

# Simulations numériques de la dispersion et du transfert de matière dans les écoulements turbulents chargés en gouttelettes

**Equipe encadrante :** P. Fede ([pascal.fede@imft.fr](mailto:pascal.fede@imft.fr)), E. Climent ([e.climent@imperial.ac.uk](mailto:e.climent@imperial.ac.uk))

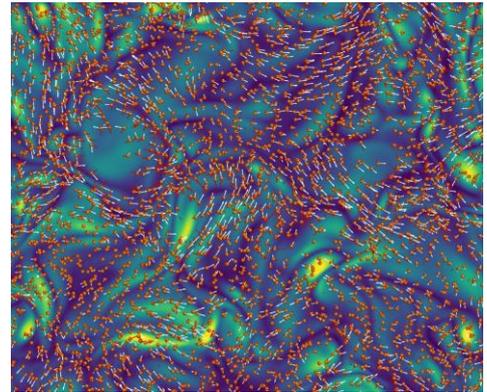
**Laboratoire d'accueil :** Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT), Groupe Fluides & Particules, UMR 5502, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France

**Laboratoire associé :** Ayrton-Blériot Engineering Lab., IRL 2035, Londres, Royaume-Uni

**Date de début :** Automne 2025

**Candidature** [CV, motivations, contact] : P. Fede ([pascal.fede@imft.fr](mailto:pascal.fede@imft.fr))

La compréhension physique et la prédiction de la dynamique et des transferts dans les écoulements turbulents chargés en gouttelettes sont au cœur de problématiques très variées (croissance de gouttes dans les nuages, évaporation de sprays turbulents dans les chambres de combustion ou de gouttelettes contenant une charge virale, absorption du CO<sub>2</sub> ou d'aérosols contaminés par aspersion, extraction liquide-liquide pour les procédés de retraitement du combustible nucléaire...). Toutes ces problématiques de l'ingénierie des procédés qui doivent devenir plus efficaces, plus propres et plus sûrs sont confrontés à un couplage de trois phénomènes physico-chimiques : le caractère multi-échelles et instationnaire de la turbulence, la dispersion hétérogène des gouttelettes (modélisation fiable des forces), le transfert de matière ou de chaleur entre les phases (modélisation du flux interfacial et du changement de phase). Ces trois aspects du problème ont fait ces dernières années des avancées notables dans la communauté scientifique et en particulier dans notre équipe [1-3].



Champ de vorticité de l'écoulement et accumulation locale de particules due à la force de traînée et l'inertie [4].

L'objet de la thèse est de simuler un écoulement turbulent par résolution directe (DNS) des équations de Navier-Stokes pour résoudre spatialement toutes les échelles de la turbulence, en particulier celles qui contrôlent le transport d'un scalaire passif (échelle de Batchelor). Le solveur DNS sera couplée au calcul de trajectoires de gouttes. Cette approche a déjà été utilisée dans plusieurs thèses notamment récemment dans celle de [A. Boutsikakis](#) afin d'analyser l'effet des forces électrostatiques sur la dispersion de particules [4]. Dans les simulations des trajectoires de gouttes, nous allons prendre en compte les derniers développements comprenant les effets de la force de portance et d'histoire (cas particulier des gouttes [1-2]). Enfin pour le transfert interfacial, nous avons désormais des lois de fermeture fiables pour une large gamme de Reynolds et de Péclet pour des systèmes liquide-liquide ou gaz-liquide [3].

Avec cet outil, nous souhaitons aborder trois situations concrètes de complexité croissante :

- la capture de CO<sub>2</sub> (ou d'aérosols) par un nuage de gouttelettes en chute libre dans un écoulement turbulent. Ici, le transfert gaz-liquide qui pilote le flux de matière absorbé est fonction de l'accumulation préférentielle des gouttelettes dans certaines zones de l'écoulement plus ou moins chargées en scalaire passif.

- le transfert liquide-liquide que l'on peut rencontrer dans les suspensions dispersées de gouttelettes en génie chimique lors de l'extraction par un solvant (extraction possiblement réactive, réaction interne aux gouttelettes pour accélérer le transfert physique).
- la croissance de gouttes dans un écoulement turbulent chargé en humidité. La croissance des gouttes conduisant à une distribution de taille hétérogène se fait par croissance des gouttes due à l'humidité présente dans le gaz porteur et par coalescence (les gouttes de taille différente collisionnent lorsqu'elles sédimentent sous l'effet de la gravité). Cette problématique de micro-physique dans les nuages est encore très mal modélisée par les approches macroscopiques.

Les résultats de simulation dont les grandeurs statistiques seront confrontées à des théories ou des résultats expérimentaux (collab. Y. Hardalupas, Imperial College) permettront d'améliorer la fiabilité de la modélisation macroscopique (Wunsch TI, 2009) de ces phénomènes complexes, éléments clés du dimensionnement de procédés plus efficaces et moins polluants ou de la prédiction de phénomènes naturels.

Le candidat devra avoir de solides connaissances en mécanique des fluides, en écoulements multiphasiques et avoir le goût de la simulation numérique et le calcul scientifique haute-performance (HPC).

#### Références

- [1] Shi P, Climent E and Legendre D (2024) Lift force on a spherical droplet in a viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics* 1000, A88. <https://doi.org/10.1017/jfm.2024.1072>
- [2] Godé H, Charton S, Climent E and Legendre D (2023) Basset-Boussinesq history force acting on a drop in an oscillatory flow. *Physical Review Fluids* 8(7), 73605. <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.8.073605>
- [3] Godé H, Climent E, Legendre D and Charton S (2024) Conjugate mass transfer from a spherical moving droplet: Direct numerical simulations of enhancement by a chemical reaction. *Chemical Engineering Journal* 489, 151073. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.151073>
- [4] Boutsikakis A, Fede P and Simonin O (2022) Effect of electrostatic forces on the dispersion of like-charged solid particles transported by homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 938, A33. <https://doi.org/10.1017/jfm.2022.189>