

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI
COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN INGÉNIERIE

par

Antonin Dallaire

UN MODÈLE POUR LA SÉPARATION D'UNE ÉMULSION HUILE-EAU

Août 1997



Mise en garde/Advice

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

RÉSUMÉ

Les modèles de séparation d'une émulsion huile-eau sont utilisés pour la simulation des séparateurs gravitationnels huile-eau. Cependant, la plupart des modèles existants ne considèrent pas la coalescence des particules d'huile. Or, afin d'améliorer la précision d'un modèle de séparation, il est préférable de prendre compte le phénomène de coalescence.

Nous présentons un modèle eulérien-lagrangien de séparation qui tient compte de la coalescence des particules. Celui-ci est constitué d'un modèle eulérien de séparation couplé à un modèle lagrangien tenant compte de la coalescence. Le développement du modèle lagrangien constitue le point central du travail car l'important est de compléter un modèle eulérien, a priori quelconque, à l'aide d'un modèle lagrangien de coalescence.

Pour nous assurer de la validité du modèle eulérien-lagrangien, on simule, à l'aide de ce dernier, la séparation d'une émulsion huile-eau pour un séparateur gravitationnel simple. La comparaison de nos résultats avec ceux d'une expérience physique de ce genre déjà réalisée montre que le modèle reproduit bien la réalité de cette expérience.

Antonin Dallaire

Antonin Dallaire, étudiant

Sylvain Boivin

Sylvain Boivin, directeur de recherche

Rung Tien Bui

Rung Tien Bui, codirecteur de recherche

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|---|-----------|
| RÉSUMÉ | I |
| TABLE DES MATIÈRES | III |
| LISTE DES SYMBOLES | VI |
| LISTE DES FIGURES | IX |
| INTRODUCTION | 1 |
| CHAPITRE 1 : POSITION DU PROBLÈME | 3 |
| 1.1 UTILISATION DES SÉPARATEURS GRAVITATIONNELS | 3 |
| 1.2 TECHNOLOGIE DES SÉPARATEURS GRAVITATIONNELS | 4 |
| 1.3 PHÉNOMÈNE DE COALESCENCE | 7 |
| 1.4 MODÉLISATION DE LA COALESCENCE | 9 |
| 1.5 EXEMPLE DE MODÈLE DE COALESCENCE | 13 |
| 1.6 PROBLÈMES MODÈLES | 15 |
| | |
| CHAPITRE 2 : MODÈLE EULÉRIEN POUR UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE HUILE-EAU | 18 |
| 2.1 MODÈLE BI-FLUIDE EULÉRIEN (MODÈLE GÉNÉRAL) | 19 |
| 2.2 MODÈLE BI-FLUIDE SIMPLIFIÉ | 22 |

| | |
|--|-----------|
| CHAPITRE 3 : MODÈLE LAGRANGIEN POUR LE TRANSPORT, LA DISPERSION ET LA COALESCENCE DE PARTICULES D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE HUILE-EAU | 27 |
| 3.1 TRANSPORT D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE | 27 |
| 3.2 ÉVOLUTION DE LA VITESSE D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE | 28 |
| 3.3 INTRODUCTION DE LA DISPERSION TURBULENTE DANS L'ÉQUATION D'ÉVOLUTION DE LA VITESSE D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE | 30 |
| 3.4 COALESCENCE DES PARTICULES D'HUILE | 33 |
| CHAPITRE 4 : MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN POUR UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE HUILE-EAU AVEC PRISE EN COMPTE DE LA COALESCENCE | 37 |
| 4.1 PRISE EN COMPTE DE LA COALESCENCE DANS LE MODÈLE EULÉRIEN VIA LE MODÈLE LAGRANGIEN | 37 |
| 4.2 MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN (COMPLET) | 40 |
| 4.3 MISE EN OEUVRE DU MODÈLE DE COALESCENCE DES PARTICULES D'HUILE ... | 42 |
| CHAPITRE 5 : RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DU MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN SIMPLIFIÉ | 44 |
| 5.1 MODÈLE EULÉRIEN D'ÉVOLUTION DE LA PHASE HUILE DU MÉLANGE | 44 |
| 5.2 MODÈLE EULÉRIEN D'ÉVOLUTION DES PARTICULES D'HUILE | 45 |
| 5.3 MODÈLE LAGRANGIEN D'ÉVOLUTION DE LA PHASE HUILE (COLLECTION DE PARTICULES D'HUILE) | 50 |
| 5.4 RÉSOLUTION GLOBALE DU MODÈLE | 53 |

| | |
|--|-----------|
| CHAPITRE 6 : EXPÉRIMENTATION NUMÉRIQUE | 55 |
| 6.1 DESCRIPTION DES EXPÉRIENCES | 55 |
| 6.1.1 SÉPARATION D'UNE ÉMULSION DANS UNE BOUTEILLE | 56 |
| 6.1.2 SÉPARATION D'UNE ÉMULSION DANS UN CANAL HORIZONTAL | 58 |
| 6.2 MODÈLE DE TURBULENCE | 59 |
| 6.3 RÉSULTATS DES EXPÉRIENCES | 61 |
| 6.3.1 EXPÉRIENCE DE LA BOUTEILLE | 61 |
| 6.3.2 EXPÉRIENCE DU CANAL | 64 |
| 6.4 INTERPRÉTATION DES RÉSULTATS | 67 |
| CONCLUSION | 70 |
| BIBLIOGRAPHIE | 72 |
| ANNEXE 1 : ÉQUATION DE CONVECTION DE LA FRACTION VOLUMIQUE D'HUILE | 75 |
| ANNEXE 2 : INTRODUCTION AUX MODÈLES STOCHASTIQUES POUR LES FLUIDES | 78 |

LISTE DES SYMBOLES

| <u>SYMBOLE</u> | <u>QUANTITÉ</u> | <u>UNITÉ</u> |
|---------------------|---|---------------|
| A_h | aire de la section droite d'une particule d'huile | m^2 |
| C_d | coefficient de traînée d'une particule d'huile | - |
| d_p | diamètre des particules d'huile | m |
| dW | bruit blanc | - |
| f | forces externes | N |
| F_p | force de portance | N |
| g | champ gravitationnel | m/s^2 |
| I_e | échange de quantité de mouvement de la phase eau | $kg\ m^2/s^2$ |
| I_h | échange de quantité de mouvement de la phase huile | $kg\ m^2/s^2$ |
| k | constante de diffusion | - |
| $\langle k \rangle$ | énergie cinétique moyenne | $kg\ m^2/s^2$ |
| K | relation qui décrit l'influence des particules de la phase dispersée sur l'écoulement | - |
| n | normale à la paroi | - |

| | | |
|----------------------------|--|---------------|
| p_c | pression intergranulaire | Pa |
| p_e | pression de l'eau | Pa |
| P_e | pression moyenne de l'eau | Pa |
| p_h | pression de l'huile | Pa |
| Re | nombre de Reynolds | - |
| TL | temps de référence | s |
| u_e | vitesse de l'eau | m/s |
| U_e | vitesse moyenne de l'eau | m/s |
| u_h | vitesse de l'huile | m/s |
| U_h | vitesse moyenne de l'huile | m/s |
| u_r | vitesse relative | m/s |
| V_h | volume d'une particule d'huile | m^3 |
| v_p | vitesse d'une particule d'huile | m/s |
| W | processus de Wiener | - |
| X | position d'une particule d'huile | - |
| α | paramètre de turbulence | - |
| $\langle \epsilon \rangle$ | taux de dissipation moyen de l'énergie cinétique | $kg\ m^2/s^3$ |
| μ_e | viscosité de l'eau | $kg/m\ s$ |
| ν_e | viscosité cinématique de l'eau | m^2/s |
| ρ_e | densité de l'eau | kg/m^3 |

VIII

| | | |
|----------|----------------------------|-------------------|
| ρ_h | densité de l'huile | kg/m ³ |
| τ_p | temps de relaxation | s |
| ϕ_e | fraction volumique d'eau | - |
| ϕ_h | fraction volumique d'huile | - |

LISTE DES FIGURES

| | | |
|-----------|--|----|
| FIGURE 1 | Séparateur pour déversement majeur radial/vertical | 5 |
| FIGURE 2 | Séparateur pour déversement majeur horizontal | 5 |
| FIGURE 3 | Séparateur pour déversement majeur vertical (bande de dispersion) | 5 |
| FIGURE 4 | Séparateur à plusieurs plateaux | 5 |
| FIGURE 5 | Séparateur centrifuge | 6 |
| FIGURE 6 | Coalescence entre 2 bulles ou entre une bulle et l'interface | 7 |
| FIGURE 7 | Classification des modèles de coalescence | 11 |
| FIGURE 8 | Exemple de modèle de coalescence | 13 |
| FIGURE 9 | Expérience avec la bouteille de verre | 16 |
| FIGURE 10 | Mise en situation du séparateur | 17 |
| FIGURE 11 | Grille découplant le domaine | 42 |
| FIGURE 12 | Triangulation du domaine | 47 |
| FIGURE 13 | Triangle de la triangulation | 47 |
| FIGURE 14 | Lien entre le modèle eulérien et le modèle lagrangien | 54 |
| FIGURE 15 | Répartition initiale uniforme d'huile dans la bouteille de verre .. | 56 |
| FIGURE 16 | Répartition finale d'huile dans la bouteille de verre | 56 |

| | | |
|-------------|---|----|
| FIGURE 17 | Canal horizontal (distribution initiale d'huile) | 58 |
| FIGURE 18 | Évolution de la distribution d'huile dans la bouteille (réalité vs modèle) | 62 |
| FIGURE 19 | Évolution de la distribution du diamètre des bulles d'huile dans le haut de la bouteille (expérimentales et estimées par le modèle) | 63 |
| FIGURE 20 | Évolution de la distribution d'huile dans le canal | 64 |
| FIGURE 21 | Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha=0$) | 65 |
| FIGURE 22 | Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha=0.001$) ... | 65 |
| FIGURE 23 | Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha=0.01$) ... | 65 |
| FIGURE 24 | Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha=0.1$) | 65 |
| FIGURE 25 | Évolution de la masse d'huile à l'intérieur du canal pour divers α | 66 |
| FIGURE 26 | Diamètre moyen dans le temps (expérimental vs modèle) | 68 |
| FIGURE A1.1 | Visualisation du domaine | 75 |
| FIGURE A1.2 | Volume élémentaire de contrôle | 75 |

INTRODUCTION

Le sujet de ce mémoire est l'élaboration d'un modèle mathématique de séparation d'une émulsion huile-eau, qui tient compte de la coalescence des particules d'huile en suspension dans l'eau. Dans la littérature, il existe peu de modèles tenant compte du phénomène de coalescence. Pourtant, il est important de considérer ce phénomène afin d'obtenir un modèle représentatif de la séparation.

Nous présentons un modèle eulérien-lagrangien (chap 4) de séparation. Le modèle de base est de type eulérien et il est couplé à un modèle lagrangien spécifiquement pour tenir compte de la coalescence des particules.

Le modèle eulérien (chap 2) est issu de l'application des lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. En ce qui concerne le modèle de coalescence (chapitre 3), il est inspiré d'une part, des travaux de Pope [4,5], et d'autre part, de ceux de Minier [6,16,21] et Simonin [16,17,18,22,27] du Laboratoire National d'Hydraulique d'Électricité de France. La coalescence est vue comme un cas particulier de collision entre particules. Dans ce contexte, on utilise une approche statistique pour modéliser ce phénomène sous

forme de probabilité de collision. L'idée de base est de considérer le diamètre des particules d'huile comme une variable aléatoire stochastique $D(x,t)$. Dans ce cas, l'évolution de cette variable est décrite par une équation de Langevin [1]. Celle-ci tient compte de la coalescence en ajustant $D(x,t)$ pour les particules qui se sont probablement fusionnées. Le diamètre moyen des particules, premier moment de la distribution de D , sera utilisé dans le modèle eulérien de séparation de l'émulsion. C'est donc au travers de l'utilisation du diamètre moyen dans le modèle de séparation que celui-ci tiendra compte de la coalescence.

Le modèle de séparation est général, mais nous l'avons développé pour la simulation de séparateurs gravitationnels car il est particulièrement utile pour la réalisation de ce genre d'appareils. Avant de construire un séparateur gravitationnel, il est avantageux de vérifier son efficacité par une simulation numérique qui consiste à lui appliquer un modèle de séparation afin de simuler le comportement réel de celui-ci. Plus le modèle est représentatif, plus la simulation reproduira fidèlement la réalité.

Afin de valider le modèle, on expérimentera celui-ci sur un cas simple de séparation d'une émulsion huile-eau au repos dans un contenant. Dans ce contexte, la phase la moins dense, en l'occurrence l'huile, devrait monter en surface et se séparer progressivement de l'eau sous l'action de la gravité. Finalement, on vérifiera si le comportement du modèle de séparation reproduit bien la réalité en comparant les résultats des simulations numériques avec ceux des expérimentations physiques.

CHAPITRE 1

POSITION DU PROBLÈME

Avant d'élaborer le modèle eulérien-lagrangien de séparation d'une émulsion, on présente quelques notions sur les séparateurs gravitationnels. Tout d'abord, on aborde le cadre de leur utilisation et leurs divers aspects industriels. Ensuite, on traite de la coalescence et des approches possibles pour modéliser ce phénomène dans un séparateur gravitationnel. Finalement, on décrit les expériences que l'on désire réaliser sur des séparateurs gravitationnels simplifiés.

1.1 UTILISATION DES SÉPARATEURS GRAVITATIONNELS

Il existe de nombreux problèmes industriels où l'on a besoin de séparer les phases d'une émulsion huile-eau; en particulier dans les situations suivantes :

- déversement d'huile par un bateau en pleine mer (secteur pétrolier)
- décontamination d'un lac ou d'une rivière (secteur environnemental)

- déversement de l'huile des transformateurs dans l'eau de refroidissement (secteur hydro-électrique)
- déversement de l'huile des réservoirs sur un site pétro-chimique (secteur pétro-chimique)

Les séparateurs gravitationnels sont très utilisés pour séparer l'huile de l'eau dans les deux dernières situations, notamment par les producteurs d'électricité. Ces derniers utilisent plusieurs postes de transformation électrique où l'huile est requise en grandes quantités.

Parfois, des accidents, des incendies ou des bris peuvent causer des déversements d'huile. Il arrive que l'huile se déverse dans l'eau (eau de pluie, eau d'incendie) formant ainsi un mélange diphasique huile-eau. L'eau ainsi polluée doit être débarrassée de l'huile avant son évacuation dans l'environnement. Il est important de réduire au minimum la quantité d'huile entraînée par l'eau évacuée dans la nature.

1.2 TECHNOLOGIE DES SÉPARATEURS GRAVITATIONNELS

Les séparateurs gravitationnels se présentent sous diverses formes. On trouve cinq types principaux de séparateurs gravitationnels utilisés dans l'industrie [14].

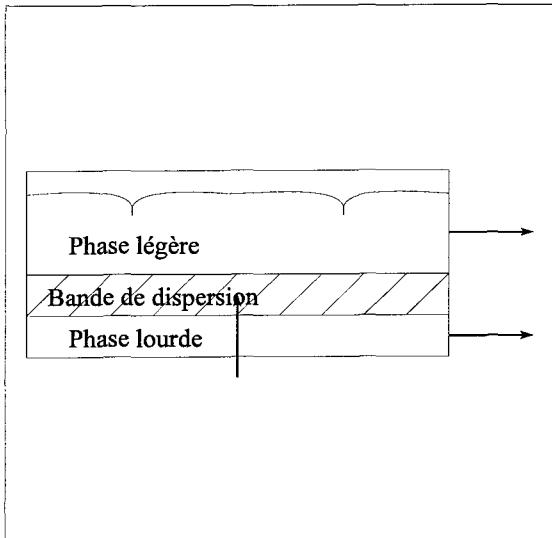


Figure 1: séparateur pour déversement majeur radial/vertical

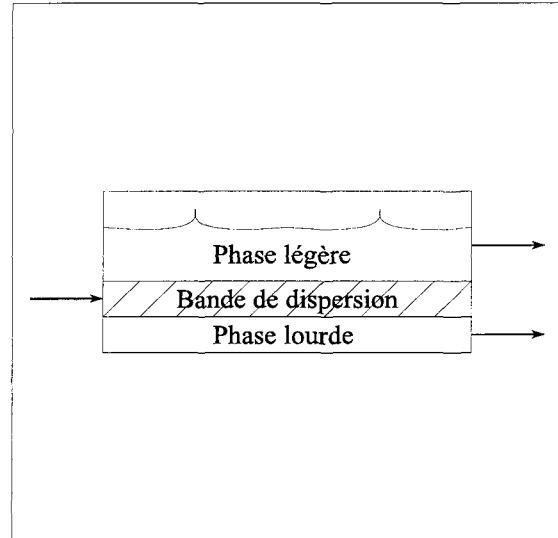


Figure 2: séparateur pour déversement majeur horizontal

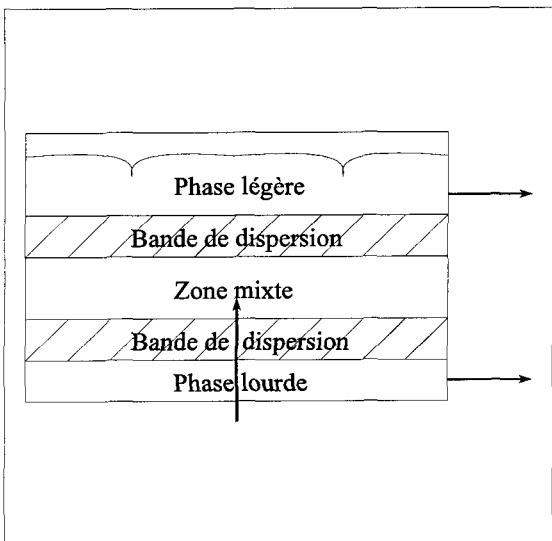


Figure 3: séparateur pour déversement majeur vertical (2 bandes de dispersion)

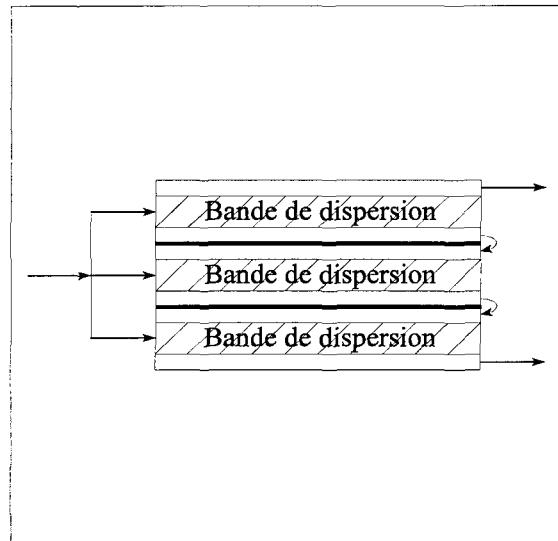


Figure 4: séparateur à plusieurs plateaux

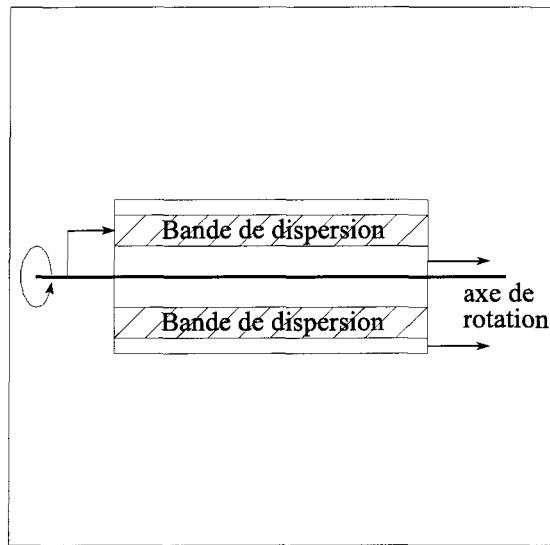


Figure 5: séparateur centrifuge

Les 5 types de séparateurs gravitationnels sont caractérisés par : introduction verticale du mélange en un point près du centre de la zone de dispersion (figure 1), introduction horizontale du mélange dans la zone de dispersion (figure 2), introduction de deux zones de dispersion (figure 3), subdivision de la zone de dispersion en plusieurs zones de dispersion pour augmenter l'efficacité (figure 4) et dissociation des phases par la force centrifuge (figure 5). Nous n'élaborerons pas plus sur le thème des différents types de séparateurs car ce n'est pas l'objet principal de notre travail, mentionnons seulement que les expérimentations numériques sont orientées vers des séparateurs pour déversement majeur horizontal (figure 2).

1.3 PHÉNOMÈNE DE COALESCENCE

La coalescence des particules d'huile en suspension dans une émulsion huile-eau est l'union de deux ou plusieurs particules pour en former une plus grosse. Ce processus est décrit par Hodgson et Woods [14] comme suit : deux particules, ou une particule et une phase continue s'approchent de plus en plus près, jusqu'à une distance δ , où le film de la phase continue présent entre les deux se brise et la coalescence se produit. La vitesse d'approche et le temps de coalescence τ sont déterminés par la vitesse à laquelle le fluide provenant du film se libère; après la rupture du film la nouvelle bulle se crée instantanément.

Sur la figure 6, on schématise le phénomène de coalescence entre deux bulles isolées et une bulle avec une phase continue d'huile.

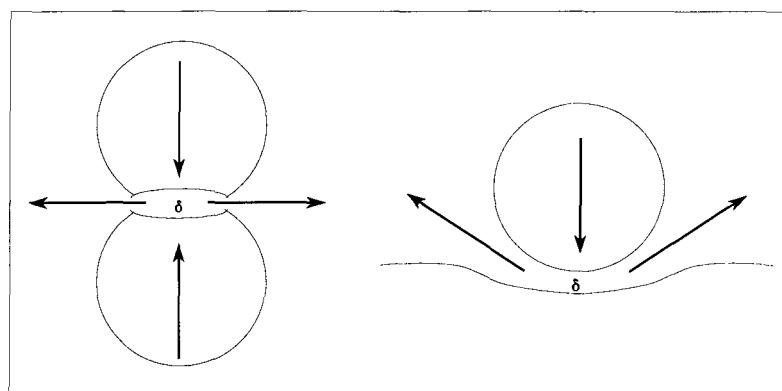


Figure 6 : Coalescence entre 2 bulles ou entre une bulle et l'interface

Plusieurs facteurs influencent le temps de coalescence des bulles d'huile. Les principaux sont :

- la dimension des particules
- la force de l'impact
- la viscosité des particules
- l'action des forces externes
- la viscosité de la phase continue
- les champs électrostatiques

Le temps de coalescence a tendance à augmenter si les deux phases en présence sont en mouvement. De plus, si les vitesses relatives entre les particules sont au-delà d'un certain seuil, le choc sera fort et elles peuvent rebondir sans qu'il y ait coalescence. Il est donc évident que la mise au point d'un modèle pour tenir compte de la coalescence nécessitera un effort de simplification important.

Reynolds [14] a approximé le temps de coalescence τ entre 2 surfaces immobiles par la relation suivante:

$$\tau = \frac{3}{4\pi} \frac{\mu}{\delta^2} \frac{A^2}{F}$$

où μ est la viscosité de la phase continue, A l'aire de la plus grande coupe d'une bulle, δ l'épaisseur critique du film et F sont les forces, appliquées à l'émulsion, qui régissent le phénomène de coalescence. Dans les situations plus complexes où le nombre de bulles est élevé, la force F est inconnue, le temps de coalescence ne peut être prédit de cette équation. Il en est de même si les bulles sont en mouvement.

La coalescence des particules d'huile en suspension influence de façon significative la séparation des phases de l'émulsion. En effet, en augmentant le diamètre des particules d'huile, la coalescence affecte le champ de vitesse de la phase huile et par le fait même le comportement entre les phases. Par conséquent, il est important de tenir compte de la coalescence des particules dans le modèle de séparation afin d'obtenir une bonne simulation de la séparation des phases d'une émulsion à l'intérieur d'un séparateur gravitationnel.

Toutefois, le phénomène est complexe et dépend de nombreux paramètres externes. Par conséquent, la modélisation de la coalescence est un problème ouvert. Nous allons tout de même proposer dans une section ultérieure un modèle qui reproduit relativement bien les aspects les plus significatifs de ce phénomène.

1.4 MODÉLISATION DE LA COALESCENCE

Le processus physique de la coalescence est de nature complexe et bien que le sujet soit

très documenté dans la littérature, l'information est souvent disparate et incomplète. Un modèle représentant fidèlement les processus liés à la coalescence et utilisable pour la conception de séparateurs reste à définir. Typiquement, les informations disponibles actuellement dans la littérature entrent dans l'une ou l'autre des deux catégories suivantes :

- (i) des études de la coalescence entre deux particules ou un assemblage précis de quelques particules. Ces études présentent généralement des corrélations entre le temps de coalescence et les paramètres physiques pour certains modes d'opérations bien déterminés.
- (ii) des rapports de campagnes de mesures de taux de coalescence pour les dispositifs de séparation d'utilisation courante dans l'industrie. Les données sont généralement globales et donnent peu d'information sur la dispersion des particules et leurs tailles.

Ces deux approches conduisent à différents modèles possibles de coalescence. La figure suivante illustre la classification de ces divers modèles de coalescence.

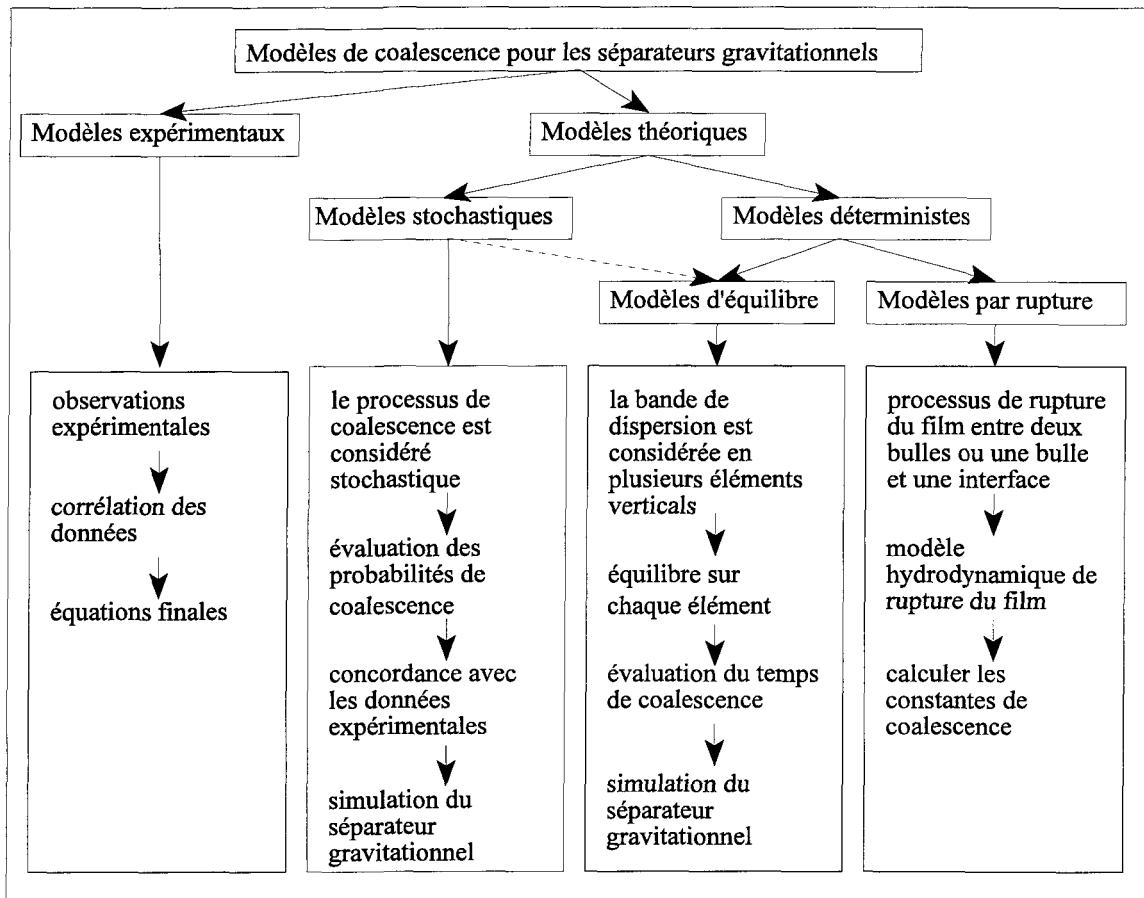


Figure 7: classification des modèles de coalescence

Il existe bien divers modèles capables de simuler l'écoulement d'une émulsion huile-eau, mais aucun ne tient compte, de manière satisfaisante, de la coalescence des particules d'huile. Cela est en partie attribuable au fait que la majorité des études donne des informations "microscopiques" sur ce phénomène, alors que les modèles pour les écoulements de fluides s'adressent au comportement macroscopique. En effet, il existe passablement d'études sur les aspects microscopiques de la coalescence (coalescence entre

deux particules). Zinchenko [15], Davis [11], Martin et Hartland [14], Davis et Zhan [13] ont étudié le taux de coalescence entre deux particules de tailles égales dans divers contextes. Feke et Schowalter [12] ont observé l'effet de la dispersion due au mouvement Brownien sur la coalescence de deux particules. Wang, Zinchenko et Davis [9] ont analysé le taux de coalescence entre deux particules de tailles quelconques. La théorie de l'interaction hydrodynamique entre deux particules est avancée à la suite de leurs travaux.

Cependant, les études qui traitent de l'effet macroscopique de la coalescence sur un écoulement diphasique, c'est-à-dire de l'effet global de la coalescence au sein de l'ensemble des particules, sont rares. Récemment, Hill et Ng [3] ont développé un modèle macroscopique de coalescence qui donne l'évolution du nombre et de la taille de l'ensemble des particules. Dans ce modèle, la distribution de probabilité du diamètre des particules d'huile est approximée par une distribution discrète associée à des intervalles de diamètre (classes). L'évolution des particules de chaque classe est régie par une équation différentielle et l'échange entre les classes, qui est assimilable à l'effet de la coalescence, est régie par une équation intégro-différentielle. La complexité liée au nombre d'équations différentielles, une par classe de diamètre, et l'inconnue liée à la forme du noyau régissant la coalescence, nous amènent à explorer une approche différente pour modéliser la coalescence.

1.5 EXEMPLE DE MODÈLE DE COALESCENCE

Voici un exemple typique de modèle macroscopique et phénoménologique de coalescence favorisé dans les applications industrielles. Il se situe dans la classe des modèles théoriques déterministes pour un séparateur gravitationnel de type bande de dispersion. On considère le dispositif suivant [14]:

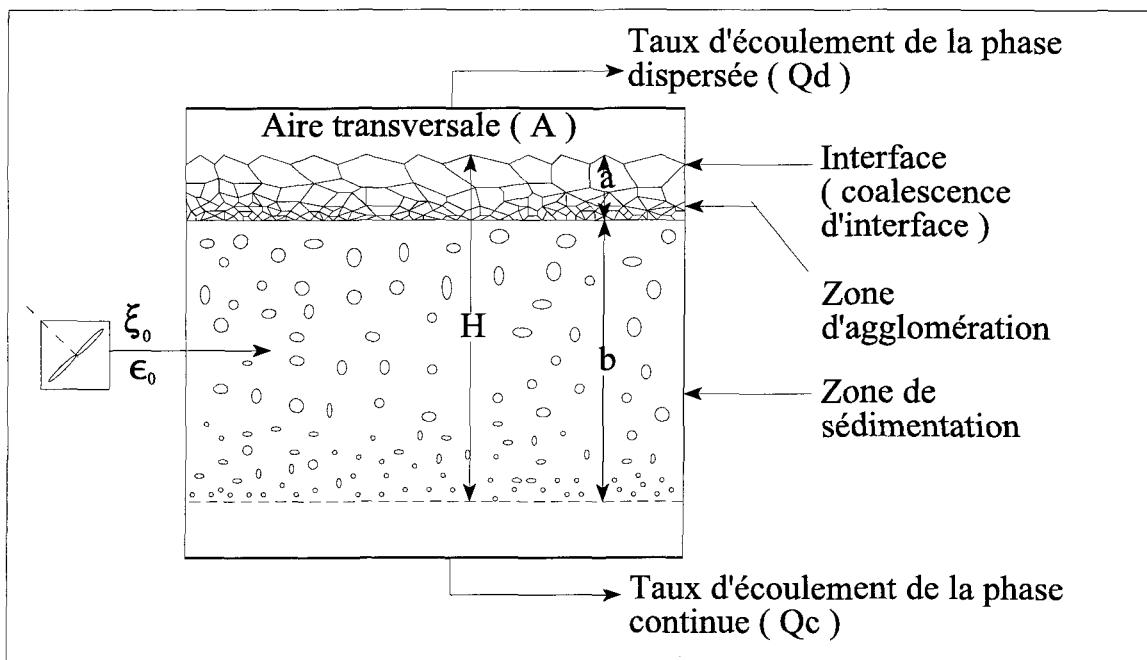


Figure 8: exemple de modèle de coalescence

Celui-ci consiste à introduire une émulsion, constituée d'une phase continue et d'une phase dispersée, dans le contenant. Les phases de l'éмуision évoluent et se dissocient

progressivement l'une de l'autre dans le contenant et sont évacuées via deux sorties. Le taux d'écoulement d'une phase (Q_c , Q_d) représente la quantité de masse de la phase qui est évacuée instantanément par une sortie.

H est la hauteur totale de la bande de dispersion de l'émulsion, à la hauteur de la zone d'agglomération, b la hauteur de la zone de sédimentation, A l'aire transversale, ϵ_0 la fraction volumique de la phase dispersée introduite et ξ_0 est le diamètre moyen des particules de la phase dispersée introduite.

Dans ce contexte, la coalescence est introduite par un modèle basé sur des relations algébriques dérivées de processus chimiques et physiques, qui influence la hauteur de la bande de dispersion. Par exemple, dans un modèle basé sur une loi de puissance on a la relation suivante qui donne la hauteur de la bande de dispersion en fonction du taux d'écoulement de la phase dispersée :

$$H \propto \left(\frac{Qd}{A} \right)^Y$$

où Y est une constante comprise entre 2.5 et 7.

La coalescence des particules influence le taux d'écoulement de la phase dispersée. Par conséquent, l'équation précédente tient compte de l'importance de ce phénomène sur la

hauteur de la bande de dispersion. Ce modèle de coalescence est simple, mais il n'est pas très précis. De plus, il n'est pas adapté aux séparateurs fonctionnant en mode continu car il ne tient pas compte de la convection. Dans notre cas, on va développer dans la section 3 un modèle stochastique qui reproduit mieux le comportement physique de la coalescence.

1.6 PROBLÈMES MODÈLES

Afin de valider le modèle de séparation d'une émulsion huile-eau, on se base sur deux expériences montées sur des dispositifs expérimentaux.

1) Bouteille

Un mélange huile-eau est produit dans une bouteille de verre. La bouteille est remplie d'eau et on injecte de l'huile dans celle-ci.

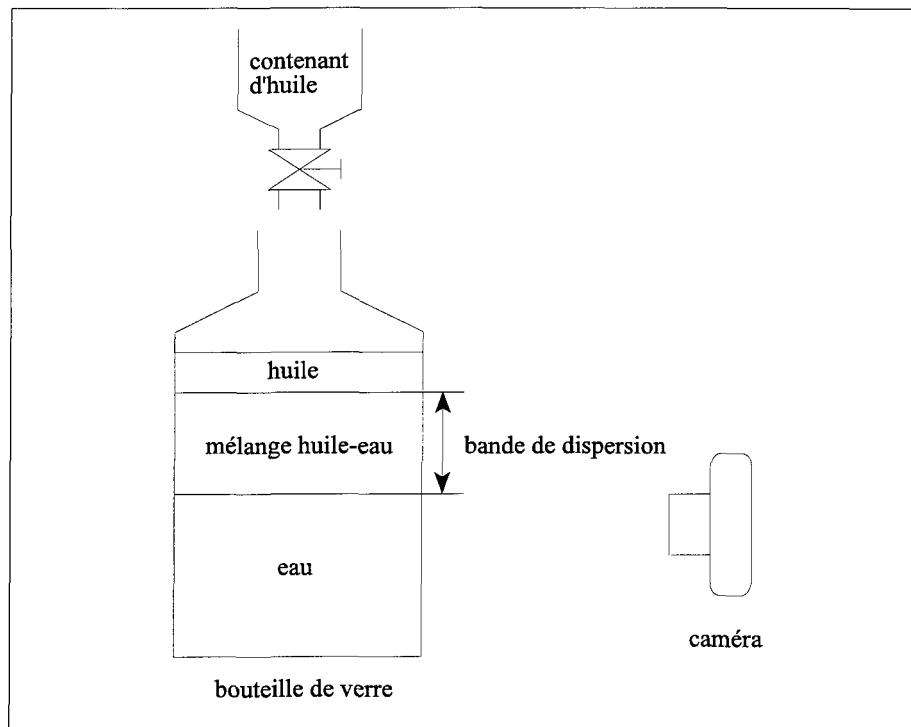


Figure 9: Expérience avec la bouteille de verre

L'expérience numérique consiste à simuler le comportement de l'émulsion huile-eau à l'intérieur de la bouteille via le modèle de séparation qui tient compte de la coalescence des particules d'huile et à valider le comportement du modèle avec les résultats d'une expérience qui a été effectuée récemment au laboratoire de l'UQAC par le GRIPS [30].

2) Montage d'un séparateur gravitationnel

Le montage illustré à la figure 10, prise de [31], situe un séparateur gravitationnel dans

un contexte d'utilisation industrielle. Des expériences physiques ont été réalisées récemment à l'UQAC sur ce montage. Cependant, on n'a pas pu obtenir de données utilisables qui nous permettent de valider notre modèle d'évolution d'une émulsion huile-eau dans de telles conditions. Nous allons donc laisser tomber la validation de notre modèle pour ce cas, mais il serait intéressant de le faire dans une autre étude.

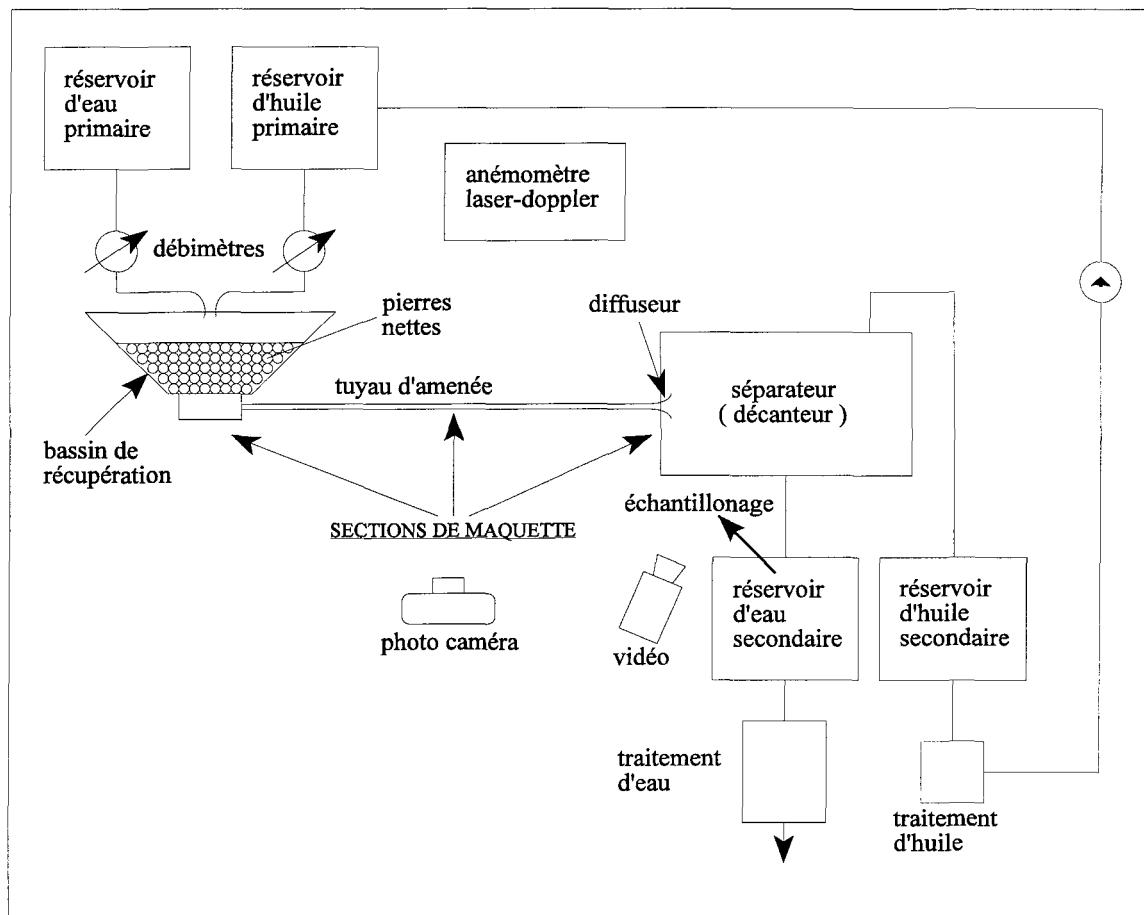


Figure 10: mise en situation du séparateur

CHAPITRE 2

MODÈLE EULÉRIEN POUR UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE HUILE-EAU

Il existe deux grandes approches utilisées pour simuler l'écoulement d'un mélange diphasique ou d'une émulsion; l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne. L'approche eulérienne consiste à traiter les phases du mélange comme des milieux continus qui s'entremêlent et à résoudre des équations de conservation (masse, quantité de mouvement, etc ...) pour des caractéristiques de chaque phase afin d'obtenir le comportement de celles-ci. L'approche lagrangienne exige que l'on identifie une phase continue et une phase dispersée. On considère ensuite la phase dispersée comme une collection de particules stochastiques qui simulent des particules physiques, chacune possédant ses propres caractéristiques : position, diamètre, vitesse, etc ... L'évolution du mélange dépend alors de l'évolution simultanée de la phase continue et de la phase dispersée. A priori, l'approche lagrangienne semble plus simple et naturelle, néanmoins pour des raisons de calculs numériques (précision, temps de calcul) c'est l'approche eulérienne qui est la plus utilisée. De plus, certains aspects de l'interaction entre les phases, notamment en présence de turbulence [29], sont difficiles à modéliser via une approche lagrangienne. On peut qualifier l'approche eulérienne de macroscopique par opposition à l'approche lagrangienne qui se

situe au niveau des particules (microscopique).

Dans ce chapitre, on présente un modèle eulérien d'écoulement diphasique d'une émulsion huile-eau. Il formera le contexte mathématique dans lequel on introduira un modèle auxiliaire (lagrangien celui-là) pour ajouter l'effet de la coalescence.

2.1 MODÈLE BI-FLUIDE EULÉRIEN (MODÈLE GÉNÉRAL)

On considère que le mélange diphasique huile-eau est constitué d'une phase continue (eau) et d'une phase dispersée (huile) formée de particules en suspension dans la phase continue. On suppose que les deux phases sont incompressibles et que la pression, pour les deux phases, est imposée par la phase continue. Dans ce contexte, un modèle général bi-fluide d'évolution du mélange, basé sur des lois de conservation, est donné par [26] :

- les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement de la phase eau

$$\frac{\partial \phi_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_e \mathbf{u}_e) = 0 \quad (2.1.1)$$

$$\frac{\partial \phi_e \mathbf{u}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_e \mathbf{u}_e \mathbf{u}_e) + \frac{\phi_e}{\rho_e} \nabla p_e - \frac{1}{\rho_e} \nabla \cdot \tau_e + \frac{1}{\rho_e} \mathbf{I}_e = \phi_e \mathbf{f} \quad (2.1.2)$$

- les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement de la phase huile

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h) = 0 \quad (2.1.3)$$

$$\frac{\partial \phi_h \mathbf{u}_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h \mathbf{u}_h) + \frac{\phi_h}{\rho_h} \nabla p_h - \frac{1}{\rho_h} \nabla \cdot \tau_h + \frac{1}{\rho_h} \nabla p_c + \frac{1}{\rho_h} I_h = \phi_h \mathbf{f} \quad (2.1.4)$$

- des relations de fermeture

$$\nabla p_e = \nabla p_h \quad (2.1.5)$$

$$I_h = - I_e = K \phi_e \phi_h \mathbf{u}_r \quad (2.1.6)$$

$$K = K(\phi_e, \phi_h, \|\mathbf{u}_r\|, \rho_e, \rho_h, \mu_e, d_p) \quad (2.1.7)$$

où ϕ_h est la fraction volumique d'huile, ϕ_e la fraction volumique d'eau, ρ_h la densité de l'huile, ρ_e la densité de l'eau, \mathbf{u}_h la vitesse de l'huile, \mathbf{u}_e la vitesse de l'eau, p_h la pression de l'huile, p_e la pression de l'eau, p_c la pression intergranulaire, τ_h le tenseur des contraintes effectives sur l'huile, τ_e le tenseur des contraintes effectives sur l'eau, μ_e la viscosité de l'eau, d_p le diamètre des particules d'huile, $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_h - \mathbf{u}_e$ la vitesse relative, K une relation qui tient compte du rôle des particules de la phase dispersée sur l'écoulement et \mathbf{f} les forces

externes. Finalement, I_h et I_e représentent respectivement l'échange de quantité de mouvement de la phase huile et de la phase eau.

La résolution de ce système d'équations donne la fraction volumique (ϕ_e, ϕ_h), les vitesses ($\mathbf{u}_e, \mathbf{u}_h$) et la pression p_e . L'évolution de l'ensemble de ces variables caractérise l'évolution du mélange diphasique huile-eau. Remarquons que ce système est ouvert car il reste à modéliser les quantités p_c et K , voir [26]. A titre d'exemple, on trouve dans [26] le modèle suivant pour la pression intergranulaire p_c :

$$P_c = \frac{2}{3} \phi_h \rho_h q_h^2 \left(1 + \frac{2\phi_h(1 + e_c)}{(1 - \frac{\phi_h}{\alpha_m})^{2.5\alpha_m}} \right)$$

où e_c est un coefficient d'élasticité des collisions entre les particules, q_h la racine carré de l'énergie cinétique du champ de vitesse de la phase huile et α_m le taux de compactage maximum des particules.

En ce qui concerne la relation K , qui décrit l'influence des particules de la phase dispersée sur l'écoulement au travers des échanges de quantité de mouvement I_h et I_e , elle peut prendre la forme suivante [22] :

$$\rho_h V_h \frac{d\mathbf{u}_h}{dt} = V_h (\rho_h - \rho_e) \mathbf{g} - \frac{1}{2} \rho_e C_d A_h \mathbf{u}_r \|\mathbf{u}_r\| - V_h \nabla p^* - \rho_e V_h C_{ma} \frac{d\mathbf{u}_r}{dt} + \mathbf{F}_p$$

$$-\nabla p^* = -\nabla p_e + \rho_e \mathbf{g}$$

où C_{ma} est un coefficient de masse ajoutée. Il est à noter que le modèle de coalescence que l'on va introduire (chapitre 3) va modifier le diamètre d_p des particules d'huile et affecter cette relation de manière importante, notamment par le biais de C_d , V_h et A_h .

2.2 MODÈLE BI-FLUIDE SIMPLIFIÉ

Ce qui nous intéresse avant tout c'est l'élaboration d'un modèle de coalescence représentatif, efficace et pouvant être couplé avec la majorité des modèles bi-fluides. Or, le modèle bi-fluide décrit sommairement en 2.1 est trop complexe à résoudre pour les besoins de ce travail. De plus, on ne sait pas résoudre ce modèle pour des écoulements turbulents [26]. Par conséquent, on introduit une hypothèse dans le but de simplifier la modélisation et permettre la prise en compte de l'effet de la turbulence. L'hypothèse consiste à négliger l'effet de la phase constituée de particules (huile) en suspension sur la phase continue (eau). Par conséquent, l'évolution de la phase continue (eau) peut être modélisée, en supposant qu'il n'y a que de l'eau (c'est-à-dire $\phi_e = 1$), par les équations usuelles de conservation de la masse et de la quantité de mouvement pour un fluide, soit les équations de Navier-Stokes suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_e = 0 \quad (2.2.1)$$

$$\rho_e \left(\frac{\partial \mathbf{u}_e}{\partial t} + \mathbf{u}_e \nabla \mathbf{u}_e \right) - \mu_e \Delta \mathbf{u}_e + \nabla p_e = \mathbf{f} \quad (2.2.2)$$

La résolution de ces équations fournit la vitesse et la pression de la phase continue (eau).

On remarque que les équations 2.2.1 et 2.2.2 proviennent des équations 2.1.1 et 2.1.2 auxquelles on a appliqué l'hypothèse simplificatrice et on a négligé des termes d'interaction entre les phases.

L'approche usuelle pour tenir compte de la turbulence est de décomposer le champ instantané \mathbf{u}_e en une partie moyenne \mathbf{U}_e et une partie fluctuante $\mathbf{u}_e' = \mathbf{u}_e - \mathbf{U}_e$ et d'appliquer un opérateur de moyenne à l'équation (2.2.2). Elle prend alors la forme

$$\rho_e \left(\frac{\partial \mathbf{U}_e}{\partial t} + \mathbf{U}_e \nabla \mathbf{U}_e \right) - \mu_e \Delta \mathbf{u}_e + \nabla \cdot \mathbf{R} + \nabla p_e = \mathbf{f} \quad (2.2.3)$$

où \mathbf{R} est le tenseur des contraintes de Reynolds dont la forme exacte est

$$\mathbf{R} = \langle \rho_e \mathbf{u}_e' \otimes \mathbf{u}_e' \rangle$$

En pratique, \mathbf{R} est fourni par un modèle de turbulence car on ne dispose pas de la valeur de

\mathbf{u}_e' .

En ce qui concerne l'évolution de la phase huile, on la modélise par l'équation de convection (annexe 1) suivante, caractérisant la conservation de la masse d'huile :

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h) = 0 \quad (2.2.4)$$

où \mathbf{u}_e et \mathbf{u}_h sont les vitesses instantanées des phases.

La résolution de l'équation 2.2.4 fournit la fraction volumique d'huile ϕ_h et celle de l'eau ϕ_e puisque ces fractions volumiques sont reliées entre elles par l'équation $\phi_h + \phi_e = 1$.

On écrit la vitesse de la phase huile sous la forme $\mathbf{u}_h = \mathbf{u}_e + \mathbf{u}_r$, c'est-à-dire la vitesse de la phase continue (eau) à laquelle on ajoute une vitesse relative \mathbf{u}_r . La vitesse relative peut être obtenue via une équation de conservation de la quantité de mouvement dans laquelle on suppose un équilibre instantané des forces et on néglige l'inertie [22]. On obtient l'équation suivante

$$V_h (\rho_h - \rho_e) \mathbf{g} - \frac{1}{2} \rho_e C_d A_h \mathbf{u}_r \|\mathbf{u}_r\| = 0 \quad (2.2.5)$$

où V_h est le volume des particules d'huile, \mathbf{g} le champ gravitationnel, C_d le coefficient de traînée, A_h l'aire de la section droite des particules. Il est à noter que les quantités V_h et A_h sont a priori inconnues. On suppose que les particules d'huile sont sphériques de sorte que le volume V_h et l'aire de la section droite A_h d'une particule de rayon r seront calculés respectivement par $\frac{4\pi r^3}{3}$ et πr^2 . Toujours sous l'hypothèse que les particules sont sphériques, le coefficient de traînée de la phase huile en mouvement et le nombre de Reynolds sont donnés par [17] :

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) & , \text{ si } Re = \frac{d_p \| \mathbf{u}_r \|}{v_e} \leq 1000 \\ 0.44 & , \text{ autrement} \end{cases} \quad (2.2.6)$$

où $v_e = \frac{\mu_e}{\rho_e}$ est la viscosité cinétique du fluide.

L'équation 2.2.5 est utilisée pour déterminer la vitesse relative \mathbf{u}_r . Cette dernière servira à calculer la vitesse \mathbf{u}_h de la phase huile. On remarque que cette équation est fortement non-linéaire puisque Re dépend de \mathbf{u}_r , C_d dépend de Re et on a le terme $C_d(Re(\mathbf{u}_r)) \mathbf{u}_r \| \mathbf{u}_r \|$ qui est non-linéaire en \mathbf{u}_r .

Dans le chapitre suivant, on expose le modèle lagrangien de coalescence qui sera combiné au modèle eulérien simple (chap 4) afin que ce dernier considère la coalescence. Notons que le fait d'exposer le modèle de coalescence dans un modèle bi-fluide simple n'entache en

rien sa généralité. De plus, il devient beaucoup plus facile de caractériser son effet et de le valider.

CHAPITRE 3

MODÈLE LAGRANGIEN POUR LE TRANSPORT, LA DISPERSION ET LA COALESCENCE DE PARTICULES D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASICHE HUILE-EAU

On considère d'abord l'évolution de l'ensemble des particules de la phase huile (évolution de la position et de la vitesse des particules), supposées être des sphères rigides, dans l'écoulement diphasique du mélange. Ensuite, on étend le modèle de manière à prendre en compte la coalescence des particules. On se base alors sur une approche collisionnelle.

3.1 TRANSPORT D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASICHE

Soit X la variable position d'une particule d'huile. L'équation pour le transport de la particule, qui donne l'évolution de la position X , est la suivante :

$$\frac{dX}{dt} = \mathbf{v}_p \quad (3.1.1)$$

où \mathbf{v}_p est la vitesse de la particule d'huile.

3.2 ÉVOLUTION DE LA VITESSE D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE

On peut déduire, à partir de principes physiques et de l'équation de Newton $F = ma$, une équation pour la vitesse (lagrangienne), \mathbf{v}_p , d'une particule sphérique dans un fluide [25] :

$$\frac{\pi d^3}{6} \rho_h \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = F_1 + F_2 \quad (3.2.1)$$

où

$$F_1 = \frac{\pi d^3}{6} \rho_e \frac{D\mathbf{u}_e}{Dt} + \frac{\pi d^3}{6} (\rho_h - \rho_e) \mathbf{g} \quad (3.2.2)$$

$$F_2 = \frac{1}{2} \frac{\pi d^2}{4} \rho_e C_d \| \mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p \| (\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p) + \frac{\pi d^3}{12} \rho_e \left(\frac{D\mathbf{u}_e}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} \right) + \frac{3}{2} d^2 \rho_e \sqrt{\pi v} \int_{-\infty}^t \frac{d}{d\tau_p} (\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p) \frac{d\tau_p}{\sqrt{t - \tau_p}} \quad (3.2.3)$$

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) & , \text{ si } Re = \frac{d_p \| \mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p \|}{v_e} \leq 1000 \\ 0.44 & , \text{ autrement} \end{cases} \quad (3.2.4)$$

Dans F_1 on trouve la force de gradient de pression et la force de gravité, dans F_2 on trouve la force de traînée, la force de masse-ajoutée et la force de Basset. La forme exacte,

notamment les expressions contenant une dérivée matérielle de la vitesse du fluide, des forces de gradient de pression, de masse-ajoutée et de Basset, est sujette à controverse.

Lorsque $\|\rho_e - \rho_h\|$ est relativement grand, on sait que les forces de gravité et de traînée dominent, nous allons donc retenir ces deux forces seulement. Dans ce contexte, l'équation

3.2.1 s'écrit

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) \mathbf{g} \quad (3.2.5)$$

$$\text{où } \tau_p = \frac{4 d \rho_h}{3 \rho_e C_d \|\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p\|} \quad (3.2.6)$$

Notons que τ_p peut être vu comme un temps de relaxation dans le retour de la vitesse de la particule à la vitesse du fluide. Si $\mathbf{u}_e > \mathbf{v}_p$, $\frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p}{\tau_p}$ accélère la particule, Si $\mathbf{u}_e < \mathbf{v}_p$, $\frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p}{\tau_p}$ ralentie la particule, jusqu'à atteindre $\mathbf{u}_e = \mathbf{v}_p$, et dans ce cas $\frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p}{\tau_p}$ est nul.

Les gouttes d'huile ne sont généralement pas assimilables à des sphères. De même, l'écart entre la densité de l'eau et celle de l'huile n'est pas grand. Mais en l'absence d'alternative valable, nous allons retenir ces hypothèses. Il est souhaitable que l'impact réel de ces choix soit évalué dans une étude ultérieure.

3.3 INTRODUCTION DE LA DISPERSION TURBULENTE DANS L'ÉQUATION D'ÉVOLUTION DE LA VITESSE D'UNE PARTICULE D'HUILE DANS UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE

Dans le cas d'un écoulement turbulent les équations de Navier-Stokes sont résolues pour les variables moyenne \mathbf{U}_e , P_e et des caractéristiques de la turbulence (k , ϵ). L'équation de conservation de la masse d'huile peut être ajustée en ajoutant un terme de dispersion turbulente. La prise en compte de l'effet de la turbulence dans le modèle lagrangien est plus délicate. En effet, celui-ci (voir éq. 3.2.5) dépend explicitement des vitesses instantanées. Il est alors nécessaire d'introduire des techniques stochastiques afin de recréer un champ de vitesse instantanée \mathbf{u}_e car on ne connaît alors que la vitesse moyenne \mathbf{U}_e .

En mécanique des fluides, l'équation exacte d'évolution instantanée d'une particule est donnée par Navier-Stokes écrite ici en formulation lagrangienne :

$$\frac{d\mathbf{u}_e}{dt} = - \frac{1}{\rho_e} \nabla p_e + v \Delta \mathbf{u}_e$$

En décomposant la pression instantanée en partie moyenne et fluctuante et en négligeant le terme visqueux moyen pour les grands nombres de Reynolds, on a la forme équivalente :

$$\frac{d\mathbf{u}_e}{dt} = - \frac{1}{\rho_e} \nabla P_e - \frac{1}{\rho_e} \nabla P'_e + v \Delta U'_e$$

où P_e' et \mathbf{U}_e' sont respectivement les parties fluctuantes du gradient de pression et du terme visqueux.

Dans l'équation exacte, on remplace la partie fluctuante des forces, soit le gradient de pression fluctuant et le terme visqueux, par un modèle. Les modèles utilisés actuellement sont des modèles stochastiques. Ils s'écrivent de façon générale comme :

$$d\mathbf{u}_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - D dt + B dW$$

où D est le coefficient de dérive et B le coefficient de diffusion. W est un vecteur constitué de deux processus de Wiener indépendants et dW représente un bruit blanc gaussien vectoriel. La version la plus simple fait intervenir un terme de retour vers l'équilibre avec un temps caractéristique, soit [28] :

$$d\mathbf{u}_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - \frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{U}_e}{TL} dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW \quad (3.3.1)$$

$$TL = \frac{2}{C_0} \frac{\langle k \rangle}{\langle \epsilon \rangle} \quad (3.3.2)$$

où C_0 , $\langle k \rangle$, $\langle \epsilon \rangle$ et P_e sont respectivement une constante physique, l'énergie cinétique moyenne, le taux de dissipation moyen de l'énergie cinétique et la pression moyenne du fluide. Toutes ces quantités (sauf C_0) sont des sous-produits du modèle de turbulence

utilisé. Il est à noter que c'est le terme aléatoire $\sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW$ qui recrée les fluctuations de la vitesse au travers d'un processus de Wiener [1,2].

Il est possible, sous l'hypothèse $TL \ll \tau_p$, de calculer directement la vitesse u_ϵ du fluide.

Cette hypothèse implique que dans un temps de l'ordre de τ_p , u_ϵ aura beaucoup fluctué et en quelque sorte aura atteint l'équilibre, on suppose que u_ϵ a atteint l'équilibre on écrit alors directement que

$$d u_\epsilon = 0 \quad (3.3.3)$$

ce qui implique la relation suivante

$$u_\epsilon dt = U_\epsilon dt - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_\epsilon dt TL + TL \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW \quad (3.3.4)$$

où le bruit blanc dW est exprimé par l'incrément d'un processus de Wiener $W(t)$. Dans notre cas l'incrément $dW(t)$ peut être vu comme un vecteur à deux composantes, celles-ci sont des variables aléatoires gaussiennes $N(0,1)$, [4].

3.4 COALESCEENCE DES PARTICULES D'HUILE

La coalescence de particules parmi un ensemble de particules durant un intervalle de temps $[0,t]$ est considérée comme un processus de Poisson [5]. Dans ce cas, la probabilité d'avoir la coalescence de k paires de particules durant $[0,t]$ est donné par la loi de Poisson :

$$P(k, [0,t]) = \frac{(\lambda t)^k}{k!} e^{-\lambda t}$$

En effet si l'on divise l'intervalle $[0,t]$ en sous-intervalles de temps Δt , très petits, tels que

(i) durant cet intervalle la probabilité d'avoir la coalescence de deux paires de particules ou plus est 0 alors la coalescence sur cet intervalle est un processus de Bernoulli.

(ii) dans chaque intervalle Δt on a un processus de Bernoulli dont la probabilité d'avoir la coalescence d'une paire de particules est $\lambda \Delta t$.

(iii) les processus dans chaque intervalle sont indépendants

alors la distribution du nombre k de paires de particules qui fusionnent par coalescence durant $[0,t]$ est une loi binomiale de paramètres $n = t / \Delta t$ et $p = \lambda \Delta t$. Si l'on fait tendre Δt

vers 0 alors on obtient

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} P(k, [0, t]) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \binom{n}{k} (\lambda t)^k (1 - \lambda t)^{n-k} = \frac{(\lambda t)^k}{k!} e^{-\lambda t}$$

ce qui correspond bien à la distribution de probabilité d'un processus de Poisson. Dans ce processus, le paramètre λ représente le nombre moyen de paires de particules qui fusionnent durant une unité de temps. Afin de déterminer ce paramètre on utilise les équations suivantes tirées d'un modèle d'interaction entre particules [5] :

$$\lambda = 1 / \tau_n$$

$$\tau_n = \tau / (c_\phi N)$$

$$\tau = k / \epsilon$$

où τ est un temps de référence, c_ϕ une constante empirique (en général 2), N le nombre de particules, k l'énergie cinétique et ϵ le taux de variation de l'énergie cinétique.

Par conséquent, la probabilité de coalescence d'une paire de particules durant un intervalle de temps Δt est $\lambda \Delta t$ c'est-à-dire $c_\phi \Delta t N / \tau$. Comme le nombre N de particules du modèle lagrangien n'est pas représentatif, on utilise la fraction volumique d'huile ϕ_h afin de calculer un nombre de particules représentatif de la situation. En supposant que le nombre maximum de particules du modèle lagrangien est 2000 et en considérant le diamètre des

particules constant, on peut approximer N par la relation suivante :

$$\phi_h = \text{volume huile} / \text{volume total} \approx N / 2000$$

De cette façon, la probabilité devient $c_\phi \Delta t 2000 \phi_h / \tau$. Finalement, en posant $c = 2000 c_\phi / \tau$ on obtient $c \Delta t \phi_h$. Il est à noter que la présence de valeurs indéterminées dans c (soient c_ϕ et τ) nous a amené à considérer c comme un paramètre pour ajuster le modèle afin de reproduire correctement les résultats expérimentaux. Nous verrons au chapitre 6 que les expériences réalisées avec $c = 2$ fusions/sec donnent des résultats acceptables.

À partir de cette probabilité, on utilise un algorithme, appliqué successivement à chaque point x du domaine, afin de simuler la coalescence via l'évolution du diamètre des particules. L'algorithme inspiré de [5] est le suivant :

- 1) Calcul de la probabilité $c \Delta t \phi_h$ de coalescence d'une paire de particules parmi un ensemble durant un intervalle de temps donné Δt

- 2) Calcul d'un nombre aléatoire uniforme entre 0 et 1 à l'aide d'une simulation de Monte Carlo

- 3) À partir du nombre aléatoire on décide s'il y a eu coalescence d'une paire de particules durant le temps donné. En bref, il y a coalescence si, et seulement si, le nombre aléatoire obtenu est inférieur à la probabilité de coalescence
- 4) S'il y a coalescence d'une paire de particules, on choisit aléatoirement deux particules au voisinage de x et on décide que ce sont ces deux particules qui ont coalescé ensemble.

Remarque: Si la première particule de diamètre d_1 a un volume de $\frac{\pi d_1^3}{6}$ et la deuxième particule de diamètre d_2 a un volume de $\frac{\pi d_2^3}{6}$, le volume totale de la nouvelle particule est $\frac{\pi}{6} (d_1^3 + d_2^3)$ correspondant à un diamètre de $\sqrt[3]{d_1^3 + d_2^3}$.

CHAPITRE 4

MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN POUR UN ÉCOULEMENT DIPHASIQUE HUILE-EAU AVEC PRISE EN COMPTE DE LA COALESCENCE

Dans cette section, on présente un modèle original eulérien-lagrangien d'écoulement diphasique d'une émulsion huile-eau. Celui-ci est constitué d'un modèle de base eulérien couplé à un modèle lagrangien de transport et de coalescence des particules d'huiles. L'ajout du modèle lagrangien permet au modèle eulérien de prendre en considération le phénomène de coalescence. On détaille la mise en oeuvre du modèle de coalescence des particules. Il est à noter que les modèles eulérien et lagrangien que l'on utilise sont détaillés respectivement au chapitre 2 et 3. Dans un premier temps, on montre comment l'ajout du modèle lagrangien permet au modèle eulérien de considérer le phénomène de coalescence.

4.1 PRISE EN COMPTE DE LA COALESCENCE DANS LE MODÈLE EULÉRIEN VIA LE MODÈLE LAGRANGIEN

Les modèles eulériens en 2.1 et 2.2 simulent un écoulement diphasique mais ne tiennent pas compte de la coalescence des particules de la phase huile. Or, le diamètre d_p des particules, utilisé dans le modèle eulérien, est fortement influencé par la coalescence. Par

conséquent, on utilise un modèle lagrangien afin d'introduire ce phénomène.

L'idée de base du modèle lagrangien est de considérer la phase huile comme une collection de particules. Dans ce contexte, l'évolution de la phase huile s'effectue via l'évolution de chaque particule qui la compose. Le modèle de transport et coalescence des particules décrit dans le chapitre 3 est utilisé pour représenter l'évolution de l'ensemble des particules d'huile. De cette façon, on obtient l'évolution du champ de diamètre $D(x,t)$ de celles-ci, tout en tenant compte de la coalescence.

En effet, le champ de diamètre $D(x,t)$ des particules est obtenu indirectement par la distribution de celles-ci dans le domaine. Le fait de connaître la distribution des particules permet également de connaître la distribution de chacune des caractéristiques des particules, en particulier le diamètre.

Ensuite, on calcule un champ de distribution de probabilité de $D(x,t)$ associé à une grille découplant le domaine en plusieurs cases. Ce champ représente la répartition du diamètre des particules dans chaque case de la grille à un temps donné.

Le modèle eulérien nécessite un diamètre de particules d_p en un ensemble de points du domaine (équation 2.2.5) afin d'évaluer la vitesse locale de l'huile. En chaque point x du modèle eulérien, on utilise, comme valeur d_p , le diamètre moyen de la distribution de

probabilité associé à la case contenant x , soit le premier moment de $D(x,t)$. Ainsi, le modèle eulérien considère la coalescence puisque dans le modèle lagrangien, modèle qui fournit la distribution de diamètre au modèle eulérien, l'algorithme de coalescence ajuste la distribution du diamètre $D(x,t)$ et par conséquent le diamètre moyen.

Notons qu'il est important de considérer le diamètre des particules non pas comme une constante mais comme un champ scalaire $D(x,t)$ puisque la coalescence implique des particules de tailles différentes.

Remarquons que le modèle eulérien et le modèle lagrangien résolvent tous les deux l'évolution de la phase huile. Toutefois, le premier représente l'évolution de la phase huile sous forme d'une répartition de la fraction volumique de l'huile alors que le deuxième représente l'évolution de la phase huile sous forme d'un mouvement de particules. Il est important de résoudre l'évolution de la phase huile par le modèle lagrangien car celui-ci fournit au modèle eulérien le champ $D(x,t)$ du diamètre qui tient compte de la coalescence.

Dans cette approche, on peut s'attendre à des problèmes de performance numérique due au fait que l'on résout deux fois l'évolution de la phase huile. Cependant, le modèle lagrangien ne vise que le calcul de la distribution de diamètre et peut-être résolu sur une grille relativement grossière à peu de frais.

4.2 MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN

Le modèle eulérien-lagrangien complet est obtenu en combinant le modèle eulérien (section 2.2) avec le modèle lagrangien (chap 3) pour tenir compte de la coalescence des particules d'huile. L'échange d'information entre les modèles se fait de l'eulérien vers le lagrangien pour \mathbf{U}_e , ϕ_h , k et ϵ et du lagrangien vers l'eulérien pour le champ de diamètre des particules. La partie eulérienne est donnée par les équations suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_e = 0 \quad (4.2.1)$$

$$\rho_e \left(\frac{\partial \mathbf{U}_e}{\partial t} + \mathbf{U}_e \nabla \mathbf{U}_e \right) - \mu_e \Delta \mathbf{u}_e + \nabla \cdot \mathbf{R} + \nabla p_e = \mathbf{f} \quad (4.2.2)$$

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h) = 0 \quad (4.2.3)$$

$$V_h (\rho_h - \rho_e) \mathbf{g} - \frac{1}{2} \rho_e C_d A_h \mathbf{u}_r \|\mathbf{u}_r\| = 0 \quad (4.2.4)$$

+ modèle de turbulence pour obtenir \mathbf{R} , k et ϵ

On ajoute le modèle lagrangien pour l'évolution de la phase huile sous forme d'un ensemble de particules de manière à obtenir le champ de diamètre des particules de la phase huile.

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{v}_p \quad (4.2.5)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) \mathbf{g} \quad (4.2.6)$$

$$\tau_p = \frac{4 d \rho_h}{3 \rho_e C_d \| \mathbf{u}_e - \mathbf{v}_p \|} \quad (4.2.7)$$

$$d\mathbf{u}_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - \frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{U}_e}{TL} dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW \quad (4.2.8)$$

$$TL = \frac{2}{C_0} \frac{\langle k \rangle}{\langle \epsilon \rangle} \quad (4.2.9)$$

+ modèle de coalescence (voir section 3.4)

Il est à noter que le modèle de coalescence influence le diamètre des particules. En utilisant le champ de distribution du diamètre au travers de l'équation 4.2.4 via la moyenne (voir section 4.1), le modèle eulérien tiendra compte de la coalescence.

Remarque: si $TL \ll \tau_p$ on peut simplifier la partie lagrangienne du modèle. (voir 3.3.3 - 3.3.4)

4.3 MISE EN OEUVRE DU MODÈLE DE COALESCENCE DES PARTICULES D'HUILE

Soit $D(x,t)$ le champ de diamètre des particules d'huile présentes dans le mélange diphasique huile-eau. À partir d'une grille rectangulaire découplant le domaine en plusieurs sections, on génère des échantillons initiaux de particules, selon une loi de probabilité appropriée, dans chacune des sections de la grille par une simulation de Monte Carlo. Les échantillons constituent des groupes de particules stochastiques, c'est-à-dire que ces particules ne sont pas des particules physiques mais elles représentent statistiquement des ensembles de particules réelles. Il est à noter que les échantillons ne sont pas représentatifs de la fraction volumique d'huile, cependant ils le sont en ce qui concerne la distribution $D(x,t)$ du diamètre.

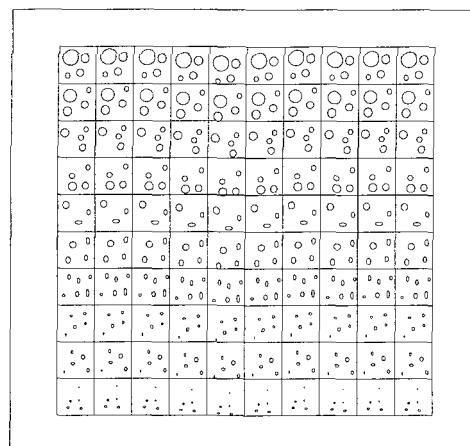


Figure 11 : Grille découplant le domaine

On utilise ensuite le modèle lagrangien pour le transport (4.2.5) , la coalescence (3.4) et la mise à jour de la vitesse (4.2.6 - 4.2.8) des particules d'huile afin de modéliser l'évolution du champ de diamètre $D(x,t)$ des particules d'huile via l'évolution des particules elles-mêmes. Le modèle d'évolution de $D(x,t)$ consiste donc, dans un premier temps, à transporter chaque particule d'huile selon sa vitesse et à recalculer sa vitesse. Ensuite, dans chaque case de la grille, on fusionne deux particules d'huile, choisies aléatoirement, si la probabilité de coalescence d'une paire de particules dans cette case durant l'intervalle de temps utilisé est suffisamment grande. De cette façon, la distribution $D(x,t)$ est directement modifiée par la coalescence puisque la fusion des particules réduit le nombre de celles-ci et augmente le premier moment de $D(x,t)$, soit le diamètre moyen. Ensuite, le nouveau champ de distribution de probabilité du diamètre $D(x,t)$ est calculé en se basant sur la répartition du diamètre $D(x,t)$ des particules dans chaque section de la grille.

Par la suite, on tient compte de l'effet macroscopique du transport des particules d'huile et leur coalescence sur l'écoulement diphasique en utilisant la moyenne de la distribution du diamètre des particules d'huile stochastiques dans une section de la grille comme diamètre d_p requis dans le modèle eulérien (équation 4.2.4).

CHAPITRE 5

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DU MODÈLE EULÉRIEN-LAGRANGIEN SIMPLIFIÉ

Dans cette section, on aborde la résolution numérique du modèle eulérien-lagrangien simplifié (section 4.2). Dans un premier temps, on parle de la résolution de la partie eulérienne du modèle pour l'évolution des phases de l'émulsion. Par la suite, on traite de la partie lagrangienne du modèle qui permet de décrire l'évolution de la phase huile sous une autre forme que la partie eulérienne tout en incluant la coalescence. Enfin, on précise les étapes de la résolution complète du modèle eulérien-lagrangien.

5.1 MODÈLE EULÉRIEN D'ÉVOLUTION DE LA PHASE EAU

Comme on l'a vu dans le chapitre 2, l'évolution de la phase eau est décrite par les équations de Navier-Stokes suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_e = 0 \quad (5.1.1)$$

$$\rho_e \left(\frac{\partial \mathbf{U}_e}{\partial t} + \mathbf{U}_e \nabla \mathbf{U}_e \right) - \mu_e \Delta \mathbf{u}_e + \nabla \cdot \mathbf{R} + \nabla p_e = \mathbf{f} \quad (5.1.2)$$

+ modèle de turbulence

Pour la résolution de ce système d'équations, on peut utiliser plusieurs méthodes classiques afin d'obtenir la vitesse et la pression de la phase eau. Ce qui importe, c'est d'une part, la possibilité d'obtenir, en un point quelconque les valeurs \mathbf{U}_e et ϕ_h , nécessaires au fonctionnement du second modèle, et d'autre part, de supporter un champ scalaire du diamètre des particules d'huile. Notons que l'on suppose l'écoulement turbulent, on résout donc pour les variables moyennes \mathbf{U}_e , ϕ_h , $\langle k \rangle$ et $\langle \epsilon \rangle$. Les 2 dernières quantités provenant d'un modèle de turbulence.

5.2 MODÈLE EULÉRIEN D'ÉVOLUTION DE LA PHASE HUILE

La modélisation de l'évolution de la phase huile du mélange se fait à l'aide de l'équation de convection de la fraction volumique d'huile ϕ_h . Elle traduit le principe de conservation de la masse d'huile :

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h) = 0 \quad (5.2.1)$$

La solution de cette équation donne la fonction $\phi_h(x, y, t)$ qui représente la fraction volumique d'huile en tout point du domaine en fonction du temps.

Pour résoudre cette équation on utilise la méthode suivante inspirée de [23] :

- Discrétisation temporelle de l'équation par la méthode des différences finies
- Discrétisation spatiale de l'équation par la méthode des volumes finis

La méthode des différences finies consiste à approximer les dérivées par des formules aux différences. Il existe plusieurs formules d'approximation de la dérivée et nous allons utiliser la formule aux différences arrières suivante :

$$\frac{df(t+\Delta t)}{dt} \approx \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad (5.2.2)$$

Donc la discrétisation temporelle de l'équation consiste à approximer $\frac{\partial \phi_h^{n+1}}{\partial t}$ par $\frac{\phi_h^{n+1} - \phi_h^n}{\Delta t}$

La méthode des volumes finis consiste à :

- Partitionner le domaine en volumes finis
- Reformuler le problème continu sous forme d'un bilan volumique sur les volumes finis

- Résoudre le problème

Étape 1: Partition du domaine

On divise le domaine à l'aide d'une triangulation. La triangulation est une partition du domaine en plusieurs triangles T_i a priori tous différents.

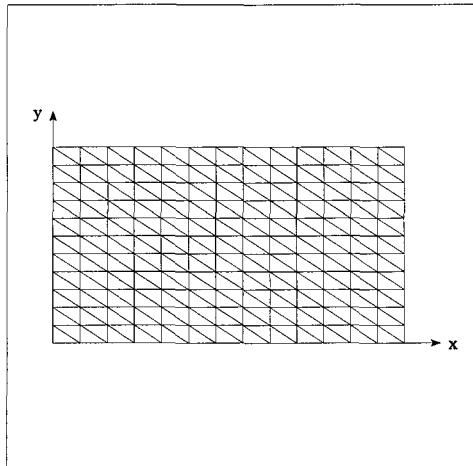


Figure 12 : Triangulation du domaine

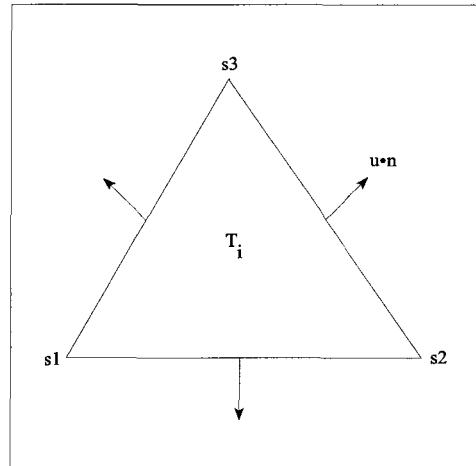


Figure 13 : Triangle de la triangulation

Sur un triangle T_i de la triangulation on suppose que la fraction volumique d'huile est constante.

Étape 2: Formulation variationnelle

On intègre l'équation de convection sur chaque triangle du domaine Ω en utilisant

implicitement les fonctions caractéristiques des triangles comme fonction teste.

$$\int_{T_i} \frac{\partial \phi_{T_i}}{\partial t} dT_i + \int_{T_i} \nabla \cdot (\phi_{T_i} \mathbf{u}_{T_i}) dT_i = 0 \quad (5.2.3)$$

En utilisant la formule de Stokes

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{f} dV \quad (5.2.4)$$

l'équation s'écrit sous une forme qui permet d'intégrer les conditions limites

$$\int_{T_i} \frac{\partial \phi_{T_i}}{\partial t} dT_i + \int_{\partial T_i} (\phi_{T_i} \mathbf{u}_{T_i}) \cdot \mathbf{n} dT_i = 0 \quad (5.2.5)$$

Cette équation peut être vue comme une formulation variationnelle de l'équation de convection où les fonctions tests sont les fonctions caractéristiques des triangles. La discrétisation de cette équation selon un schéma d'Euler donne

$$\int_{T_i} \frac{\phi_{T_i}^{n+1} - \phi_{T_i}^n}{\Delta t} dT_i + \int_{\partial T_i} (\phi_{T_i}^{n+1} \mathbf{u}_{T_i}^n) \cdot \mathbf{n} dT_i = 0 \quad (5.2.6)$$

$$|T_i| \phi_{T_i}^{n+1} - |T_i| \phi_{T_i}^n + \Delta t \phi_{T_i}^{n+1} \int_{\partial T_i} \mathbf{u}_{T_i}^n \cdot \mathbf{n} dT_i = 0 \quad (5.2.7)$$

où le terme $\phi_{T_i}^{n+1} \int_{\partial T_i} \mathbf{u}_{T_i}^n \cdot \mathbf{n} dT_i$ est donné par la somme des flux convectifs sur chaque arête

du triangle T_i . Le flux convectif sur une arête ij commune aux triangles i et j est donné par

$$\int_{ij} \phi \mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{n} \, ds = L_{ij} (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{n}) [\alpha_{ij} \phi_{T_i} + (1 - \alpha_{ij}) \phi_{T_j}] \quad (5.2.8)$$

où L_{ij} est la longueur de l'arête et $\alpha_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{ij} > 0, \\ 0 & \text{autrement,} \end{cases}$

Comme il y a nt triangles dans la triangulation, on obtient un système linéaire de nt équations à nt inconnues ($\phi_{T_i}^{n+1}$) à résoudre. Il est à noter que l'on doit calculer la vitesse \mathbf{U}_h de la phase huile puisque celle-ci intervient directement dans le système d'équations. On utilise le modèle suivant [22] présenté dans le chapitre 2 afin de calculer cette vitesse

$$\mathbf{U}_h = \mathbf{U}_e + \mathbf{U}_r$$

$$V_h (\rho_h - \rho_e) \mathbf{g} - \frac{1}{2} \rho_e C_d A_h \mathbf{U}_r \|\mathbf{U}_r\| = 0$$

Les particules sont assimilables à des sphères de rayon r , par conséquent on obtient

$$\mathbf{U}_r = \pm \sqrt{\frac{2(\rho_h - \rho_e)V_h \mathbf{g}}{c_d \rho_e A_h}} = \pm \sqrt{\frac{2(\rho_h - \rho_e) \frac{4\pi r^3}{3} \mathbf{g}}{c_d \rho_e \pi r^2}} = \pm \sqrt{\frac{8(\rho_h - \rho_e) r \mathbf{g}}{3 c_d \rho_e}}$$

5.3 MODÈLE LAGRANGIEN D'ÉVOLUTION DE LA PHASE HUILE (COLLECTION DE PARTICULES D'HUILE)

Les équations du mouvement des particules constituant la phase huile ont été discutées au chapitre 2 et sont données par :

$$\frac{dX}{dt} = v_p \quad (5.3.1)$$

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{u_e - v_p}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) g \quad (5.3.2)$$

$$du_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - \frac{u_e - U_e}{TL} dt + \sqrt{C_0 < \epsilon >} dW \quad (5.3.3)$$

Pour la résolution de ces équations, on utilise deux méthodes de résolution. Pour la première et la dernière équation on utilise un schéma d'Euler alors que pour la deuxième on se sert d'une solution analytique. La discréétisation des équations 5.3.1 et 5.3.3 selon le schéma d'Euler donne :

$$X^{n+1} = X^n + v_p^n \Delta t \quad (5.3.4)$$

$$u_e^{n+1} - u_e^n = - \frac{1}{\rho_h} \left(\frac{P_{e_x, \Delta x}^{n+1} - P_{e_x}^{n+1}}{\Delta x}, \frac{P_{e_y, \Delta y}^{n+1} - P_{e_y}^{n+1}}{\Delta y} \right) \Delta t$$

$$- \left(\frac{u_e^{n+1} - U_e^{n+1}}{TL} \right) \Delta t + \sqrt{C_0 < \epsilon >} (W^{n+1} - W^n) \quad (5.3.5)$$

Pour ce qui est de l'équation 5.3.2 on l'écrit sous la forme :

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = -\frac{\mathbf{v}_p}{\tau_p} + \left[\frac{\mathbf{u}_e}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) \mathbf{g} \right] \quad (5.3.6)$$

On suppose que \mathbf{u}_e et τ_p sont constants sur l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$. Par conséquent l'équation 5.3.6 s'écrit, sur ce même intervalle, sous la forme :

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = a \mathbf{v}_p + b \quad (5.3.7)$$

où a et b sont des constantes définies par :

$$a = -\frac{1}{\tau_p} \quad (5.3.8)$$

$$b = \frac{\mathbf{u}_e}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) \mathbf{g} \quad (5.3.9)$$

Dans ce cas, la solution analytique de l'équation 5.3.7 est :

$$\mathbf{v}_p(t) = \frac{K e^{at} - b}{a} \quad (5.3.10)$$

où K est une constante donnée par les conditions initiales. Pour trouver la valeur de K , on utilise la vitesse connue \mathbf{v}_p^n à t^n considéré comme le temps initial. On obtient alors la

relation suivante :

$$\mathbf{v}_p^n = \frac{K - b}{a} \quad (5.3.11)$$

$$K = a\mathbf{v}_p^n + b$$

Par conséquent, on obtient la vitesse \mathbf{v}_p^{n+1} , à un intervalle Δt du temps initial, par :

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \frac{K e^{a\Delta t} - b}{a} \quad (5.3.12)$$

Le système d'équations (5.3.4, 5.3.5 et 5.3.12) transporte et met à jour la vitesse des particules d'huile dans l'écoulement diphasique. Une fois le transport des particules d'huile effectué on met en oeuvre le modèle de coalescence dicté par l'algorithme détaillé au chapitre 3.

5.4 RÉSOLUTION GLOBALE DU MODÈLE

La résolution du modèle eulérien-lagrangien simplifié se fait par les étapes suivantes :

- 1) On associe une triangulation (pour le modèle eulérien) et une grille (pour le modèle lagrangien) au domaine
- 2) Sur la grille on représente l'ensemble des gouttelettes initiales de la phase huile par un échantillon de gouttelettes déterminé à l'aide d'une méthode de Monte Carlo.
Sur la triangulation, on représente la phase initiale d'huile par un champ scalaire de fraction volumique d'huile sur les triangles.
- 3) On calcule le diamètre moyen de l'échantillon des gouttelettes d'huile dans chacune des cases de la grille. (lagrangien)
- 4) On calcule la vitesse moyenne du fluide (\mathbf{U}_e) par la résolution des équations de Navier-Stokes. (eulérien)
- 5) On utilise le diamètre moyen des gouttelettes et la vitesse moyenne du fluide pour calculer la vitesse moyenne de l'huile. (eulérien)

- 6) On résout l'équation de convection de la fraction volumique d'huile en utilisant la vitesse moyenne de l'huile que l'on vient de calculer. (eulérien)

- 7) On fait évoluer l'ensemble des gouttelettes de l'échantillon par le modèle lagrangien (nouvelle position et vitesse). Cela revient à transporter $D(x,t)$.

- 8) On utilise l'algorithme de coalescence des particules d'huile afin de simuler ce phénomène. L'algorithme ajuste $D(x,t)$ pour que celui-ci considère la coalescence (lagrangien)

- 9) On retourne à l'étape 3.

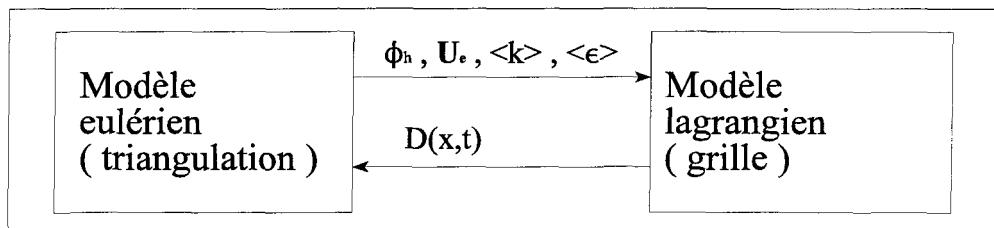


Figure 14 : Lien entre le modèle eulérien et le modèle lagrangien

Le modèle lagrangien résout le mouvement des particules et en tire une distribution de diamètre $D(x,t)$ qui est introduite dans le modèle eulérien qui à son tour résout l'écoulement donnant la distribution de la fraction volumique de l'huile $\phi_h(x,t)$.

CHAPITRE 6

EXPÉRIMENTATION NUMÉRIQUE

Ce chapitre est dédié à l'expérimentation numérique du modèle eulérien-lagrangien. On utilise le modèle pour simuler des expériences physiques afin de vérifier son efficacité. Dans un premier temps, on détaille les expériences réalisées (section 6.1). Ensuite, on expose le modèle de turbulence utilisé (section 6.2), puis on présente les résultats obtenus (section 6.3). Finalement, on discute les résultats numériques obtenus dans les expériences (section 6.4).

6.1 DESCRIPTION DES EXPÉRIENCES

Les expériences numériques consistent à simuler le comportement d'une émulsion huile-eau à l'intérieur d'une bouteille et d'un canal horizontal via le modèle eulérien-lagrangien de séparation qui tient compte de la coalescence des particules d'huile. Il est à noter que l'écoulement de l'eau est en régime établi et que le caractère transitoire du phénomène de la séparation vient de l'apport initial d'huile.

6.1.1 SÉPARATION D'UNE ÉMULSION DANS UNE BOUTEILLE

La première expérience consiste à produire un mélange huile-eau réparti uniformément dans une bouteille de verre et d'observer son évolution sous l'action de la gravité.

Pour y arriver, on remplit une bouteille en verre avec de l'eau et on y injecte une certaine quantité d'huile. Par la suite, on l'agitte afin d'obtenir une répartition initiale uniforme de l'huile. Ensuite, on laisse le mélange évoluer uniquement sous l'action de la gravité.

L'évolution du mélange se caractérise alors par une dissociation des phases d'huile et d'eau du mélange causée par une différence de densité. Cette expérience constitue le cas le plus simple d'un séparateur gravitationnel huile-eau. Notons cependant qu'il n'est pas possible d'éliminer complètement la convection issue du brassage.

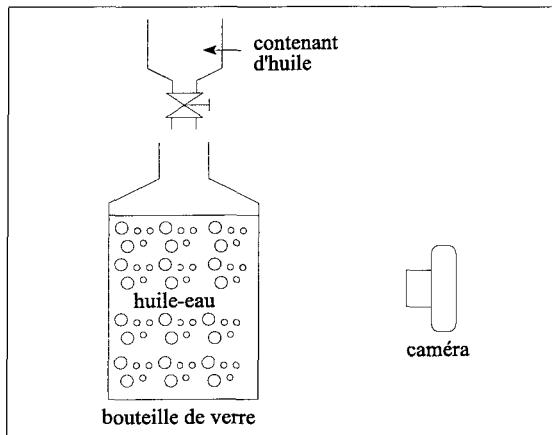


Figure 15 : Répartition initiale uniforme d'huile dans la bouteille de verre

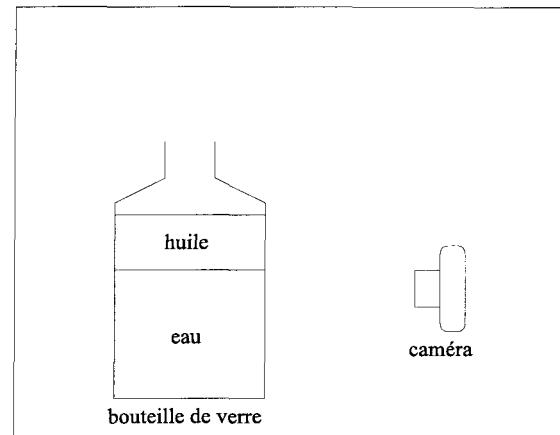
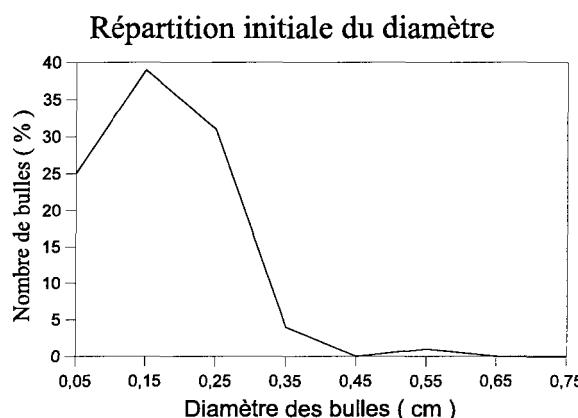


Figure 16 : Répartition finale d'huile dans la bouteille de verre

À des fins comparatives, les données initiales de simulations numériques, soit la répartition de la fraction volumique d'huile et la répartition du diamètre des bulles, sont choisies à partir de données obtenues lors d'une expérience semblable réalisée par le GRIPS [30]. Les données initiales de simulations numériques correspondantes aux données expérimentales sont :

- fraction volumique initiale d'huile ϕ_h de 0.36 partout de façon à avoir une quantité d'huile proche de l'expérience physique
- répartition uniforme du diamètre selon le graphique suivant (distribution initiale du diamètre dans l'expérience physique)



Les conditions frontières utilisées sont de type Dirichlet ($\phi_h = 0$) sur les parois sud, est et ouest de la bouteille. En ce qui concerne la paroi nord on utilise une condition de Neumann ($\frac{\partial \phi_h}{\partial n} = 0$). Comme la paroi nord est une sortie libre, on perd une quantité d'huile. Pour la récupérer on effectue une pondération sur la fraction volumique d'huile près de la paroi de sortie afin d'avoir la même quantité d'huile que celle initiale.

6.1.2 SÉPARATION D'UNE ÉMULSION DANS UN CANAL HORIZONTAL

Cette seconde expérience consiste à observer l'écoulement d'une quantité d'huile qui est injectée à l'intérieur d'un canal horizontal dans lequel passe de l'eau. L'huile est injectée selon une distribution initiale du diamètre des particules et de sa fraction volumique. Ensuite, on cesse l'apport d'huile afin d'observer l'évacuation de l'huile dans le canal. On utilise un profil de vitesse parabolique pour l'eau (voir figure 17).

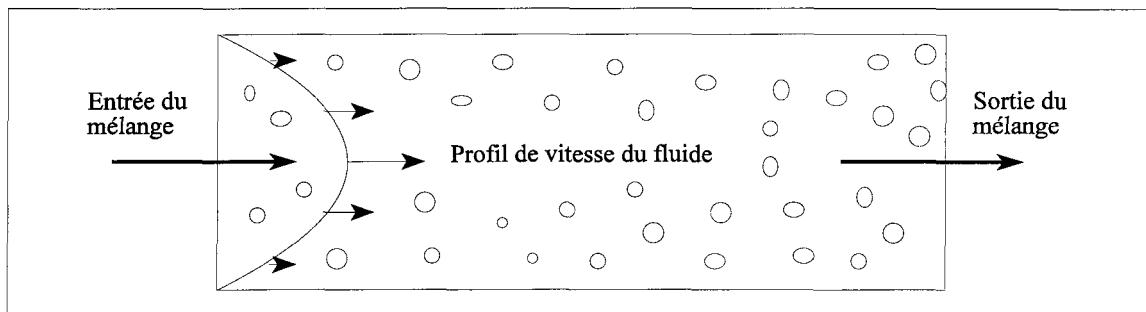


Figure 17 : Canal horizontal (distribution initiale)

Il est à noter que l'évolution du mélange huile-eau ne se fait pas uniquement par la force gravitationnelle comme c'est le cas de l'expérience de la bouteille. En effet, dans ce cas-ci le mélange évolue également en fonction du champ de vitesse parabolique du fluide porteur (eau).

Contrairement à la première expérience, il n'y a pas de comparaison avec les résultats d'une expérience physique similaire. Cette expérience a pour seul but de vérifier le comportement

du modèle lorsqu'il y a convection du fluide, dans notre cas l'eau. Par conséquent, les données initiales requises pour une simulation numérique sont choisies arbitrairement. On utilise donc les mêmes données initiales de simulations numériques que pour la première expérience, soit une répartition de la fraction volumique d'huile constante à 0.36 et la distribution du diamètre telle qu'illustrée en 6.1.1.

Les conditions frontières utilisées sont de type Dirichlet ($\phi_h = 0$) sur les parois nord, sud et ouest de la bouteille. En ce qui concerne la paroi est on utilise une condition de Neumann ($\frac{\partial \phi_h}{\partial \mathbf{n}} = 0$).

6.2 MODÈLE DE TURBULENCE

Le modèle eulérien-lagrangien complet (chap. 4) nécessite un modèle de turbulence. En effet, pour résoudre l'équation suivante :

$$d\mathbf{u}_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - \frac{\mathbf{u}_e - \mathbf{U}_e}{TL} dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW \quad (6.2.1)$$

il est essentiel d'utiliser un modèle de turbulence qui fournit les quantités TL, C_0 , $\langle \epsilon \rangle$ et P_e . Toutefois, l'élaboration d'un modèle précis de turbulence n'est pas notre priorité, par conséquent on utilisera une relation simple afin de modéliser la turbulence.

L'idée est de modifier l'équation 6.2.1 et d'utiliser un modèle simple de turbulence. Le modèle choisit a l'avantage d'introduire un seul paramètre lié à la turbulence. Il permettra de caractériser facilement l'impact du niveau de turbulence sur la séparation et la coalescence. Dans un premier temps, l'équation 6.2.1 peut être simplifiée, sous l'hypothèse $TL \ll \tau_p$ (voir section 3.3), par :

$$\mathbf{u}_e dt = \mathbf{U}_e dt - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt TL + TL \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW \quad (6.2.2)$$

Par la suite, on néglige l'effet des fluctuations de pression dans la reconstruction du champ instantané \mathbf{u}_e et on utilise un modèle de turbulence implicitement défini par la relation $TL \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} = \alpha \tau_p$ où α est un paramètre qui caractérise l'effet de la turbulence. Cette relation, cohérente avec l'hypothèse $TL \ll \tau_p$, modélise la turbulence et permet d'obtenir l'équation 6.2.1 sous la forme :

$$\mathbf{u}_e dt = \mathbf{U}_e dt + \alpha \tau_p dW \quad (6.2.3)$$

Le paramètre α étant relié au niveau de turbulence. Par conséquent, il offre la possibilité d'étudier l'effet de la turbulence sur la coalescence, et plus généralement sur la séparation, via un seul paramètre. C'est l'équation 6.2.3 que l'on utilisera lors des simulations numériques plutôt que 6.2.1. Il est à noter que ceci revient à approximer la vitesse du fluide par une fluctuation (dispersion turbulente) de sa valeur moyenne.

Il est pertinent de noter que dans l'état actuel des connaissances il existe plusieurs modèles mathématiques pour décrire la turbulence, et nécessairement, certains sont plus représentatifs que d'autres dans une situation donnée. Le modèle utilisé dans notre étude n'a pas d'autres prétentions que de servir d'illustration.

6.3 RÉSULTATS DES EXPÉRIENCES

6.3.1 EXPÉRIENCE DE LA BOUTEILLE

La résolution du modèle eulérien-lagrangien simplifié fournit l'évolution de la fraction volumique d'huile. À l'aide de cette donnée et de la distribution du diamètre des bulles d'huiles on a la répartition d'huile dans la bouteille. L'expérience de la bouteille donne les résultats suivants :

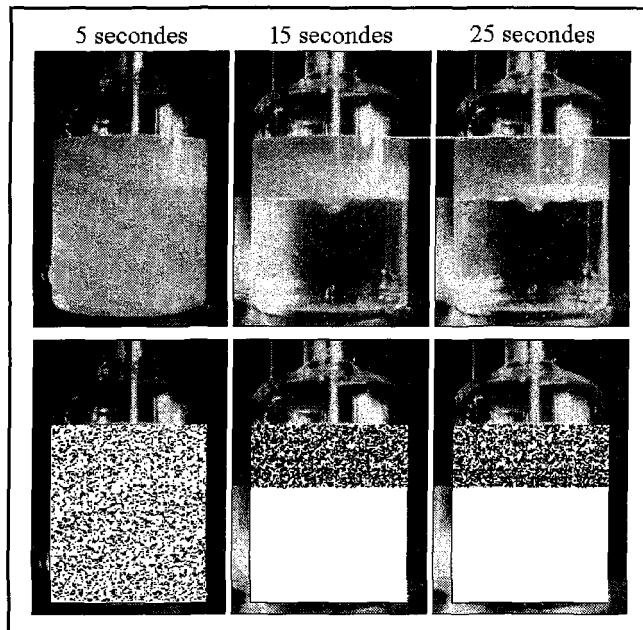


Figure 18 : Évolution de la distribution d'huile dans la bouteille (réalité vs modèle)

Dans cette expérience, on a injecté progressivement de l'huile, à un taux de 7.2 litres/min , jusqu'à obtenir 16.8 litres d'huile. Cette figure compare l'évolution de la distribution d'huile à l'intérieur de la bouteille obtenue à l'aide du modèle eulérien-lagrangien (bas de la figure 18) avec ceux obtenus par une expérimentation physique (haut de la figure 18) réalisée par le GRIPS [30]. Le modèle eulérien fournit la distribution de la fraction volumique dans la bouteille.

La distribution du diamètre des particules est utilisée pour représenter la phase huile

avec des bulles de taille appropriée dans la figure 18. C'est la partie lagrangienne du modèle qui fournit cette distribution. La distribution du diamètre obtenue est :

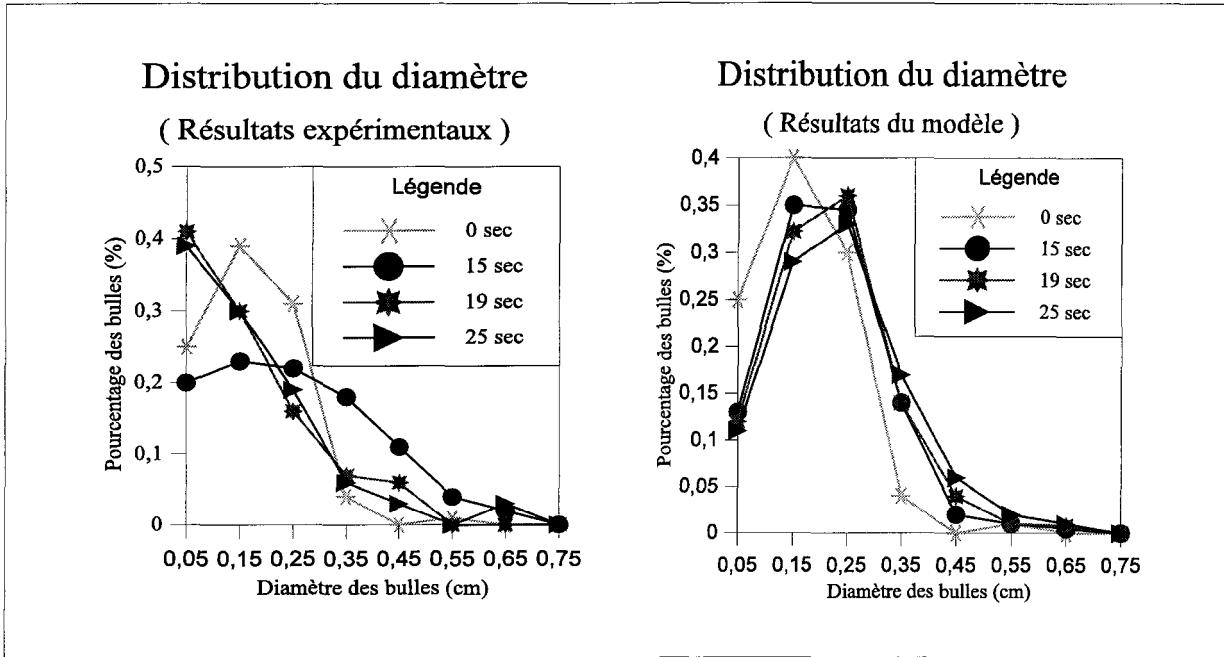


Figure 19 : Évolution de la distribution du diamètre des bulles d'huile dans le haut de la bouteille (expérimentales et estimées par le modèle)

La figure 19 compare la distribution du diamètre des particules se trouvant dans le haut de la bouteille, fournie par le modèle lagrangien avec celle obtenue par l'expériences physiques réalisées par le GRIPS.

6.3.2 EXPÉRIENCE DU CANAL

Pour les besoins de notre travail, nous avons réalisé une seconde expérience, celle du canal. Celle-ci permet de vérifier le comportement du modèle lorsqu'il y a convection du fluide, ce qui n'est pas le cas dans la première expérience. Le modèle eulérien-lagrangien nous a donné l'évolution suivante de l'huile dans le canal :

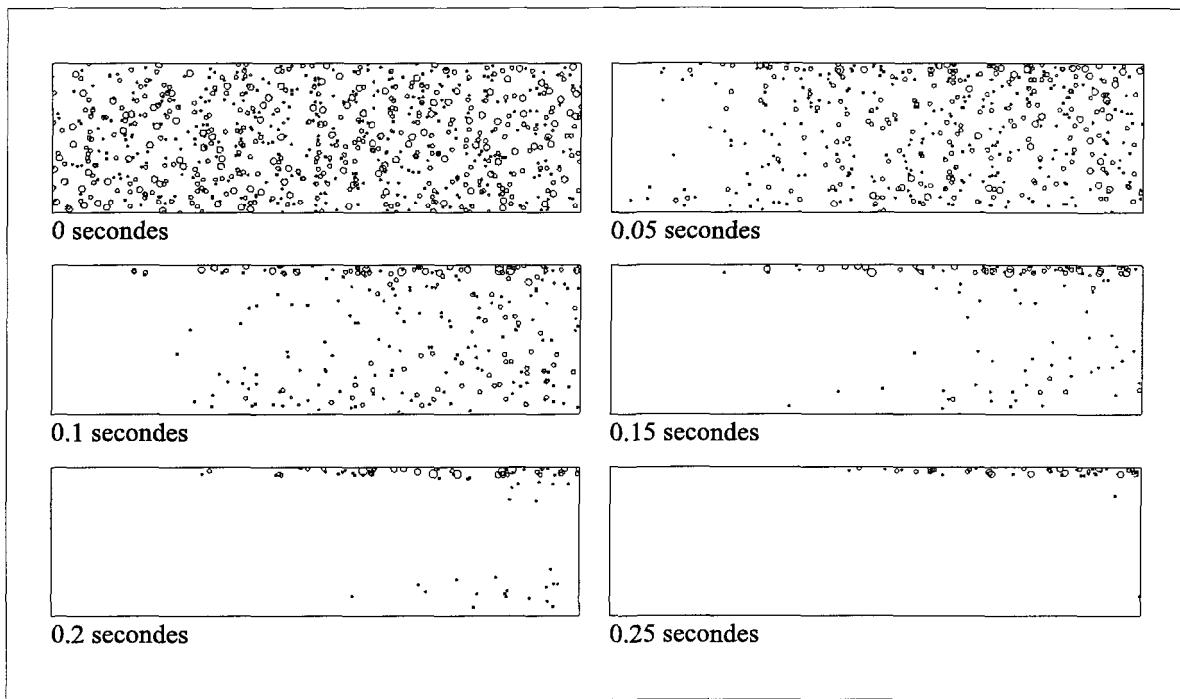


Figure 20 : Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha = 0$)

Cette figure illustre le comportement d'une quantité d'huile injectée dans un écoulement d'eau passant dans un canal. L'huile est injectée selon une distribution initiale du diamètre et de la fraction volumique et l'apport d'huile a cessé instantanément pour ensuite voir

comment la phase huile présente dans le canal s'est évacuée. La taille des cercles représentant la taille des bulles est obtenue par la distribution du diamètre $D(x,t)$, via la partie lagrangienne. En ce qui concerne la densité des cercles, elle est fournie par la fraction volumique d'huile, via la partie eulérienne.

De plus, afin d'étudier l'effet de α , paramètre présent dans le modèle simple de turbulence, sur l'écoulement, on a effectué cette expérience pour diverses valeurs de α (0, 0.001, 0.01, 0.1). On a obtenu les résultats suivants :

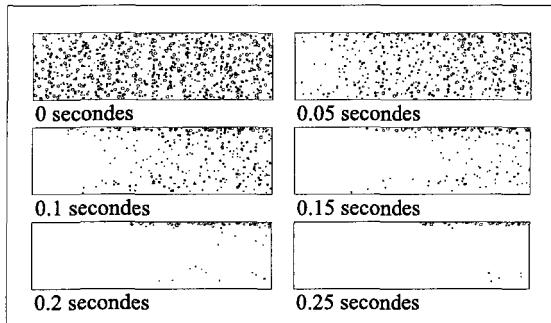


Figure 21 : Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha = 0$)

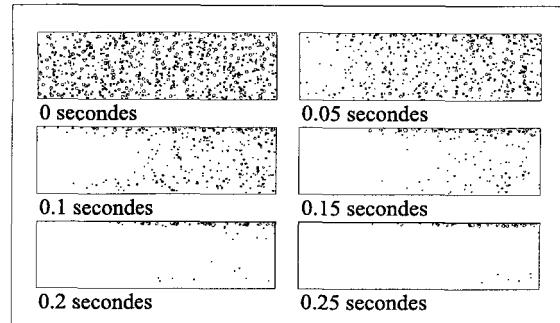


Figure 22 : Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha = 0.001$)

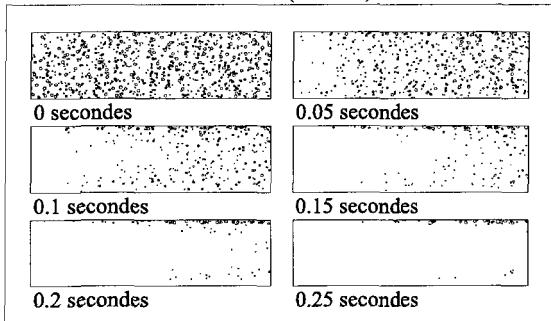


Figure 23 : Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha = 0.01$)

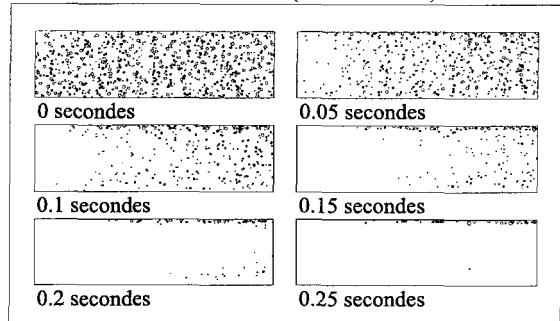


Figure 24 : Évolution de la distribution d'huile dans le canal ($\alpha = 0.1$)

Les 4 figures ci-haut illustrent l'écoulement avec diverses valeurs de α . On observe que l'évolution de la masse d'huile dans le canal est influencée par la turbulence, via le paramètre α . La figure suivante montre cette influence

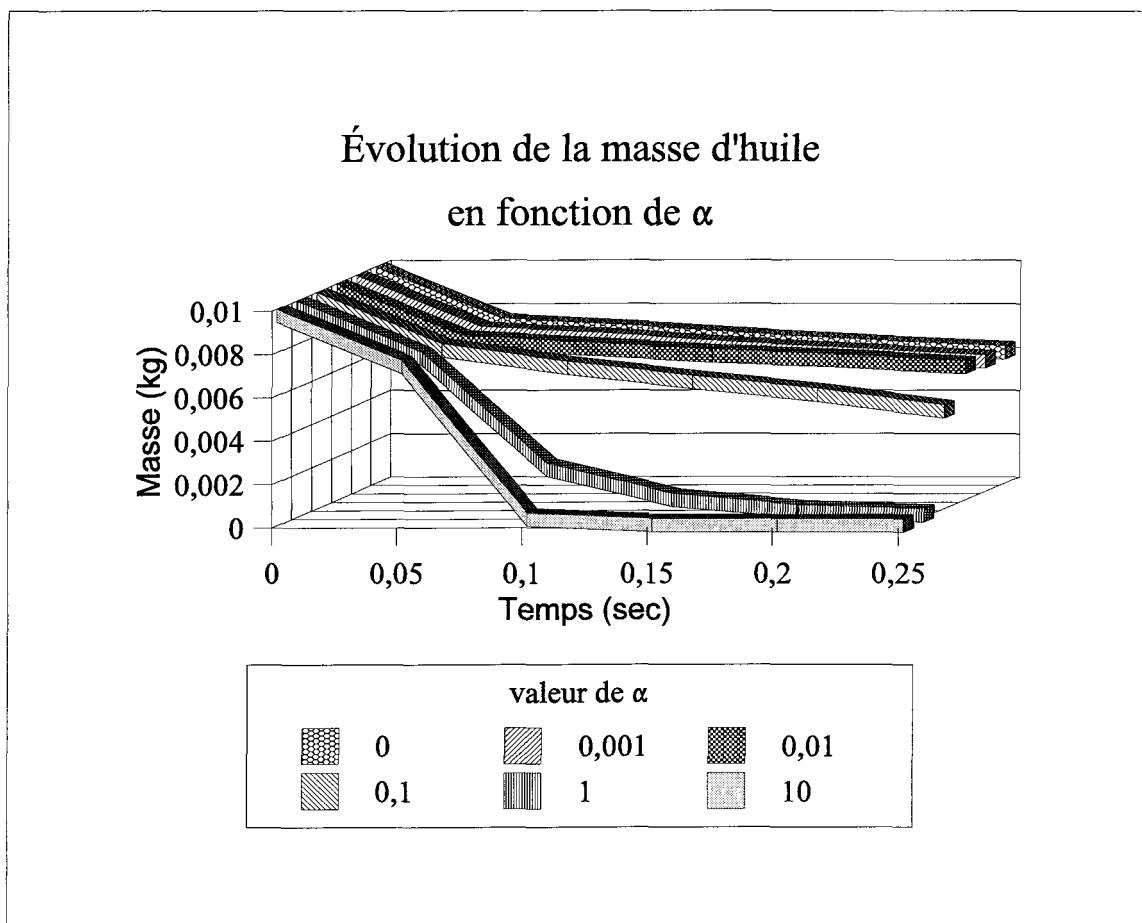


Figure 25 : Évolution de la masse d'huile à l'intérieur du canal pour divers α

On observe facilement que l'évolution de la masse d'huile dans le canal est influencée de manière significative par la turbulence. L'interprétation de cette figure, et de tous les autres résultats, est le but de la section suivante.

6.4 INTERPRÉTATION DES RÉSULTATS

Le but des expériences, en particulier celle de la bouteille, est de vérifier dans quel mesure le modèle eulérien-lagrangien reproduit fidèlement des situations réelles. À partir des résultats que l'on a obtenus, on voit que le modèle reproduit assez bien les situations réelles que l'on a étudiées. En effet, l'évolution de la répartition d'huile à l'intérieur de la bouteille donnée par le modèle reproduit bien ce qui se passe en réalité (voir figure 19). Pour ce qui est de la distribution du diamètre des particules dans le haut de la bouteille, elle ne concorde pas tout à fait. Néanmoins, on remarque que les deux graphiques (figure 20) ont des similitudes. En effet, dans les deux cas on observe que le nombre de petites bulles diminue avec le temps au profit des plus grosses bulles. Ceci est dû, entre autres, au phénomène de coalescence qui agglomère les petites bulles pour en former de plus grosses. On peut expliquer l'écart entre le modèle et les données expérimentales par les facteurs suivants :

- le calcul des distributions du diamètre basé sur les données expérimentales a été fait manuellement à partir de photos prises par des caméras
- la précision des caméras utilisées ne permet pas de détecter les très petites bulles
- le modèle suppose qu'il n'y a pas de convection du fluide (eau). Or, ce n'est pas le cas puisque dans l'expérience physique on agite la bouteille afin d'obtenir une répartition initiale uniforme de l'huile. Cette agitation induit une vitesse initiale non nulle sur le fluide.

Toutefois, cet écart est atténué puisque la distribution de diamètre est utilisée uniquement pour le calcul du diamètre moyen et au niveau du diamètre moyen les 2 courbes donnent des valeurs plus proches (voir la figure 27).

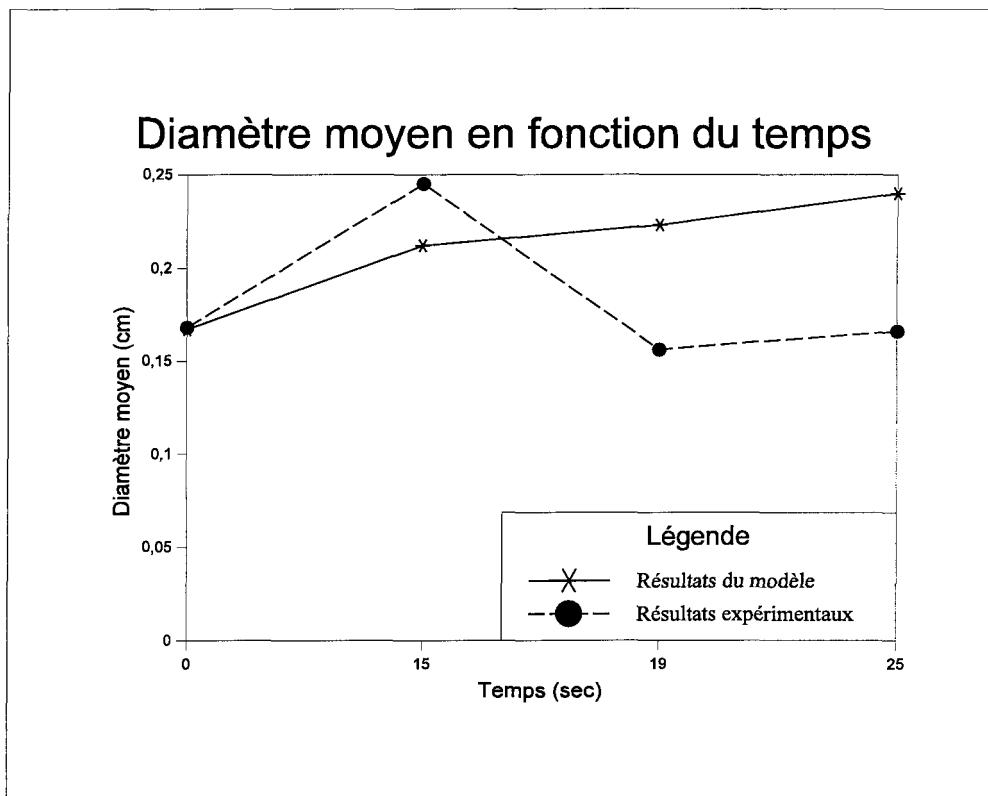


Figure 26 : Diamètre moyen dans le temps (expérimental vs modèle)

Cette figure montre l'évolution, expérimentale vs modèle, du diamètre moyen dans le haut de la bouteille. On peut expliquer l'écart, entre le diamètre moyen expérimental et celui obtenu par le modèle, par les mêmes facteurs responsables de la différence entre les distributions de diamètre.

En ce qui concerne la simulation du canal, on ne peut pas comparer nos résultats car on ne possède aucune donnée sur une expérience de ce genre. Le principal intérêt de celle-ci est de voir si le modèle reproduit qualitativement l'évolution d'huile qui convecte dans un fluide en mouvement. On remarque que les bulles qui sont dans le haut du canal restent plus longtemps car elles sont moins entraînées par le fluide.

L'effet de la turbulence via le paramètre α est montré par l'expérience du canal réalisé avec diverses valeurs (figures 21-25). On remarque que plus α est élevé, plus les bulles quittent rapidement le canal. En effet, plus α est grand, c'est-à-dire plus il y a de turbulence, plus les fluctuations de vitesse des particules sont importantes. Dans ce contexte, la turbulence permet d'obtenir des fluctuations importantes de vitesse ce qui accélère la sortie des particules. Finalement, on observe que la turbulence empêche une agglomération importante de particules sur les parois du canal, en les décollant des parois et en les remettant en circulation dans le fluide.

Il est pertinent de noter que la turbulence augmente les collisions d'où on peut améliorer la représentativité du modèle de coalescence en posant $c = c(\alpha)$ (section 3.4).

CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce mémoire, un modèle eulérien-lagrangien de séparation d'une émulsion huile-eau, tenant compte de la coalescence des particules d'huile en suspension dans l'eau. Les résultats d'expérimentations numériques et physiques ont permis de vérifier l'efficacité du modèle à prédire le comportement réel d'un séparateur gravitationnel. La comparaison entre les résultats expérimentaux et les prédictions obtenues au moyen de notre modèle eulérien-lagrangien de séparation, révèle une bonne concordance.

Les séparateurs gravitationnels huile-eau sont utilisés, entre autres, pour la décontamination de l'eau polluée par l'huile. Il est important de bien séparer l'eau de l'huile avant son rejet dans l'environnement. Dans ce contexte, il existe des normes environnementales de plus en plus sévères. Il est donc essentiel d'améliorer les modèles de séparation afin de respecter les normes. On y arrive en partie en considérant la coalescence. Par conséquent, le modèle obtenu pourrait permettre de mieux modéliser le comportement des séparateurs gravitationnels.

De plus, notre travail a mis en évidence la possibilité d'introduire la coalescence dans un modèle eulérien, a priori quelconque, par l'ajout d'un modèle lagrangien permettant de considérer ce phénomène.

BIBLIOGRAPHIE

1. H. Risken, *The Fokker-Planck equation*, Springer-Verlag, 1988.
2. C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*, Springer-Verlag, 1990.
3. P.J. Hill, Ka M. Ng, "New discretization procedure for the agglomeration equation", *AICHE Journal*, **42** (3), 1996.
4. S.B. Pope, "Lagrangian PDF methods for turbulent flows", *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **26**, 1994.
5. S.B. Pope, "PDF methods for turbulent reactive flows", *Prog. Energy Combust. Sci.*, **11**, 1985.
6. J.P. Minier, J. Pozorski, "Derivation of a PDF model for turbulent flows based on principles from statistical physics", *Physics of Fluids*, **9**, 1997.
7. G. Martin, M. Leclerc, "Implantation en éléments finis 2D d'une méthode de discréétisation lagrangienne de l'équation de transport-diffusion en milieu pluvial", communication personnelle, 1993.
8. A.Z. Zinchenko, R.H. Davis, "Gravity-induced coalescence of drops at arbitrary Péclet numbers", *J. Fluid Mech.*, **280**, 1994.
9. H. Wang, A.Z. Zinchenko, R.H. Davis, "The collision rate of small drops in linear flow fields", *J. Fluid Mech.*, **265**, 1994.
10. Y.G. Wang, C.S. Wen, "The effect of weak gravitational force on Brownian

- coagulation of small particles", *J. Fluid Mech.*, **214**, 1990.
11. R.H. Davis, "The rate of coagulation of a dilute polydisperse system of sedimenting spheres", *J. Fluid Mech.*, **145**, 1984.
 12. D.L. Feke, W.R. Schowalter, "The effect of Brownian diffusion on shear-induced coagulation of colloidal dispersions", *J. Fluid Mech.*, **133**, 1983.
 13. X. Zhang, R.H. Davis, "The rate of collisions due to Brownian or gravitational motion of small drops", *J. Fluid Mech.*, **230**, 1991.
 14. P.D. Martin, S. Hartland, "Design of simple gravity settlers for the coalescence of liquid-liquid dispersions", *SPS Design Report*, 1984.
 15. A.Z. Zinchenko, "Calculations of the effectiveness of gravitational coagulation of drops with allowance for internal circulation", *Prikl. Mat. Mech.*, **46**, 1982.
 16. O. Simonin, E. Deutsch, J.P. Minier, "Eulerian prediction of the fluid/particle correlated motion in turbulent two-phase flows", *Applied Scientific Research*, **51** (275), 1993.
 17. O. Simonin, E. Deutsch, M. Boivin, "Large eddy simulation and second-moment closure model of particle fluctuating motion in two-phase turbulent shear flows", *Selected Papers from the Ninth Int. Symp. on Turbulent Shear Flows*, Springer-Verlag, 1995.
 18. O. Simonin, "Continuum modeling of dispersed two-phase flows", *Combustion and Turbulence in Two-Phase Flows*, 1996.
 19. S.B. Pope, "On the relation between stochastic Lagrangian models of turbulence and second-moment closures", *Phys. Fluids*, **6** (2), 1994.
 20. L. Arnold, *Stochastic differential equations: theory and applications*, Wiley, 1974.

21. J. Pozorski, J.P. Minier, "Lagrangian modelling of turbulent flows", *Rep. No. HE-44/94.016*, Électricité de France, Chatou, 1994.
22. P.L Viollet, O. Simonin, *Aérodynamique de la combustion*, École Nationale des Ponts et Chaussées, 1993.
23. S. Boivin, J.M. Herard, "Un schéma du type volumes finis pour résoudre les équations de Navier-Stokes sur une triangulation.", *Revue européenne des éléments finis*, **5**, 461-490, Hermès, 1996.
24. S. Boivin, *Mefoo: un framework C++ pour la mise en oeuvre de la méthode des éléments finis*, Rapport EDF, *HE-41/96/004/A*, Electricité de France, 1996.
25. R. Gatignol, "The faxen formulae for a rigid particle in an unsteady non-uniform Stokes flow.", *Journal de Mécanique théorique et appliquée*, **1**, 1983.
26. S. Boivin, J.M. Herard, *Modèle bi-fluide pour la simulation numérique d'écoulements diphasiques à deux phases incompressibles*, à paraître.
27. J. Laviéville, E. Deutsch, O. Simonin, "Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field", Électricité de France, Chatou, 1995.
28. M. Ouraou, J.P. Minier, "Modélisation lagrangienne des écoulements diphasiques", *Rep. No. HE-44/95/031*, Électricité de France, Chatou, 1995.
29. Minier, Pozorski, "Analysis of existing lagrangian models and new propositions for particle dispersion in homogeneous stationary turbulence", Rapport EDF, *Rep. No. HE-44/92.29*, 1992.
30. L. I. Kiss, R. T. Bui, J. Tremblay, H. Dierksheide, "Experimental study of separation processes in oil-water systems", *Rep. No. GRIPS-53*, 1995.
31. L. I. Kiss, Document interne UQAC, 1995.

ANNEXE 1

ÉQUATION DE CONVECTION DE LA FRACTION VOLUMIQUE D'HUILE

Soit Ω le domaine (voir figure A1.1) et O un volume élémentaire (voir figure A1.2) dans le domaine. \mathbf{u}_h est la vitesse des particules d'huile et \mathbf{g} est le champ gravitationnel.

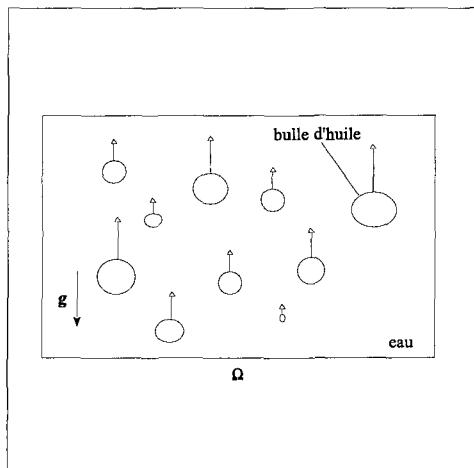


Figure A1.1 : Visualisation du domaine

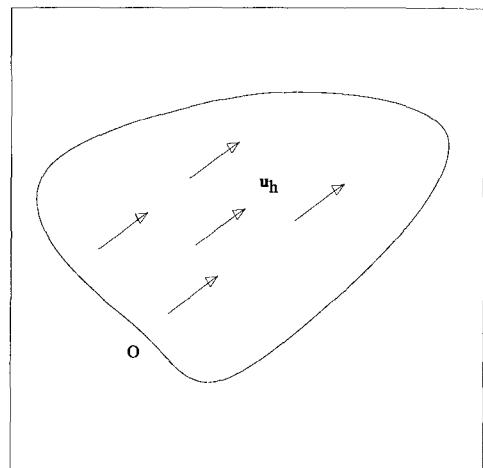


Figure A1.2 : Volume élémentaire de contrôle

Dans ce contexte, l'équation de base du modèle est obtenue en appliquant le principe de conservation de la masse.

Ainsi, le bilan de la masse de d'huile dans O est donné par $\frac{\partial}{\partial t} \int_O \rho \, dV$

La masse d'huile évolue dans le temps en fonction de ce qui entre et sort du volume de contrôle O par convection

- par convection (déplacement des particules selon \mathbf{u}_h) le taux de changement de la masse est donné par : $-\int_{\partial O} \rho \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} \, d\gamma$

Donc on a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_O \rho \, dV = - \int_{\partial O} \rho \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} \, d\gamma \quad (1)$$

en utilisant la formule de Stokes $\int_{\partial O} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_O \nabla \cdot \mathbf{f} \, dV$ on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_O \rho \, dV = - \int_O \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_h) \, dV \quad (2)$$

Le fait que O soit quelconque nous permet d'écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_h) = 0 \quad (3)$$

qui est l'équation de convection pour la densité d'huile ρ .

On construit le modèle sur la base de la conservation de la masse de d'huile dans un

volume de contrôle $O \subset \Omega$. Dans un volume de contrôle $\rho = \rho_h \phi_h$.

L'équation de convection devient :

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_h \mathbf{u}_h) = 0 \quad (4)$$

ANNEXE 2

INTRODUCTION AUX MODÈLES STOCHASTIQUES POUR LES FLUIDES

Processus stochastique : processus aléatoire qui dépend du temps. On note x_1, x_2, \dots une caractéristique du processus mesurée au temps t_1, t_2, \dots . Les valeurs x_i sont des réalisations d'une variable aléatoire stochastique $X(t)$. La distribution de probabilité conjointe des événements (x_i, t_i) est $p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots)$ et décrit entièrement le processus.

Soient $t_1, t_2, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots$ des temps satisfaisant $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots$. L'équation des probabilités conditionnelles s'écrit

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots) = p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots) \cdot p(y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots)^{-1}$$

Si tous les événements sont indépendants, on a

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots) = p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots)$$

d'où

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; y_1, \tau_1; y_2, \tau_2; \dots) = \prod_i (p(x_i, t_i) \bullet p(y_i, \tau_i))$$

Processus markovien : processus stochastique dont la probabilité conditionnelle est entièrement déterminée par l'état le plus récent, c'est-à-dire

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1; y_2, \tau_2; \dots) = p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1)$$

En combinant l'hypothèse de Markov avec l'équation des probabilités conditionnelles, on obtient

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \bullet p(x_2, t_2 | x_3, t_3) \bullet \dots \bullet p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) \bullet p(x_n, t_n)$$

Un processus markovien est dit continu si

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|x - z| > 0} \frac{p(x, t + \Delta t | z, t)}{\Delta t} dx = 0$$

uniformément en z , t et Δt . Cela signifie que la probabilité que la position finale x soit significativement différente de z tend vers 0 plus rapidement que Δt , lorsque Δt tend vers 0.

Notons que la consistance implique que pour tout processus stochastique

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p(x, t + \Delta t | z, t) = \delta(x - z)$$

Équation de Chapman-Kolmogorov :

Rappelons que si $\bigcup_i B_i$ est l'espace complet et tel que $\{B_i\}$ soit une partition de cet espace on a

$$\sum_i p(A \cap B_i) = p(\bigcup_i (A \cap B_i)) = p(A \cap (\bigcup_i B_i)) = p(A)$$

c'est-à-dire

$$\sum_i p(A \cap B_i) = \sum_i p(A | B_i) p(B_i) = p(A)$$

Ainsi, on vérifie que pour tout processus stochastique

$$p(x_1, t_1) = \int p(x_1, t_1; x_2, t_2) dx_2 = \int p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \cdot p(x_2, t_2) dx_2$$

et pour une probabilité conditionnelle

$$p(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \int p(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2 = \int p(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3) \cdot p(x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2$$

Or si le processus est markovien on a

$$p(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3) = p(x_1, t_1 | x_2, t_2)$$

d'où l'on a

$$p(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \int p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \cdot p(x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2$$

qui est l'équation de Chapman-Kolmogorov.

Forme différentielle de l'équation de Chapman-Kolmogorov :

Supposons que pour tout $\epsilon > 0$ l'on a

$$\text{i)} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p(x, t + \Delta t | z, t)}{\Delta t} dx = W(x | z, t)$$

$$\text{ii)} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|x - z| < \epsilon} (x_i - z_i) \frac{p(x, t + \Delta t | z, t)}{\Delta t} dx = A_i(z, t) + O(\epsilon)$$

$$\text{iii)} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|x - z| < \epsilon} (x_i - z_i)(x_j - z_j) \frac{p(x, t + \Delta t | z, t)}{\Delta t} dx = B_{ij}(z, t) + O(\epsilon)$$

avec convergence uniforme. Notons que pour un processus continu, $W(x | z, t)$ est 0 presque

partout sauf peut-être en un ensemble de points discrets.

Sous les hypothèses i et iii, tous les termes d'ordre supérieur nuls.

Soit $f(z)$ une fonction deux fois continûment différentiable. On s'intéresse à l'évolution temporelle de son espérance :

$$E(f) = \int f(x) p(x, t | y, \tau) dx$$

On a

$$\frac{\partial E(f)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int f(x) \left(\frac{p(x, t + \Delta t | y, \tau) - p(x, t | y, \tau)}{\Delta t} \right) dx$$

or de l'équation de Chapman-Kolmogorov $p(x, t + \Delta t | y, \tau) = \int p(x, t + \Delta t | z, t) \cdot p(z, t | y, \tau) dz$

on trouve

$$\frac{\partial E(f)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int f(x) \left(\int p(x, t + \Delta t | z, t) \cdot p(z, t | y, \tau) dz \right) dx - \int f(z) p(z, t | y, \tau) dz \right]$$

On divise l'intégrale selon x en deux parties : la boucle ouvert $|x - z| < \epsilon$, et le complément $|x - z| \geq \epsilon$. Puisque f est deux fois continûment différentiable, on a sur la partie $|x - z| < \epsilon$:

$$f(x) = f(z) + \sum_i \frac{\partial f(z)}{\partial z_i} (x_i - z_i) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z)}{\partial x_i \partial x_j} (x_i - z_i)(x_j - z_j) + |x - z|^3 R(x, z)$$

avec $|R(x, z)| \rightarrow 0$ lorsque $|x - z| \rightarrow 0$.

En remplaçant dans l'équation d'évolution de $E(f)$ et en utilisant les hypothèses i et iii, on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(f)}{\partial t} &= \int \left[\sum_i A_i(z, t) \frac{\partial f(z)}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(z, t) \frac{\partial^2 f(z)}{\partial x_i \partial x_j} \right] p(z, t | y, \tau) dz \\ &+ \int f(z) \left[\int (w(z, t | x, t) \cdot p(x, t | y, \tau) - w(x, t | z, t) \cdot p(z, t | y, \tau)) dx \right] dz \end{aligned}$$

$$\text{où } \int F(x, z) dx \triangleq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{|x-z|>\epsilon} F(x, z) dx$$

car la fonction $w(x, t | z, t)$ peut tendre vers ∞ lorsque $|x - z| \rightarrow 0$, (c'est un cas rare, on remplace $\int \rightarrow \int$. Supposons que le processus est confiné à une région R de l'espace où $A_i \in C^1(\overset{\circ}{R})$ et $B_{ij} \in C^2(\overset{\circ}{R})$. Si on intègre par partie, on trouve

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(f)}{\partial t} &= \int f(z) \left[- \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} (A_i(z, t) \cdot p(z, t | y, \tau)) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} (B_{ij}(z, t) \cdot p(z, t | y, \tau)) + \right. \\ &\quad \left. \int (w(z, t | x, t) \cdot p(x, t | y, \tau) - w(x, t | z, t) \cdot p(z, t | y, \tau)) dx \right] dz + \text{termes de surface} \end{aligned}$$

Si $f(z)$ est une fonction arbitraire, mais non nulle dans $\overset{\circ}{R}$ seulement, on doit avoir

$$\frac{\partial p(z,t | y,\tau)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z,t) \cdot p(z,t | y,\tau)] + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z,t) \cdot p(z,t | y,\tau)] + \int [w(z,t | x,t) \cdot p(x,t | y,\tau) - w(x,t | z,t) \cdot p(z,t | y,\tau)] dx$$

Notons que tous les termes de surface disparaissent car $f(z)$ est nulle sur la surface de R . La condition initiale est $p(z,t | y,t) = \delta(y - z)$. Dans le cas d'un processus continu, $w(z,t | x,t) = 0$, et l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov porte alors le nom d'équation de Fokker-Planck.

Interprétation de l'équation de Fokker-Planck :

Si $w(z,t | x,t)$ est nul, l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov se réduit à l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial p(z,t | y,\tau)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z,t) \cdot p(z,t | y,\tau)] + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z,t) \cdot p(z,t | y,\tau)]$$

qui régit un processus de diffusion. $A(z,t)$ étant le vecteur de convection, et $B(z,t)$ la matrice

de diffusion. Notons que si $B=0$, l'équation de Fokker-Planck décrit un processus déterministe dont la solution est

$$\frac{dx(t)}{dt} = A[x(t), t] \quad \text{avec } x(y, \tau) = y$$

donc pour une condition initiale $p(z, t | y, \tau) = \delta(y - z)$ la solution est

$p(z, t | y, \tau) = \delta(z - x(y, \tau))$. L'équation de Fokker-Planck s'appelle alors équation de Liouville.

Revenons au cas général d'une équation de Fokker-Planck. Si Δt est petit, les dérivées de A_i et B_{ij} sont petites par rapport à celle de p car initialement p est une fonction de Dirac (i.e. un pic), l'équation de Fokker-Planck s'écrit alors

$$\frac{\partial p(z, t | y, \tau)}{\partial t} = - \sum_i A_i(y, t) \frac{\partial p(z, t | y, \tau)}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(y, t) \frac{\partial^2 p(z, t | y, \tau)}{\partial z_i \partial z_j}$$

dont la solution est

$$p(z, t + \Delta t | y, t) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\det B(y, t))^{\frac{1}{2}} (\Delta t)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\Delta t} ((z - y - A(y, t)\Delta t)^T B(y, t)^{-1} (z - y - A(y, t)\Delta t))}$$

qui est une distribution Gaussienne avec $y + A(y, t) \Delta t$ comme moyenne et $B(y, t) \Delta t$ comme matrice de variance. Ainsi, l'équation d'évolution de la position y est :

$$y(t + \Delta t) = y(t) + A(y(t), t)\Delta t + \eta(t)\sqrt{\Delta t} \quad (*)$$

où $\langle \eta(t) \rangle = 0$, $\langle \eta(t) \eta(t)^t \rangle = B(y, t)$, $A(y(t), t)$ Δt est un terme de convection et $\eta(t)\sqrt{\Delta t}$ représente la dispersion turbulente.

Dans le chapitre 3, on utilise une équation (3.1.1) similaire à celle-ci afin de représenter l'évolution de la position des particules. En effet, l'équation 3.1.1, soit $\frac{dX}{dt} = v_p$ peut être vue sous la forme suivante :

$$X(t + \Delta t) = X(t) + v_p \Delta t$$

On peut considérer cette équation comme l'équation (*) où la convection et la dispersion turbulente sont considérées uniquement au travers de la vitesse v_p par les équations (3.2.5 et 3.3.1) suivantes :

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{u_e - v_p}{\tau_p} + \left(\frac{\rho_h - \rho_e}{\rho_h} \right) g$$

$$du_e = - \frac{1}{\rho_h} \nabla P_e dt - \frac{u_e - U_e}{TL} dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} dW$$

La dispersion turbulente est considérée au travers d'un processus de Wiener W .