

# Modélisation et simulations numériques des instabilités et du transfert de masse aux interfaces dans le procédé de mélange par résonance acoustique

Post-doctorat d'une durée de 2 ans, I2M Bordeaux, à compter de janvier 2024

## Contexte

De nombreux secteurs industriels, comme les secteurs pharmaceutique ou aéronautique civile et militaire, nécessitent l'utilisation de matières premières confectionnées à partir de mélange de constituants le plus homogène possible afin d'assurer l'efficacité de la matière première. Les mélangeurs industriels les plus répandus sont dits intrusifs car ils utilisent la rotation de pales ou d'une grille quadrillée et nécessitent des temps de processus relativement longs. Pour réduire les temps de mélange, une nouvelle technologie, non intrusive, par résonance acoustique (RAM) a été développée via l'oscillation verticale du récipient contenant les composants. Il apparaît alors à la fois des mouvements convectifs macroscopiques, mais également des micro-mouvements tourbillonnaires. Ces derniers sont générés dans l'ensemble du volume à mélanger, contrairement aux technologies intrusives où ils ne sont présents que dans des zones proches des pales rotatives, ce qui améliore le brassage et permet d'obtenir un mélange homogène très rapidement. Dans le cadre d'un projet ANR ASTRID (SINRAM), on s'attache à mélanger un liquide (liant) et des particules (charges) dans un réservoir partiellement rempli d'air sous faible pression. Le réservoir est mise en oscillation ce qui génère des phénomènes physiques complexes : instabilités de l'interface entre l'air et le liant, micro-mouvements tourbillonnaires, collisions de particules solides entre elles, rhéologie variable, dissipation visqueuse, etc. D'autre part, lors du remplissage et de la première étape du procédé, de l'air est piégé dans le liant conduisant à des problématiques de dégazage du liant associé à du transfert d'air aux interfaces.

## Objectifs

Ce post-doctorat d'une durée de 2 ans vise à proposer un code de simulation numérique 3D du mélangeur RAM qui servira à la compréhension des phénomènes physiques, à la conception de mélanges de forte homogénéité, et à une optimisation du dimensionnement du mélangeur. Plus précisément, il permettra de prendre en compte : *i*) les effets de compressibilité de l'air, *ii*) les instabilités de l'interface air/liant (sans particules puis en solution monodisperse), *iii*) l'anisothermie de l'écoulement, et *iv*) la cinétique de dégazage tenant compte du transport de l'air piégé dans le liant et son transfert à l'interface (mais sans interaction avec les particules). L'ensemble de ces travaux sera réalisé avec le code libre et open source Notus (<https://notus-cfd.org>). Plus précisément, les travaux proposés seront focalisés sur 2 aspects :

### 1) Solveur compressible/incompressible diphasique

La simulation du procédé doit être en mesure de prendre en compte les effets de compressibilité non négligeables dans l'air et l'incompressibilité du liant. Dans un premier temps, nous proposons de travailler dans la continuité de travaux développés au laboratoire [1] sur une classe de méthodes de type correction de pression [2,3], basées sur l'équation d'évolution de la pression [4] et conduisant à la résolution d'une équation de Poisson similaire à celle que l'on résoudrait pour un écoulement incompressible, mais comportant des termes et coefficients propres à la prise en compte de la compressibilité de l'écoulement. La formulation proposée sera compatible avec l'approche diphasique Volume-of-Fluid, l'interface entre le liant et l'air sera reconstruite de manière linéaire dans la maille par la méthode VOF-PLIC de Weymouth [5]. Les tensions de surface seront prises en compte par le modèle *Continuum Surface Force* et la courbure par la méthode des fonctions hauteurs [6]. Une rhéologie non newtonienne du liant pourra être envisagée tout comme la prise en compte des transferts de chaleur dans l'écoulement. Dans un second temps, le modèle de Philips [7] et la loi de Krieger [8] déjà implémentés seront aussi utilisés pour la prise en compte des particules dans le liant. L'ensemble de ces méthodes permettra de simuler le réservoir contenant le liant en vibration pour différentes pressions de l'air, et ainsi reproduire l'instabilité de l'interface et la montée en température du mélange.

### 2) Dégazage et transfert aux interfaces

La prise en compte du phénomène de dégazage dans les simulations numériques nécessite le développement de modèles physiques adaptés tenant compte du couplage mécano-chimique du transport de l'air dans le liant et son transfert à l'interface liant/air tout en respectant le saut de concentration à l'interface en conformité avec l'équilibre thermodynamique. Nous considérerons à ce stade l'air comme une entité dissoute pour

résoudre le transport et le transfert aux interfaces par une seule équation d'advection/diffusion macroscopique [9,10]. Le modèle 1-fluide décrit dans le paragraphe précédent sera donc étendu à la prise en compte d'une concentration d'air. Ainsi le fluide équivalent sera reconstruit en fonction de la fraction volumique du fluide dans la maille et de la concentration en air. Nous proposons d'utiliser une méthodologie développée au laboratoire et basée sur un potentiel de diffusion des espèces qui a permis la simulation des mécanismes de dissolution/précipitation [11]. Ce potentiel de diffusion, continu au travers de l'interface, contiendrait dans ce projet, outre le terme classique dépendant des concentrations, les termes relatifs à la gravité, et à la pression.

### **Profil du candidat**

Le post-doctorant recherché devra avoir des compétences affirmées en modélisation physique et numérique d'écoulements diphasiques. Il devra avoir une expérience à la fois dans l'utilisation de codes de calculs parallèles (MPI) et dans l'implémentation de méthodes numériques (FORTRAN2008).

### **Candidature**

Veuillez envoyer aux contacts ci-dessous un CV, une lettre de motivation détaillant votre intérêt pour le sujet, les rapports de thèse (du manuscrit et de la soutenance), et les coordonnées des personnes de référence.

### **Contacts**

Dr. Stéphane Glockner - I2M [glockner@bordeaux-inp.fr](mailto:glockner@bordeaux-inp.fr)

Dr. Sylvie Bordère – I2M [sylvie.bordere@u-bordeaux.fr](mailto:sylvie.bordere@u-bordeaux.fr)

### **Bibliographie**

- [1] J.-P. Caltagirone, S. Vincent, C. Caruyer, A multiphase compressible model for the simulation of multiphase flows, *J. Comput. Phys.* 50 (201)
- [2] G. Huber, S. Tanguy, J.-C. Béra, B. Gilles, A time splitting projection scheme for compressible two-phase flows. Application to the interaction of bubbles with ultrasound waves, *J. Comput. Phys.* 302 (2015) 439–468.
- [3] A Urbano, M Bibal, S Tanguy, A semi-implicit compressible solver for two-phase flows of real fluids, *Journal of Computational Physics* 456, 111034, 2022.
- [4] A Toutant, General and exact pressure evolution equation - *Physics Letters A*, Volume 381, Issue 44, 29 November 2017.
- [5] G.D. Weymouth and D.K.-P. Yue. Conservative Volume-of-Fluid method for free-surface simulations on Cartesian-grids. *J. Comput. Phys.*, 229:2853-2865, 2010
- [6] M Owkes, O Desjardins, A mesh-decoupled height function method for computing interface curvature, *Journal of Computational Physics* 281, 285-300, 2015.
- [7] Krieger, I. M. (1972). Rheology of monodisperse latices. *Advances in Colloid and Interface science*, 3(2), 111-136.
- [8] Phillips, R. J., Armstrong, R. C., Brown, R. A., Graham, A. L., & Abbott, J. R. (1992). A constitutive equation for concentrated suspensions that accounts for shear-induced particle migration. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4(1), 30-40.
- [9] Maes, J. and Soullaine, C. (2020). A unified single-field volume-of-fluid-based formulation for multi-component interfacial transfer with local volume changes. *Journal of Computational Physics*, 402.
- [10] Zanutto, C. P., Paladino, E. E., Evrard, F., van Wachem, B., and Denner, F. (2022b). Modeling of interfacial mass transfer based on a single-field formulation and an algebraic vof method considering non-isothermal systems and large volume changes. *Chemical Engineering Science*, 247.
- [11] Bordère, S. and Glockner, S. (2021). Numerical modeling of diffusion-controlled phase transformation using the darken method: Application to the dissolution/precipitation processes in materials. *Computational Materials Science*, 186.