, T_0)$  peut se noter  $X = X(t; X_0)$ , ce qui signifie que  $X$  est la valeur en  $t$  de la solution de (A.1) de donnée initiale  $X_0$ .

Nous notons alors  $\Phi(t, \cdot)$  le changement de variable lagrangien, qui est l'application suivante :

$$\Phi(t, \cdot) : X_0 \mapsto X = X(t; X_0).$$

Rappelons alors que nous avons défini  $\Omega_0$  un volume dans l'espace des phases qui contient des particules à l'instant initial, et  $\Omega(t)$  le volume qui à l'instant  $t$  contient toutes les particules qui étaient dans  $\Omega_0$  à l'instant initial, et uniquement celles-ci. Avec les notations précédentes,  $\Omega(t)$  s'écrit de la façon suivante

$$\Omega(t) = \{X = \Phi(t, X_0), \quad \text{où} \quad X_0 \in \Omega_0\}.$$

Ainsi, le nombre de particules  $N(t)$  dans  $\Omega(t)$  peut se ré-écrire en utilisant le changement de variables précédent. On a

$$N(t) = \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT = \int_{\Omega(t)} f(t, X) dX$$

où  $dX = dx dv dr dT$ , et l'on remplace alors  $X$  par  $\Phi(t, X_0)$ , où  $X_0$  est dans  $\Omega_0$ , et l'on a  $dX = J(t, X_0) dX_0$ , où  $J$  est le jacobien de cette transformation, c'est-à-dire  $J(t, X_0) = |\det(D_X \Phi(t, X_0))|$ , où  $D_X \Phi$  désigne la dérivée de  $\Phi$  par rapport à sa seconde variable. Ainsi, on trouve

$$N(t) = \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) J(t, X_0) dX_0.$$

La variable  $t$  a disparu du domaine d'intégration, et elle apparaît maintenant uniquement dans l'intégrande (dans  $f$  et dans le jacobien).

À présent, il suffit de dériver sous l'intégrale pour obtenir

$$\begin{aligned} N'(t) &= \int_{\Omega_0} \frac{d}{dt} (f(t, \Phi(t, X_0)) J(t, X_0)) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} \left( \frac{d}{dt} f(t, \Phi(t, X_0)) \right) J(t, X_0) dX_0 + \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \frac{d}{dt} J(t, X_0) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} (\partial_t f(t, \Phi(t, X_0)) + \partial_t \Phi(t, X_0) \cdot \nabla_X f(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0 \\ &\quad + \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \partial_t J(t, X_0) dX_0 \\ &= I_1 + I_2. \end{aligned} \tag{A.2}$$

Pour la première intégrale, remarquons que  $\partial_t \Phi(t, X_0) = \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0))$ . En effet, d'après la définition de  $\Phi$ , on a

$$\begin{aligned} \partial_t \Phi(t, X_0) &= \lim_{h \rightarrow 0} (\Phi(t+h, X_0) - \Phi(t, X_0)) / h \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} (X(t+h) - X(t)) / h \\ &= X'(t) = \mathcal{F}(t, X(t)) = \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \end{aligned}$$

Donc  $I_1$  s'écrit

$$I_1 = \int_{\Omega_0} (\partial_t f(t, \Phi(t, X_0)) + \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)) \cdot \nabla_X f(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0.$$

On peut alors faire le changement de variables inverse pour obtenir

$$I_1 = \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \mathcal{F}(t, X) \cdot \nabla_X f(t, X)) dX. \tag{A.3}$$

Pour la deuxième intégrale  $I_2$ , il faut pouvoir calculer la dérivée du jacobien de la transformation lagrangienne par rapport au temps. Pour le moment, oublions la valeur absolue et notons  $\mathcal{J}(t, X_0) = \det(D_X \Phi(t, X_0))$  : on a alors

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{J}(t, X_0) &= \det'(D_X \Phi(t, X_0)) (\partial_t (D_X \Phi(t, X_0))) \\ &= \det'(D_X \Phi(t, X_0)) (D_X (\partial_t \Phi(t, X_0))) \\ &= \det'(D_X \Phi(t, X_0)) (D_X (\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)))), \end{aligned} \tag{A.4}$$

où l'on a noté  $\det'(A)(B)$  la dérivée du déterminant calculée en la matrice  $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$  et appliquée à la matrice  $B$ . Au lieu d'utiliser directement la formule donnant la dérivée du déterminant, nous utilisons un lemme classique (tiré des notes de F. Golse [3]) :

**Lemme A.1.** *Si  $A$  est inversible, alors on a pour toute matrice  $B$*

$$\det'(A)(B) = \det(A)\text{Trace}(A^{-1}B).$$

On a ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{J}(t, X_0) &= \det(D_X \Phi(t, X_0)) \text{Trace}((D_X \Phi(t, X_0))^{-1} D_X(\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \text{Trace}((D_X \Phi(t, X_0))^{-1} (D_X \mathcal{F})(t, \Phi(t, X_0) (D_X \Phi(t, X_0)))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \text{Trace}((D_X \mathcal{F})(t, \Phi(t, X_0))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \nabla_X \cdot \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Avant de conclure, il faut montrer comment passer de  $\partial_t \mathcal{J}(t, X_0)$  à  $\partial_t J(t, X_0)$ . Il suffit pour cela de remarquer que la relation précédente donne un signe à  $\mathcal{J}$ . En effet,  $\mathcal{J}$  suit une équation différentielle à coefficients non constants qui donne

$$\mathcal{J}(t, X_0) = \mathcal{J}(0, X_0) \exp \left( \int_0^t \nabla_X \cdot \mathcal{F}(s, \Phi(s, X_0)) ds \right).$$

Comme  $\mathcal{J}(0, X_0) = \det D_X \Phi(0, X_0)$  et que  $\Phi(0, X_0) = X_0$ , on a  $D_X \Phi(0, X_0) = I$ , et donc  $\mathcal{J}(0, X_0) = 1$ . Ainsi,  $\mathcal{J}(t, X_0) > 0$  pour tout  $t$ , et donc  $J(t, X_0) = \mathcal{J}(t, X_0)$ . Par conséquent, la relation (A.5) est aussi valable pour  $J(t, X_0)$  et l'on a donc

$$\partial_t J(t, X_0) = J(t, X_0) \nabla_X \cdot \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \quad (\text{A.6})$$

Nous pouvons à présent revenir à l'intégrale  $I_2$  pour écrire

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \partial_t J(t, X_0) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0. \end{aligned}$$

En faisant le changement de variable inverse, on obtient donc

$$I_2 = \int_{\Omega(t)} f(t, X) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X)) dX. \quad (\text{A.7})$$

On peut enfin revenir à l'expression (A.2) en utilisant (A.3) et (A.7) pour trouver

$$\begin{aligned} N'(t) &= \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \mathcal{F}(t, X) \cdot \nabla_X f(t, X) + f(t, X) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X))) dX \\ &= \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X) f(t, X))) dX \\ &= \int_{\Omega(t)} \partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left( \frac{F}{m_p} f \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) dx dv dr dT, \end{aligned}$$

ce qui est bien la formule de Reynolds recherchée.

*Preuve du lemme A.1.* Notons que

$$\det'(A)(B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\det(A + \varepsilon B) - \det(A)) / \varepsilon.$$

Or  $\det(A + \varepsilon B) = \det(A(I + \varepsilon A^{-1}B)) = \det A \det(I + \varepsilon A^{-1}B)$ , donc

$$\det'(A)(B) = \det A \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\det(I + \varepsilon A^{-1}B) - 1) / \varepsilon = \det A \det'(I)(A^{-1}B). \quad (\text{A.8})$$

En notant de façon générale pour toute matrice  $M = [M_1, M_2, \dots, M_n]$  où  $M_i$  est la  $i$ ème colonne de  $M$ , on rappelle que le déterminant étant une application  $n$ -linéaire, sa dérivée s'écrit

$$\det'(M)(N) = \det[N_1, M_2, \dots, M_n] + \det[M_1, N_2, M_3, \dots, M_n] + \dots + \det[M_1, M_2, \dots, N_n].$$

Ainsi, en remarquant que la matrice identité s'écrit  $I = [e_1, e_2, \dots, e_n]$ , où  $e_i$  est le  $i$ ème vecteur de la base canonique, on trouve

$$\begin{aligned} \det'(I)(A^{-1}B) &= \det[(A^{-1}B)_1, e_2, \dots, e_n] + \det[e_1, (A^{-1}B)_2, e_3, \dots, e_n] \\ &\quad + \dots + \det[e_1, e_2, \dots, e_{n-1}, (A^{-1}B)_n]. \end{aligned}$$

En développant colonne par colonne, on trouve  $\det[e_1, e_2, \dots, e_{i-1}, x(A^{-1}B)_i, e_{i+1}, \dots, e_n] = (A^{-1}B)_{i,i}$  pour tout  $i$ , d'où

$$\det'(I)(A^{-1}B) = \sum_{i=1}^n (A^{-1}B)_{i,i} = \text{Trace}(A^{-1}B).$$

En injectant cette relation dans (A.8), on trouve le résultat attendu. □

# Bibliographie

- [1] [https://en.wikipedia.org/wiki/KIVA\\_\(software\)](https://en.wikipedia.org/wiki/KIVA_(software)).
- [2] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994.
- [3] F. Golse. Mean field kinetic equations.  
[www.mathpolytechnique.fr/~golse/M2/PolyKinetic.pdf](http://www.mathpolytechnique.fr/~golse/M2/PolyKinetic.pdf).
- [4] D. L. Marchisio and R. O. Fox. *Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems*. Cambridge Series in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 2013.
- [5] A. Murrone and P. Villedieu. Numerical modelling of dispersed two-phase flows. *Journal Aerospace Lab*, 2, 2011.
- [6] L. Schneider. *A concise moment method for unsteady polydisperse sprays*. PhD thesis, der Technischen Universität Darmstadt, 2009.
- [7] F. Véron. Ocean spray. *Annual Reviews Fluid Mech.*, 2015.
- [8] Fabrice Veron and Luc Mieussens. An Eulerian model for sea spray transport and evaporation. *Journal of Fluid Mechanics*, 897 :A6, 2020. lien : [https://www.math.u-bordeaux.fr/~lmieusse/PAGE\\_WEB/PUBLICATIONS/2019/Paper\\_Kinetic\\_Rev3air.pdf](https://www.math.u-bordeaux.fr/~lmieusse/PAGE_WEB/PUBLICATIONS/2019/Paper_Kinetic_Rev3air.pdf).