

ÉTUDE NUMÉRIQUE DE LA COLLECTE DE PARTICULES D'AÉROSOL PAR DES GOUTTES EN CHUTE

E. Reyes¹, T. Ménard¹, J. Réveillon¹, P. Lemaitre² et E. Belut³

¹Université de Rouen-Normandie, CORIA – UMR 6614 CNRS, St-Étienne-du-Rouvray, 76800 France

²Institut de Radioprotection et Sûreté Nucléaire (IRSN), PSN-RES, SCA, Gif-Sur-Yvette, 91192, France

³Institut National de Recherche et de Sécurité (INRS), Vandoeuvre-lès-Nancy, 54519, France
reyese@coria.fr

TITLE

Numerical study of aerosol particles collection by falling drops.

RESUME

Il n'existe à ce jour aucune méthode permettant de calculer des efficacités de collecte pour des gouttes présentant des oscillations. Pour surmonter cette limitation, une approche eulérienne pour simuler les écoulements internes et externes à la goutte est couplée à une approche lagrangienne pour simuler le transport des aérosols. Les écoulements sont simulés par Simulation numérique directe (DNS), en résolvant numériquement les équations incompressibles de Navier-Stokes. La dynamique de l'interface liquide/gaz est modélisée à l'aide des méthodes Volume of Fluid (VOF) et Level Set (Vaudor *et al.* 2017). Le transport des aérosols est simulé en appliquant itérativement la deuxième loi de Newton, en prenant en compte la force de traînée et le mouvement brownien. Nous montrons que cette approche, appliquée à des gouttes ne présentant aucune oscillation permet de calculer des efficacités de collecte très proches des résultats de la littérature. Cette première étape nous a permis de valider une méthodologie qui permet dans un second temps d'évaluer les efficacités de collecte pour des gouttes présentant des oscillations.

ABSTRACT

At this time, there is no existing method for calculating collection efficiencies for drops exhibiting oscillations. To overcome this limitation, an Eulerian approach to simulate the internal and external flows to the drop is coupled with a Lagrangian approach to simulate the transport of aerosols. The flows are simulated by Direct Numerical Simulation (DNS), by numerically solving the incompressible Navier-Stokes equations. The dynamics of the liquid/gas interface is modeled using the Volume of Fluid (VOF) and Level Set methods (Vaudor *et al.* 2017). Aerosol transport is simulated by iteratively applying Newton's second law, considering drag force and Brownian motion. We show that this approach, applied to drops presenting no oscillation, allows to calculate collection efficiencies very close to the results of the literature. This first step allowed us to validate a methodology which allows in a second time to evaluate the collection efficiencies for drops presenting oscillations.

MOTS-CLÉS : Aérosol, Brownien, DNS, efficacité de collecte, goutte, Lagrangien, lessivage, Level-Set, VOF /

KEYWORDS: Aerosol, Brownian, collection efficiency, DNS, drop, Lagrangian, Level-Set, scavenging, VOF

1. INTRODUCTION

L'air chargé de polluants sous la forme d'aérosols est présent dans différents environnements. Dans l'industrie, les conséquences sanitaires des expositions des employés aux aérosols sont toujours néfastes et dans l'environnement, lors d'accidents nucléaires, une grande partie des rejets radioactifs se trouve sous forme d'aérosols. Dans ces contextes, le lessivage ou l'épuration des particules d'aérosols par des gouttes en chute libre est un procédé efficace pour diminuer la concentration des particules d'aérosols en suspension dans l'air.

L'efficacité de ce processus dépend d'un paramètre microphysique appelé *l'efficacité de collecte (E)*, qui décrit la fraction des particules collectées par une goutte lors de sa chute. Dans la littérature, Slinn (1977) a été le premier à établir des modèles pour calculer cette efficacité, mais il a rapidement été confronté aux limites du modèle d'écoulement qu'il utilisait. Pour surmonter ces limites, Grover *et al.* (1977) et Wang *et al.* (1978) ont été les premiers à établir théoriquement des efficacités de collecte basées sur la modélisation réelle de l'écoulement autour et dans une goutte non déformante, pour des nombres de Reynolds de goutte inférieurs à 200, en prenant en compte la traînée, la thermophorèse, la diffusiphorèse et les forces électriques sur les aérosols. Plus récemment, Minier et Peirano (2001) ont réussi à intégrer analytiquement l'approche de Langevin (1908) pour le mouvement brownien des aérosols. Grâce à cette approche, Cherrier *et al.* (2017) sont parvenus à intégrer le mouvement brownien au modèle Grover *et al.* (1977). Cette approche a été reprise et validée par Dépée *et al.* (2019), puis validée en laboratoire en tenant compte des effets phorétiques (Dépée *et al.* 2021-part I) et électrostatiques (Dépée *et al.* 2021-part II).

Malgré cette unification conceptuelle, un défi scientifique majeur demeure. Ces approches nécessitent une simulation précise de l'écoulement autour de la goutte. Or, les gouttes dont le nombre de Reynolds est supérieur à 500 oscillent à haute fréquence (environ 100 Hz) et se déforment progressivement. Ainsi, les méthodes déployées par Cherrier et al. (2017) et Dépée *et al.* (2021) reposant sur une géométrie fixe ne sont plus valables.

Dans ce travail, nous proposons une méthode alternative pour étendre les calculs à des nombres de Reynolds au-delà de 200. La dynamique de l'interface liquide/gaz est maintenant modélisée en utilisant une méthode hybride Volume of Fluid (VOF) - Level Set (ϕ) (Vaudor *et al.* 2017) couplée à une résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour les deux phases continues. Pour évaluer cette approche, cet article propose de comparer les efficacités de collecte obtenues avec cette technique aux valeurs de référence de la littérature obtenues pour des gouttes sphériques non déformantes à faible Reynolds ($Re = 30$) et différents diamètres d'aérosols.

2. ÉQUATIONS GOUVERNANTES

2.1. Écoulement incompressible

La simulation des écoulements se fait avec une résolution numérique des équations de Navier-Stokes, qui sont constituées par l'équation de conservation de la quantité de mouvement et l'équation de conservation de la masse dans un milieu incompressible :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho(\phi) \vec{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho(\phi)(\vec{U} - \vec{U}_g) \otimes \vec{U}) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot (2\mu(\phi)D) + \rho(\phi)\vec{g} + \sigma\kappa(\phi)\delta(\phi)\vec{n} \quad (2)$$

avec ρ , \vec{U} et p la densité, la vitesse et la pression, respectivement et \vec{U}_g la vitesse instantanée de la goutte, $D = \frac{1}{2}(\vec{\nabla}\vec{U} + \vec{\nabla}\vec{U}^T)$ le tenseur des contraintes, μ , la viscosité dynamique, $\rho(\phi)\vec{g}$ la force de gravité. Les forces de tension superficielle sont considérées et représentées par $\sigma\kappa(\phi)\delta(\phi)\vec{n}$, avec σ la tension superficielle, $\kappa(\phi)$ la courbure locale et $\delta(\phi)$ la fonction de Dirac. ϕ est l'indicateur de phase obtenu via la méthode Coupled Level-Set/VOF (CLSVOF) (Vaudor et al. 2017) et où la courbe de niveau zéro représente l'interface.

2.2. Approche lagrangienne

Une approche lagrangienne est utilisée afin de simuler les trajectoires des particules aussi précisément que possible. Le vecteur d'état de chaque particule est alors $\vec{Z}_p(t) = \{\vec{x}_p(t), \vec{U}_p(t)\}$, où $\vec{x}_p(t)$ est la position instantanée de la particule dans l'écoulement et $\vec{U}_p(t)$ sa vitesse. Les petites particules sont sensibles aux effets browniens alors que les plus grosses suivent leur force inertielle. Les équations du mouvement retenues correspondent aux équations de Langevin :

$$d\vec{x}_p = \vec{U}_p(t)dt \quad (3)$$

$$d\vec{U}_p = \frac{\vec{U}_s(t) - \vec{U}_p(t)}{\tau_p} dt + B d\vec{W}(t) \quad (4)$$

avec τ_p le temps de relaxation de la particule et \vec{U}_s la vitesse du fluide. Le dernier terme de l'équation représente les effets browniens, avec $d\vec{W}$ l'incrément du processus de Wiener et B le coefficient de diffusion.

2.3. Efficacité de collecte

L'efficacité de collecte est définie comme le rapport entre la masse de particules collectées par la goutte lors de sa chute et la masse de particules présentes dans le volume balayé par la goutte :

$$E(d_p) = \frac{N_{capt}(d_p)}{N_{inj}(d_p)} \quad (5)$$

avec N_{capt} le nombre de particules capturées par la goutte lors de sa chute, N_{inj} le nombre total de particules injectées présentes dans un disque de diamètre $d_{inj} = (d_g + d_p)$, où d_g est le diamètre de la goutte et d_p le diamètre de la particule.

3. CONFIGURATION ET RÉSULTATS

3.1. Initialisation des gouttes et du domaine

Une gouttelette d'eau, de diamètre $d_g = 334\mu m$ et entourée par de l'air au repos, est initialisée au centre du domaine avec la vitesse terminale théorique à l'intérieur de la goutte ($Re = 30$). La taille du domaine est $L_x = L_y = 1mm$ et $L_z = 2mm$ et 3 tailles de maille sont testées. Les particules capturées par une goutte au cours d'une simulation sont présentées dans la Figure 1. Ces simulations sont effectuées jusqu'à l'état d'équilibre de l'écoulement et cette dernière étape temporelle est utilisée pour la simulation des particules lagrangiennes.

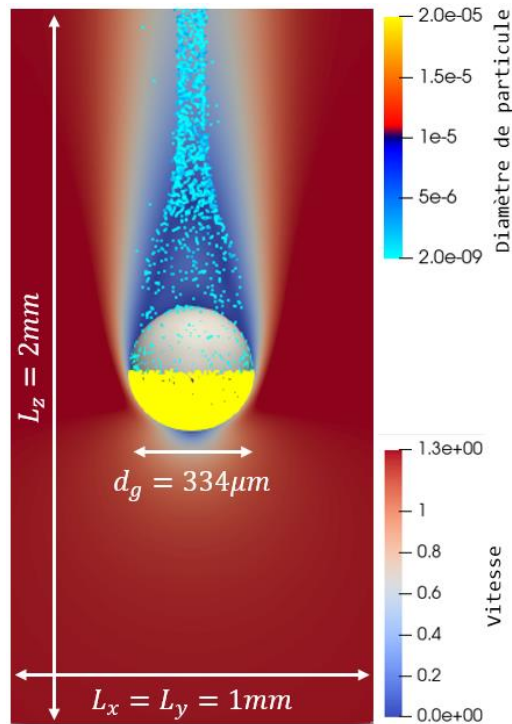


Figure 1. Simulation de l'écoulement autour d'une goutte en chute et des particules capturées.

3.2. Initialisation des particules

Les positions des particules sont initialisées aléatoirement en bas du domaine, avec une vitesse initiale nulle. Les diamètres des particules varient dans un intervalle de 2 nm à $20\mu m$ et leurs trajectoires sont suivies à l'aide de la version discrétisée des équations (1) et (2) proposée par Mohaupt *et al.* (2011). Les particules sont considérées comme capturées lorsque la fonction Level-Set interpolée à la position du barycentre de la particule est positif ($\phi_p + r_p > 0$) et la simulation est arrêtée lorsque la convergence statistique est atteinte pour l'efficacité de la collecte.

3.3. Résultats

La Figure 2 présente les efficacités de collecte obtenues pour trois maillages différents ainsi que les résultats de Cherrier *et al.* (2017) pour un cas simulé mais avec une interface fixe (simulation axisymétrique 2D pour l'écoulement et simulations 3D pour les particules).

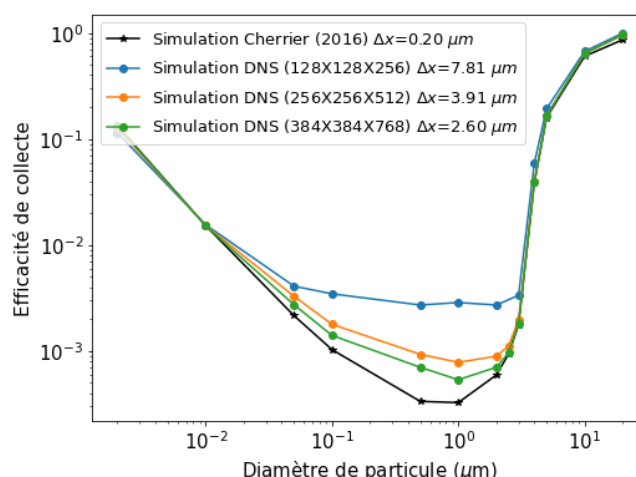


Figure 2. Résultats de l'efficacité de collecte pour différentes configurations et comparaison avec Cherrier et al. (2017) (courbe noire).

On constate que les résultats actuels convergent vers les résultats de référence de Cherrier et al. (2017) lorsque la taille des mailles diminue. Cependant, un léger écart subsiste avec les résultats de référence, même pour les plus fines employées, pour les diamètres de particules compris entre 0.1 à 1 μm , où l'efficacité de collecte est minimale (écart dit de Greenfield). Comme cela semble être lié à une erreur de discrétisation spatiale du champ de vitesse vu par les particules, des améliorations du schéma d'interpolation de la vitesse sont en cours de développement (actuellement interpolation polynomiale d'ordre 2).

4. CONCLUSION

Une approche DNS-VOF-Level Set a été couplée au suivi lagrangien de particules discrètes pour modéliser le balayage de particules en suspension dans l'air par une seule goutte d'eau en chute libre, ce qui permet de prendre en compte l'effet de la dynamique complexe des gouttes sur le balayage des particules en cas de régimes oscillants et de déformation des gouttes. Les effets de la force de traînée et du mouvement brownien sur les trajectoires des particules sont pris en compte. Une première validation est proposée dans cet article pour une situation laminaire où la goutte reste sphérique $Re = 30$, situation où des résultats de référence existent déjà. L'approche proposée reproduit avec une bonne précision les valeurs de référence pour l'efficacité de collecte des aérosols E (différence de $< 4e^{-3}$) lorsqu'une discrétisation spatiale appropriée est utilisée, la divergence maximale étant trouvée dans le "Greenfield gap" des tailles de particules (diamètres entre 0.1 à 1 μm). Et pour la suite, des résultats inédits des efficacités de collecte seront présentés pour des gouttes de grand diamètre avec déformation.

5. RÉFÉRENCES

- Cherrier, G., Belut, E., Gerardin, F., Tanière, A., Rimbert, N. (2016). Aerosol particles scavenging by a droplet: Microphysical modeling in the Greenfield gap. *Atmos. Environ.* 166, 519–530.
- Dépée, A., Lemaitre, P., Gelain, T., Mathieu, A., Monier, M., & Flossmann, A. (2019). Theoretical study of aerosol particle electroscavenging by clouds. *Journal of Aerosol Science*, 135, 1-20.
- Dépée, A., Lemaitre, P., Gelain, T., Monier, M., Flossmann, A. (2021). Laboratory study of the collection efficiency of submicron aerosol particles by cloud droplets-Part I: Influence of relative humidity. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21(9), 6945-6962.
- Dépée, A., Lemaitre, P., Gelain, T., Monier, M., & Flossmann, A. (2021). Laboratory study of the collection efficiency of submicron aerosol particles by cloud droplets-Part II: Influence of electric charges. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21(9), 6963-6984.
- Grover, S. N., Pruppacher, H. R. (1977). A Numerical Determination of the Efficiency with Which Spherical Aerosol Particles Collide with Spherical Water Drops Due to Inertial Impaction and Phoretic and Electrical Forces. *Journal of the Atmospheric Sciences*.
- Minier, J.-P., & Peirano, E. (2001). The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Physics Reports*, 352 1–3, 1–214.
- Mohaupt, M., Minier, J. P., Tanière, A. (2011). A new approach for the detection of particle interactions for large-inertia and colloidal particles in a turbulent flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(7), 746–755.
- Slinn, W. G. N. (1977). Some Approximations for TheWet and Dry Removal of Particles and Gases from the Atmosphere.
- Vaudor, G., Ménard, T., Aniszewski, W., Doring, M., Berlemont, A. (2017). A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process. *Computers and Fluids*, 152, 204–216.
- Wang, P. K., Grover, S. N., Pruppacher, H. R. (1978). On the Effect of Electric Charges on the Scavenging of Aerosol Particles by Clouds and Small Raindrops. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 35, 1735–1743.