

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Mohamed Khider – Biskra
Faculté des Sciences et de la technologie
Département de génie civil
Ref :



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: الهندسة المدنية
المرجع:

Thèse présentée en vue de l'obtention
du diplôme de
Doctorat en sciences
Spécialité : Génie Civil

**Hydromécanique des milieux granulaires saturés
par une approche micromécanique couplée
Eléments Discrets / Lattice Boltzmann**

-Applications à la géotechnique-

Présentée par : MANSOURI Mouloud
Soutenue publiquement le : 26/11/2014

Devant le jury composé de :

Dr. MELLAS Mekki, Prof.	Président	Université Mohamed Khider, Biskra
Dr. SERIDI Ahcene, Prof.	Dir. de thèse	Univ. M'hamed Bougara, Boumerdes
Dr. EL YOUSOUFI Moulay Saïd, Prof.	Co-dir. de thèse	Université Montpellier II (France)
Dr. BOUAZIZ Ahmed, M. C. A	Examineur	Université Mohamed Khider, Biskra
Dr. NICOT François, Dir. de recherche	Examineur	IRSTEA Grenoble (France)
Dr. MESSAST Salah, Prof.	Examineur	Université de Skikda

Remerciements

A l'issue de la rédaction de cette thèse, je tiens à remercier le professeur Ahcene SERIDI, mon directeur de thèse, pour la confiance, la liberté et les encouragements qu'il m'a accordés pendant toutes ces longues années de réalisation de cette thèse.

Le professeur Saïd EL YOUSOUFI, a accepté de participer à l'encadrement de cette thèse, il m'a donné l'opportunité de m'accueillir au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de l'Université Montpellier 2 (LMGC), où la partie cruciale de cette thèse a été réalisée. Je lui exprime ma profonde gratitude pour les moyens qu'il a mis à ma disposition, pour ses idées et critiques très constructives ainsi que ses encouragements illimités.

Le Professeur Mekki MELLAS, avec toutes les taches administratives qu'il a en charge, a accepté de donner de son temps pour présider le jury de soutenance de cette thèse, je le remercie infiniment.

Je remercie également Messieurs NICOT François Directeur de recherche à l'IRSTEA de Grenoble, Salah MESSAST Professeur à l'université de Skikda et Ahmed BOUAZIZ maître de conférences à l'université de Biskra, de l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de cette recherche et de leur engagement pour l'examen de son contenu.

Durant la période que j'ai passée au LMG, j'ai partagé beaucoup de moments de travail avec Monsieur Jean-Yves Delenne, les discussions avec lui sont à l'origine de beaucoup d'idées développées dans cette thèse, qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

L'université Mohamed Khider de Biskra représentée par son administration, a accepté de mettre sous sa tutelle cette thèse en toute fin de parcours, j'exprime ma profonde reconnaissance à ses responsables pour toutes les facilités administratives qu'ils ont mis à ma disposition.

Je n'oublie pas aussi d'exprimer ma reconnaissance au professeur Khelifa KEBICHE qui m'a mis en contact initialement avec l'équipe de mécanique des milieux granulaires au LMG, ainsi qu'à mes étudiants B. YAHIAOUI et N. KHITAS pour leur contribution à la correction de ce mémoire.

Enfin, je souhaiterais aussi adresser ma gratitude à mes collègues enseignants du département de génie civil de l'Université de Setif 1, ainsi qu'à l'ensemble des membres du LMG pour leurs encouragements.

Liste des symboles et notations

ρ :	masse volumique
d :	diamètre d'un grain solide
k_n :	constante élastique du modèle viscoélastique linéaire d'interaction intergranulaire
ν_n :	constante d'amortissement du modèle viscoélastique linéaire d'interaction intergranulaire
μ_d :	coefficient de frottement dynamique de Coulomb
\vec{g} :	accélération de gravité
\vec{u}_G :	vitesse d'un grain solide
\vec{u}_f :	vitesse du fluide
$\vec{\xi}$:	vitesse d'une particule fluide
\vec{e}_i :	vitesse particulaire discrète
μ :	viscosité dynamique du fluide
ν :	viscosité cinématique du fluide
Re :	nombre de Reynolds
Ma :	nombre de Mach
f :	distribution massique
$f^{(0)}$:	distribution massique d'équilibre de Maxwell
f_i :	distribution massique discrète
f_i^{eq} :	distribution massique d'équilibre discrète
Δt :	pas de discrétisation du temps
Δx :	pas de discrétisation de l'espace dans la méthode Lattice Boltzmann
τ :	temps de relaxation adimensionné
c :	vitesse de caractéristique du modèle Lattice Boltzmann $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$
c_s :	vitesse de propagation du son du modèle Lattice Boltzmann
\vec{F}_h :	force hydrodynamique sur un grain
n :	porosité de l'échantillon granulaire
k_a :	perméabilité absolue en m^2
p :	pression du fluide
i :	gradient hydraulique appliqué à un dépôt granulaire
i_c :	gradient hydraulique critique de boulangerie d'un dépôt granulaire

Table des matières

Introduction générale	1
1 Méthodes aux Eléments Discrets pour la modélisation des grains solides	9
1.1 Introduction	10
1.2 Description de la dynamique moléculaire	11
1.2.1 Eléments de description cinématique du milieu granulaire	12
1.2.2 Lois d'interaction	14
1.2.2.1 Loi d'interaction pour la force normale	15
1.2.2.2 Loi d'interaction pour la force tangentielle	17
1.2.2.3 Résistance au roulement	18
1.2.2.4 Choix des constantes et coefficients intervenants dans les lois d'interaction	19
1.2.3 Intégration des équations de mouvement	20
1.2.3.1 Algorithme “ <i>Predictor-Corrector</i> ”	20
1.2.3.2 Algorithme “ <i>Velocity-Verlet</i> ” :	22
1.2.4 Détection des contacts	23
1.2.5 Conditions aux frontières	24
1.2.6 Contrainte intergranulaire moyenne	25
2 Notions essentielles de dynamique des fluides	27
2.1 Introduction	27
2.2 Quelques définitions relatives aux fluides et écoulements	28
2.3 Equations de dynamique des fluides	30
2.3.1 Equation de continuité	30
2.3.2 Equations de Navier-Stokes	31
2.3.3 Forme adimensionnelle des équations de Navier-Stokes	31
2.4 Exemple de solution : écoulement de Poiseuille	32

3	Méthode Lattice-Boltzmann pour la dynamique des fluides	36
3.1	Introduction	37
3.2	Fonction de distribution et équation de base	37
3.3	Discrétisation de l'équation BGK	39
3.4	Exemples de modèles Lattice-Boltzmann	41
3.4.1	Modèle bidimensionnel "D2Q9"	41
3.4.2	Modèle tridimensionnel "D3Q19"	42
3.5	Algorithme de calcul	44
3.6	Prise en compte de l'effet d'une force de volume	45
3.7	Paramètres de discrétisation	45
3.8	Conditions aux frontières	47
3.8.1	Condition de frontières périodiques	47
3.8.2	Condition de non-glissement sur une frontière solide, condition du "Bounce Back"	47
3.8.3	Condition de pression ou de vitesse imposée	49
3.9	Force hydrodynamique sur un obstacle solide, méthode des échanges de quantités de mouvement	52
3.10	Unités Lattice boltzmann	54
3.11	Application à l'écoulement de Poiseuille	54
4	Simulations d'écoulements à travers des solides granulaires	60
4.1	Introduction	61
4.2	Effets des paramètres de discrétisation sur la précision de la simulation de l'écoulement de Poiseuille	61
4.2.1	Écoulement par différence de pression	62
4.2.2	Écoulement par force de volume	65
4.2.3	Remarques et conclusions	66
4.3	Simulation de l'essai perméabilité sur un solide granulaire	68
4.3.1	Perméabilité d'un dépôt granulaire non-cimenté	69
4.3.1.1	Construction de l'éprouvette du dépôt	69
4.3.1.2	Mesure de la perméabilité	71

4.3.1.3	Données numériques fixées dans les simulations	72
4.3.1.4	Exemple de simulation	73
4.3.1.5	Comparaison des résultats avec la corrélation de Karman-Kozeny	76
4.3.2	Perméabilité d'un dépôt granulaire cimenté	79
4.3.2.1	Modèles de cimentation utilisés	79
4.3.2.2	Evolution de la perméabilité avec la cimentation	80
4.3.3	Conclusions	82
4.4	Estimation du gradient hydraulique critique de boulangerie	83
4.4.1	Phénomène de boulangerie et gradient hydraulique critique	83
4.4.2	Estimation du gradient hydraulique critique par analyse de l'évo- lution des contraintes intergranulaires	84
4.4.3	Conclusion	89
5	Couplage Eléments Discrets Lattice-Boltzmann, modélisation des mi- lieux granulaire saturés	90
5.1	Introduction	90
5.2	Solide en mouvement dans un fluide modélisé par la méthode Lattice- Boltzmann	91
5.2.1	Condition de rebondissement interpolée	93
5.2.2	Application de la condition de rebondissement interpolée aux grains solides en mouvement	95
5.2.3	Distributions inconnues des noeuds réintégrant le domaine fluide suite au mouvement des grains	96
5.3	Couplage Eléments Discrets – Lattice-Boltzmann	97
5.3.1	Résolution de la discrétisation spatiale	98
5.3.2	Procédure d'incrémentation du temps	98
5.3.3	Prise en compte de la poussée d'Archimède	99
6	Validation du modèle couplé et simulations de dynamique des milieux granulaires saturés	100
6.1	Introduction	101

6.2	Simulations de validation	101
6.2.1	Force et moment sur une sphère dans un écoulement de Poiseuille	101
6.2.1.1	Description du problème à simuler	101
6.2.1.2	Résultats et discussions	104
6.2.1.3	Conclusion	106
6.2.2	Force hydrodynamique sur un grain en mouvement	107
6.2.2.1	Description du problème à simuler	107
6.2.2.2	Résultats et discussions	108
6.2.3	Sédimentation de deux grains, phénomène du “drafting, kissing and tumbling”	109
6.2.3.1	Description du problème à simuler	110
6.2.3.2	Résultats et discussions	111
6.2.3.3	Conclusion	113
6.3	Simulation de la boulangerie du sable	113
6.3.1	Simulation 3D de la boulangerie	114
6.3.2	Simulation 2D de la boulangerie	116
6.3.3	Conclusion	120
	Conclusions et perspectives	121
A	Frontière de pression ou de vitesse imposée, modèle D3Q19	125
	Bibliographie	128

Table des figures

1	Schéma de la procédure du couplage proposée par Tsuji et al. selon [Zhu 2007]	5
1.1	Composantes normale et tangentielle de la force de contact	12
1.2	(a) Description cinématique du milieu granulaire, (b) Repère local de contact	13
1.3	Modèle de force de contact normale utilisé	15
1.4	Modèle de la force de contact tangentielle	17
1.5	(a) Illustration schématique de la résistance au roulement, (b) Pivotement	18
1.6	Position d'une bille en chute sur un plan horizontal en fonction du temps ; comparaison des différents algorithmes	23
1.7	Système de disques (2D) périodique dans la direction X	25
2.1	Ecoulement de Poiseuille plan	33
2.2	Profils de vitesse et de pression pour l'écoulement de Poiseuille plan	35
3.1	(a) Modèle D2Q9, (b) Discrétisation du domaine d'écoulement selon le modèle D2Q9	42
3.2	Modèle tridimensionnel D3Q19	43
3.3	Exemple de frontières périodiques suivant la direction x	48
3.4	Schéma standard la condition "Bounce Back"	48
3.5	Représentation des frontières solide-fluide suite à l'application de la condition du Bounce-Back	49
3.6	Frontière à pression (ou vitesse) spécifiée pour le modèle D2Q9. Les distributions qui restent inconnues après l'étape de propagation sont calculées de sorte à obtenir la pression (ou la vitesse) souhaitée.	50
3.7	Force et moment appliqués sur un grain solide par une particule fluide propagée et réfléchi suivant le lien ℓ	53
3.8	Caractéristiques géométriques de l'écoulement de Poiseuille simulé	56

3.9	(a) Profils de la vitesse $u_x(y)$ à mi-longueur du canal pour les deux discrétisations, (b) Variation de la pression calculée le long du canal par les deux discrétisations.	59
4.1	Caractéristiques géométriques de l'écoulement de Poiseuille étudié	62
4.2	Eprouvette périodique (les périodes sont montrées par des couleurs alternées).	70
4.3	Courbe granulométrique d'un échantillon polydispense pour des coefficients $a = b = 2$	70
4.4	Zooms dans une coupe verticale de l'éprouvette sous écoulement	74
4.5	Pression adimensionnée en fonction de l'ordonnée z	75
4.6	Variation de porosité surfacique le long de l'échantillon	75
4.7	Perméabilité en fonction de la porosité	78
4.8	Quelques formes des dépôts de ciment existants en pratique.	79
4.9	Modèles de cimentation ; (a) dépôt sous forme de pont conique, (b) dépôt à épaisseur uniforme autour des grains, (c) dépôt aléatoire.	80
4.10	Evolution de la perméabilité avec le degré de saturation en ciment	81
4.11	Schéma du dispositif de mise d'un échantillon de sol sous écoulement ascendant à gradient hydraulique constant	84
4.12	Evolution des forces hydrodynamiques verticales avec le gradient hydraulique appliqué.	87
4.13	Evolution des contraintes intergranulaires verticales avec le gradient hydraulique appliqué.	88
5.1	Rebondissement d'une particule fluide sur un mur de position quelconque par rapport à la grille Lattice-Boltzmann.	94
5.2	Grain solide en mouvement par rapport à une grille Lattice-Boltzmann .	96
6.1	Grain sphérique fixe dans un écoulement de Poiseuille entre deux plaques parallèles	102
6.2	Cellule périodique simulée	103

6.3	Evolution de la force de traînée subie par le grain avec l'augmentation de la période de la cellule simulée.	104
6.4	Evolution du moment subi par le grain avec l'augmentation de la période de la cellule simulée.	105
6.5	Force de traînée en fonction du temps, le temps est en unité Lattice-Boltzmann ($\bar{t} = t/\Delta t$)	108
6.6	Illustration du phénomène "drafting, kissing and tumbling"	110
6.7	Données géométriques initiales de l'expérience simulée du phénomène "drafting, kissing and tumbling"	111
6.8	Processus de sédimentation obtenu par la simulation numérique	112
6.9	Vitesses verticales des grains en fonction du temps	112
6.10	Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 3D de la boulangerie d'un dépôt de grains pour $i \approx 0,92i_c$. L'image (1) correspond à l'état initial du dépôt non soumis à l'écoulement.	115
6.11	Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangerie d'un dépôt de grains pour $i = 1,1i_c$, $\delta t = 0,065 s$	117
6.12	Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangerie d'un dépôt de grains pour $i = i_c$, $\delta t = 0,065 s$	118
6.13	Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangerie d'un dépôt de grains pour $i = 0,968i_c$, $\delta t = 0,065 s$	119
A.1	Frontière pour le modèle D3Q19	126

Liste des tableaux

3.1	Tableau de passage entre variables physiques et leurs correspondantes en unités Lattice-Boltzmann	55
3.2	Paramètres de l'écoulement de Poiseuille simulé	56
3.3	Paramètres de discrétisation utilisés pour la simulation de l'écoulement de Poiseuille	58
4.1	Paramètres et résultats des simulations pour un écoulement par différence de pression	64
4.2	Paramètres et résultats des simulations pour un écoulement par force de volume	67
4.3	Paramètres utilisés dans la simulation d'écoulement à travers l'éprouvette granulaire	73
4.4	Porosités et perméabilités obtenues des échantillons soumis à la simulation	77
4.5	Propriétés physiques et géométriques du système étudié	86
4.6	Valeurs des différences de pression imposées, des résultantes des pressions et des gradients hydrauliques correspondants	86
6.1	Paramètres addimensionnels utilisés dans les simulations	104

Introduction générale

Contexte général des travaux

Les milieux granulaires tels que les sables sont par leur nature des milieux discontinus. Néanmoins, la modélisation de certains phénomènes relatifs à ce type de matériaux se fait souvent par des méthodes construites sur la base de l'hypothèse de milieu continu. Ces méthodes qui utilisent des relations constitutives phénoménologiques empiriques ou semi-empiriques, permettent dans beaucoup de cas une prédiction correcte du comportement mécanique. Néanmoins, il est connu que le comportement mécanique des matériaux granulaires est très variable. A titre d'exemple, la liquéfaction des sables signifie qu'un sable de comportement initial solide peut avoir, sous certaines conditions un comportement de liquide. Par conséquent pour un même matériau, de nombreuses relations constitutives sont proposées et le choix de celles qui conviennent pour la modélisation d'un phénomène donné reste difficile. Cette échelle de modélisation est qualifiée d'*échelle macroscopique*.

Alternativement, l'approche de modélisation micromécanique prend en compte la nature discrète de ces matériaux en considérant chaque grain indépendamment des autres et en prenant en compte les interactions intergranulaires à travers les points de contacts. Cette approche permet de mieux comprendre le comportement macroscopique en analysant les mécanismes qui se produisent à l'échelle microscopique. Les modèles développés dans ce cadre sont basés sur les Méthodes aux Eléments Discrets (DEM), ils sont appliqués de plus en plus pour l'étude et l'analyse du comportement mécanique des milieux granulaires et en particulier pour les phénomènes qui sont difficiles à modéliser à travers les approches classiques tels que les blocages dans les silos, la ségrégation dimensionnelle, etc.

La présence d'une phase liquide dans le milieu rend son analyse par éléments discrets plus complexe. En effet, en plus des forces de contacts entre grains, la phase liquide génère d'autres forces dont il faut tenir compte. A titre d'exemple, l'analyse des sables humides à l'état du régime pendulaire a fait l'objet de plusieurs recherches au cours de

la dernière décennie en introduisant des forces ponctuelles prenant en compte les ponts liquides entre grains.

Lorsque la phase liquide sature les pores du milieu, la modélisation devient beaucoup plus complexe. En effet, tout mouvement des grains s'accompagne de changements de pressions et d'écoulements interstitiels qui appliquent aux grains des forces difficilement quantifiables. Le comportement mécanique du milieu est alors géré par deux types d'interactions à savoir, les interactions grain-grain et les interactions liquide-grains. La simulation de la mécanique de ces milieux nécessite ainsi un modèle qui peut prendre en compte ces deux types d'interactions. Une approche directe du problème consiste à modéliser les grains solides par éléments discrets et le liquide interstitiel par l'une des méthodes de modélisation de la dynamique des fluides tout en prenant en compte l'interaction à l'interface des deux phases.

Etat de l'art de couplage de la DEM avec des modèles de fluide

L'intérêt de la modélisation micromécanique par Eléments Discrets des milieux granulaires saturés, a permis de développer plusieurs méthodes de simulation ces deux dernières décennies. Les approches proposées pour la prise en compte du fluide sont multiples. Bien que la majorité soit basée sur les théories classiques notamment la loi Darcy et les équations de Navier-Stokes, d'autres méthodes telles que la méthode Lattice-Boltzmann commencent à émerger. Dans la suite, une description sommaire des approches principales existantes est présentée, tout en essayant de montrer les avantages de l'une par rapport à l'autre.

La loi de Darcy, exprime pour un écoulement à travers un milieu poreux, que le débit est proportionnel au gradient de pression, le coefficient de proportionnalité étant la perméabilité du milieu. Cette loi a été utilisée par plusieurs chercheurs conjointement avec la DEM pour modéliser le comportement mécanique des milieux granulaires saturés. Pour la majorité des méthodes proposées dans ce cadre, le principe consiste à diviser le domaine géométrique du problème en cellules régulières fixes (Eulerienne), de sorte que chaque cellule contient plusieurs grains. Chacune des cellules est caractérisée par

une fraction volumique du fluide qui varie avec le mouvement des grains. Ces méthodes étant incrémentales, à chaque pas de temps les pressions moyennes pour chaque cellule sont évaluées, les forces de traînée sur les grains sont calculées à partir de ces pressions et introduites dans le modèle d'éléments discrets. La variation de la pression moyenne dans une cellule pendant un pas de temps résulte de deux effets ; (1) une variation due à la dissipation par écoulement entre les différentes cellules qui est évaluée à travers la loi de Darcy en attribuant une perméabilité au milieu, et (2) une surpression causée par le changement du volume des pores conséquent aux déplacements des grains ; elle est estimée en supposant que le fluide est un milieu élastique caractérisé par un module de déformation volumique. Pour Nakase et al. [Nakase 1999], le changement de volume des pores dans une cellule est estimé en considérant le flux de la matière solide entre la cellule considérée et les cellules voisines, et les forces de traînée sur les grains sont obtenues en distribuant la force totale appliquée par la différence de pression entre les cellules encadrant la cellule considérée. Cette technique a été utilisée par Meguro et al. [Meguro 2000] pour la simulation 3D du phénomène de liquéfaction des sols et de bons résultats qualitatifs sont obtenus. Shafipour et al. [Shafipour 2008] ont utilisé une méthode semblable pour la modélisation 2D du comportement non drainé des milieux granulaires. Néanmoins, dans leur méthode, les forces de traînée sur les grains sont calculées en utilisant la relation semi-empirique d'Ergun (1952), et la variation du volume des pores dans une cellule est calculée à travers la déformation volumique moyenne du squelette solide au centre de la cellule. Cette déformation est obtenue à partir des déplacements des grains dont les centres sont situés à l'intérieur de la cellule. Rappelons que la relation semi-empirique d'Ergun exprime la force de traînée que subit un grain par un écoulement traversant le milieu granulaire sous la forme :

$$\vec{F}_h = 150 \frac{\mu_f (1-n)^2}{n \langle d \rangle^2} (\vec{u}_f - \vec{u}_G) + 1,75 \frac{(1-n) \rho_f |\vec{u}_f - \vec{u}_G|}{\langle d \rangle} (\vec{u}_f - \vec{u}_G) \quad (1)$$

où μ_f est la viscosité dynamique du fluide, n est la porosité du milieu granulaire \vec{u}_f et \vec{u}_G sont respectivement les vecteurs vitesses moyens du fluide et du grain, $\langle d \rangle$ est le diamètre équivalent moyen du grain ($\langle d \rangle = 6/S_0$, S_0 est la surface spécifique moyenne)¹.

1. Notons que cette relation est valable pour des milieux granulaires de porosités inférieures à 0,80

Dans la même catégorie de méthodes, Preece et al. [Preece 1999] ont proposé une modélisation 2D différente, utilisant la méthode des éléments finis. Dans leur méthode, ils ont employé la formulation Laplacienne de la loi de Darcy, qui s'exprime dans le cas de fluide incompressible sous la forme :

$$k_x \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

où p est la pression et k_x et k_y sont les coefficients de perméabilité dans les directions x et y . Dans cette méthode, les éléments finis sont de taille plus grande que les grains, les coefficients de perméabilité sont évalués de façon approchée pour chaque élément à partir des porosités correspondantes et les forces de traînée sont calculées par intégration de la pression sur les frontières.

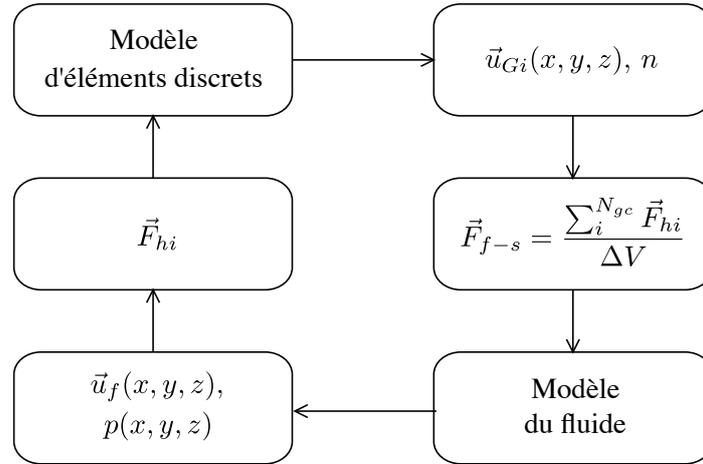
Bien que la loi de Darcy soit relativement simple de sorte que le coût des calculs peut être réduit, il est évident que les modèles basés sur cette loi sont limités aux problèmes mettant en jeu des écoulements à faibles nombres de Reynolds.

Par rapport à la loi de Darcy, les équations de Navier-Stokes fournissent une description plus générale des écoulements de fluides, et le calcul dynamique des fluides (CFD) est communément compris comme l'art de résoudre les équations de Navier-Stokes de façon numérique. Cependant, il est connu que la résolution numérique directe de ces équations est très laborieuse lorsqu'il s'agit d'écoulements dans des géométries complexes et plus particulièrement dans le cas de géométries variables avec le temps.

Pour les suspensions de particules, une approche alternative basée sur les équations de Navier-Stokes homogénéisées proposées par Anderson et Jackson (1967) peut être utilisée. Tsuji et al. [Tsuji 1993], sont les premiers à employer ce modèle en couplage avec la DEM, en supposant que le fluide est incompressible et les forces visqueuses sont négligeables. Dans ce cas, les équations homogénéisées de Navier-Stokes s'écrivent d'après [Tsuji 1993] et [Zeghal 2008] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n \vec{u}_f) = 0 \quad (3)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial (n \vec{u}_f)}{\partial t} + \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_f + \vec{u}_f \cdot \vec{\nabla} \right) (n \vec{u}_f) \right) = -n \vec{\nabla} p - \vec{F}_{f-s} + n \rho_f \vec{g} \quad (4)$$



ΔV étant le volume d'une cellule et N_{gc} le nombre de grains dans la cellule.

FIGURE 1 – Schéma de la procédure du couplage proposée par Tsuji et al. selon [Zhu 2007]

où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur gradient, \vec{g} est l'accélération de gravité et \vec{F}_{f-s} est la force de volume d'interaction fluide-solide. Dans ces équations, les variables sont la porosité, la pression et la vitesse moyennes du fluide. Ces équations indiquent que la viscosité du fluide est négligée mais elle peut intervenir dans le calcul de la force d'interaction \vec{F}_{f-s} . Dans cette approche, les calculs relatifs au fluide sont faits à travers une discrétisation de l'espace en cellules de taille beaucoup plus grande que la taille des grains mais qui reste faible relativement aux dimensions du problème modélisé. La procédure du couplage peut être décrite de la façon suivante : à chaque pas de temps, les positions et vitesses des grains sont obtenues à partir du modèle d'éléments discrets, les porosités et les forces d'interaction (\vec{F}_{f-s}) sont alors évaluées pour chaque cellule, ensuite les équations (3) et (4) sont utilisées pour calculer les vitesses et les pressions, enfin les forces de traînée sont recalculées et introduites dans le modèle d'éléments discrets. L'interaction fluide-solide étant prise en compte à travers la force volumique d'interaction (\vec{F}_{f-s}), celle-ci s'obtient à partir des forces de traînée qui sont calculées à travers des relations semi-empiriques telle que la relation d'Ergun (Eq. 1). La procédure du couplage est schématisée sur la figure 1.

La grande taille des cellules de calcul du fluide par rapport à la taille des grains, confère à cette approche une commodité pratique considérable. De ce fait, elle a été largement utilisée dans la simulation des problèmes faisant intervenir l'interaction fluide-

grains. Une revue détaillée sur la méthode, ses applications et résultats est présentée dans les références [Zhu 2007, Zhu 2008]. En particulier, dans le domaine de la géotechnique, cette méthode a été utilisée par Zeghal et El-shamy [Zeghal 2008] pour l'analyse de la liquéfaction des sables. L'évolution des pressions interstitielles ainsi que les contraintes effectives dans un dépôt de sphères soumis à une vibration à la base est étudiée et des résultats intéressants sont obtenus.

Néanmoins, la discrétisation grossière utilisée dans cette approche pour le fluide, ne permet pas une description détaillée des écoulements intergranulaires, puisque seules les valeurs moyennes de vitesse et de pression sont calculées pour chaque cellule. Par conséquent, certains détails micromécaniques ayant des effets sur le comportement global ne peuvent être pris en compte². D'autre part, les relations semi-empiriques utilisées pour le calcul des forces de traînée sont de nature approchée et peuvent réduire la qualité de la modélisation, en particulier pour des variations importantes de la porosité.

Une modélisation plus rigoureuse de l'interaction fluide-grains, peut être réalisée à travers les méthodes de résolution numérique directe des équations de Navier-Stokes (DNS). Dans ce cas le domaine du fluide (les pores du milieu) est discrétisé de façon détaillée. Plusieurs chercheurs ont oeuvré pour le développement d'un couplage efficace DNS-DEM. En se basant sur les travaux de Glowinski [Glowinski 2000] et Patankar et ses co-auteurs [Patanekar 2000, Patankar 2001, Sharma 2005], Wachs [Wachs 2009] a développé un modèle couplé DNS-DEM qui utilise une discrétisation par éléments finis et qui permet la simulation de l'hydromécanique des milieux granulaires saturés. Ce modèle a été employé ensuite pour la simulation 2D de la sédimentation de grains solides de différentes formes dans une colonne de fluide. Ces simulations semblent être de très bonne qualité. Néanmoins, la modélisation 3D utilisant de telles discrétisations demande beaucoup de calculs et reste très coûteuse.

Mises à part les approches basées sur la loi de Darcy et les équations de Navier-Stokes, la méthode Lattice-Boltzmann (LBM) développée pour la modélisation des fluides ces trois dernières décennies, permet la description détaillée des écoulements intergranulaires. Cette méthode, qui part d'une discrétisation spéciale de l'équation de Boltzmann, semble être moins coûteuse, de plus, elle a montré des capacités considé-

2. A titre indicatif, l'effet de rotation des grains reste difficile à prendre en compte.

rables en modélisation des écoulements à travers des milieux poreux tels que les sols. Le couplage de cette méthode avec des méthodes du type DEM est de nos jours en plein développement. C'est dans ce contexte que s'inscrivent les travaux envisagés dans cette thèse. Il s'agit de construire et mettre en oeuvre un couplage des deux méthodes "Eléments Discrets" et "Lattice-Boltzmann".

Présentation du mémoire

L'objectif final de cette thèse est d'aboutir à un outil de simulation numérique visant une contribution à la compréhension de certains comportements hydromécaniques de matériaux granulaires saturés. Cet outil sera fondé sur un couplage des deux méthodes "Eléments Discrets" et "Lattice-Boltzmann". Ainsi, en étapes préliminaires, ces méthodes sont d'abord étudiées afin de développer des codes de calcul permettant la simulation des milieux granulaires secs (sans fluide), et des écoulements de fluide dans des géométries fixes (squelette solide indéformable). Afin de pouvoir simuler le comportement mécanique des milieux granulaires saturés, il est d'abord procédé au développement de la stratégie de couplage des deux méthodes qui permet de prendre en compte l'interaction des deux phases "grains solides" et "fluide saturant". Un code de calcul prenant en charge ce couplage est enfin mis au point. Les résultats de ces travaux ont été partiellement publiés [Mansouri 2009, Mansouri 2011]

Ce mémoire est divisé en six chapitres. Dans le premier chapitre, après une recherche bibliographique qui a permis de faire le choix de la dynamique moléculaire comme méthode par éléments discrets à utiliser dans ce travail, une description détaillée avec tous les éléments nécessaires à la mise oeuvre de cette méthode est présentée.

Afin de faciliter la connexion avec les parties suivantes de la thèse liées à la dynamique des fluides, le deuxième chapitre présente quelques concepts et définitions relatifs aux écoulements des fluides avec un rappel sommaire des équations de base de la dynamique des fluides.

La méthode Lattice-Boltzmann est présentée au troisième chapitre, les éléments essentiels qui permettent de mettre en oeuvre la méthode notamment les schémas de discrétisation, l'algorithme de calcul, les conditions aux frontières de base et la

procédure du calcul des forces hydrodynamiques sont présentés.

En quatrième chapitre, après une étude paramétrique sur l'écoulement de poiseuille, sont présentées des applications du code de calcul dynamique des fluides réalisé, aux écoulements à travers des dépôts granulaires modèles. Ces dépôts sont construits en utilisant la DEM. En particulier, le calcul de la perméabilité et l'estimation du gradient hydraulique critique d'un dépôt granulaire sont traités.

Le cinquième chapitre est dédié à la présentation de la procédure du couplage des deux méthodes avec tous les aspects nécessaires pour sa mise en oeuvre, et le sixième chapitre présente des validations du modèle couplé, suivies d'une application à la simulation du phénomène de boulangerie des sables.

Le mémoire se termine par une conclusion générale récapitulant l'essentiel des résultats obtenus à partir de toutes les applications, ainsi que les perspectives de ces travaux à court et à moyen terme.

Méthodes aux Éléments Discrets

pour la modélisation des grains

solides

Sommaire

1.1	Introduction	10
1.2	Description de la dynamique moléculaire	11
1.2.1	Éléments de description cinématique du milieu granulaire	12
1.2.2	Lois d'interaction	14
1.2.2.1	Loi d'interaction pour la force normale	15
1.2.2.2	Loi d'interaction pour la force tangentielle	17
1.2.2.3	Résistance au roulement	18
1.2.2.4	Choix des constantes et coefficients intervenants dans les lois d'interaction	19
1.2.3	Intégration des équations de mouvement	20
1.2.3.1	Algorithme “ <i>Predictor-Corrector</i> ”	20
1.2.3.2	Algorithme “ <i>Velocity-Verlet</i> ” :	22
1.2.4	Détection des contacts	23
1.2.5	Conditions aux frontières	24
1.2.6	Contrainte intergranulaire moyenne	25

1.1 Introduction

Les approches de modélisation par éléments discrets considèrent les grains du milieu granulaire indépendamment les uns des autres, chacun des grains est un élément qui interagit avec ses voisins à travers les points de contacts. Il est supposé que la déformation globale du milieu est due principalement aux mouvements relatifs des grains considérés comme des corps rigides. La déformation des grains est supposée négligeable. Le comportement global du milieu peut ainsi être décrit par intégration des équations de mouvement de chacun des éléments. Ces équations s'écrivent à partir de la 2^e loi de Newton en tenant compte de toutes les forces extérieures, telles que les forces de gravité, les forces dues à l'écoulement d'un fluide (hydrodynamiques ou aérodynamiques) et les forces d'interaction aux contacts. Ces forces peuvent varier rapidement avec le temps (notamment les forces de contact), l'intégration se conduit ainsi incrémentalement à petits pas de temps. Cette approche dite Newtonienne comporte deux classes principales de méthodes :

- les méthodes *Smooth-DEM* qui admettent une certaine déformation des grains pour lesquelles, les forces de contact sont calculées en utilisant des modèles d'interaction explicites en terme de la déformation des grains (et éventuellement de ses dérivées). Les méthodes de ce type sont souvent connues sous le nom de *Dynamique Moléculaire*(DM). Cundall et ses coauteurs sont les premiers qui ont appliqué cette approche aux solides granulaires [Cundall 1979], [Jekins 1989].
- les méthodes *Non Smooth-DEM* basées sur la mécanique non régulière, qui considèrent les chocs entre les grains en se basant sur le principe de conservation des quantités de mouvement et en utilisant des règles de dissipation d'énergie. Ces méthodes sont particulièrement adaptées pour la description des systèmes dynamiques. Parmi les méthodes de ce type, on peut citer la méthode *Event Driven* (ED) qui ne gère qu'une seule interaction à la fois en supposant qu'à chaque instant il se produit au plus une seule collision dans tous le système, cette méthode est utilisée essentiellement pour la simulation des systèmes dilués tels que les gaz. Pour les systèmes de corps où plusieurs interactions peuvent intervenir simultanément (systèmes denses), la méthode *Dynamique des Contacts* (DC), initiée par

Moreau et ses coauteurs ([Moreau 1994], [Radjai 1998], [Jean 1999]) est mieux adaptée.

Il faut signaler que le pas de temps d'intégration pour les méthodes de type *Non Smooth-DEM* est beaucoup plus grand que celui des méthodes *Smooth-DEM*, puisque pour ces dernières, la précision du calcul des forces de contact exige que la durée d'un contact doit être discrétisée en un nombre suffisant de pas de temps. En conséquence, ces méthodes sont plus coûteuses en temps de calcul. Néanmoins, les méthodes de type *Smooth-DEM*, ont la faculté d'être flexibles et adaptables à plus de problèmes puisqu'il est plus simple d'obtenir des modèles d'interaction réguliers.

Pour notre cas, l'objectif étant de coupler un modèle en éléments discrets avec un modèle pour les écoulements d'un fluide inter-granulaire. Les calculs liés au fluide représentent la partie la plus consommatrice de temps, donc le gain que peut apporter une méthode du type *Non Smooth-DEM* pour la simulation des grains solides est négligeable. De plus, les méthodes de type *Smooth-DEM* permettent d'intégrer plus facilement des lois d'interaction pour tenir compte des différentes forces qui peuvent intervenir aux contacts telles que les forces de lubrification par exemple. En conséquence, une approche *Smooth-DEM* est choisie.

Ainsi, la partie suivante est consacrée, à la description de la méthode *Dynamique Moléculaire*, que nous utiliserons dans la suite de ce travail.

1.2 Description de la dynamique moléculaire

Bien que les grains que l'on rencontre dans les milieux granulaires naturels tels que les sols ont des formes très diverses, nous les supposons, dans un but de simplification, sphériques en 3D et circulaires en 2D. Les mouvements de translation et de rotation d'un grain quelconque i sont gouvernés par la 2^e loi de Newton :

$$\begin{cases} m_i \vec{x}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}^{contact} + \vec{F}_{hi} + m_i \vec{g} & (a) \\ I_i \vec{\varphi}_i = \sum_j \vec{M}_{ij}^{contact} + \vec{M}_{hi} & (b) \end{cases} \quad (1.1)$$

où m_i et I_i sont la masse et le moment d'inertie du grain, \vec{x}_i et $\vec{\varphi}_i$ sont les accé-

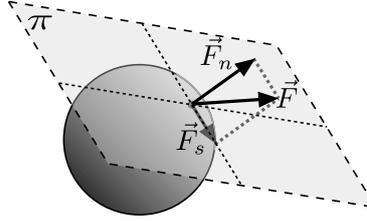


FIGURE 1.1 – Composantes normale et tangentielle de la force de contact

lérations en translation et en rotation, $\vec{F}_{ij}^{contact}$ est la force d'interaction appliquée par un grain j en contact avec le grain i , \vec{F}_{hi} est la force hydrodynamique appliquée au grain i , \vec{g} est l'accélération de gravité. $\vec{M}_{ij}^{contact}$ et \vec{M}_{hi} sont les moments provoqués par rapport au centre de gravité du grain i par les forces de contact $\vec{F}_{ij}^{contact}$ et la force hydrodynamique \vec{F}_{hi} respectivement.

La force d'interaction au contact est décomposée en deux composantes, une composante normale \vec{F}_n et une composante tangentielle \vec{F}_s comprise dans le plan π tangent au grain au point de contact (figure 1.1). Cette décomposition a pour but de simplifier l'évaluation de la force d'interaction, en effet le calcul de chaque composante (\vec{F}_n ou \vec{F}_s) se fait habituellement selon une loi d'interaction appropriée. L'orientation de la force tangentielle \vec{F}_s est donnée par la direction de la vitesse tangentielle relative entre les deux grains au moment du contact.

En dynamique moléculaire, il est supposé que les grains admettent une légère déformation sous l'effet des forces de contact. En conséquence, ces forces peuvent être calculées à travers des lois explicites en terme de la déformation. Toutefois, cette déformation doit être assez faible de sorte que la déviation des formes originales soit négligeable.

1.2.1 Eléments de description cinématique du milieu granulaire

Le mouvement des éléments discrets (grains) est décrit par rapport à un repère cartésien global $\mathcal{R}^{glob}(O, \vec{e}_X, \vec{e}_Y, \vec{e}_Z)$ d'origine O et de base orthonormée directe $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y, \vec{e}_Z)$. Pour un grain i , on note G_i le centre de masse, r_i le rayon, $\vec{x}_i = \overrightarrow{OG_i}$ la position du centre de masse, $\vec{u}_i = \vec{u}(G_i) = \frac{d\vec{x}_i}{dt}$ la vitesse de translation et $\vec{\omega}_i = \frac{d\vec{\varphi}_i}{dt}$ la vitesse angulaire autour du centre G_i (figure 1.2a). Le point de contact entre deux

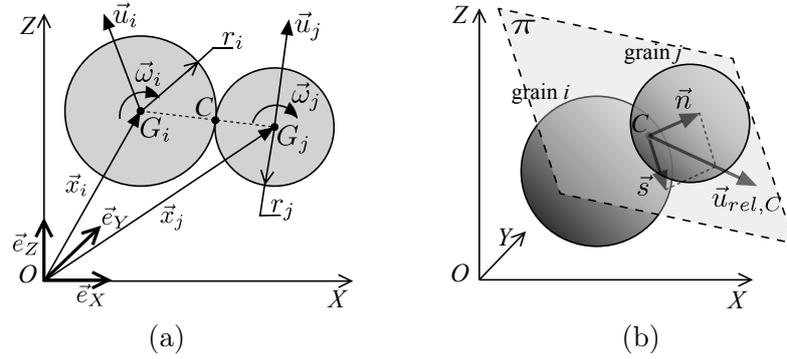


FIGURE 1.2 – (a) Description cinématique du milieu granulaire, (b) Repère local de contact

grains est noté C .

La distance normale séparant deux grains i et j notée D_n est définie géométriquement par :

$$D_n = \|\vec{x}_j - \vec{x}_i\| - r_i - r_j \quad (1.2)$$

Le calcul de cette distance permet de détecter s'il y a contact ou non. Du fait de la compressibilité supposée des grains, D_n peut être négative, dans ce cas elle est appelée *interpénétration*. Un contact est donc établi si $D_n \leq 0$.

Lorsqu'il y a contact entre deux grains i et j , les forces d'interaction normale et tangentielle appliquées au grain i sont calculées selon les lois d'interaction, puis projetées dans le repère global pour être introduites dans les équations du mouvement. Il est donc utile de définir un repère local de contact lié au grain i ; $\mathcal{R}_i^{loc}(C, \vec{n}, \vec{s})$ où \vec{n} est la normale sortante, \vec{s} est le vecteur unité compris dans le plan tangentiel π , sa direction est celle de la composante tangentielle de vitesse relative du grain j par rapport au grain i au point de contact $\vec{u}_{rel,C}$ (figure 1.2b).

Le vecteur \vec{n} étant de même direction que le vecteur branche $\overrightarrow{G_i G_j} = \vec{x}_j - \vec{x}_i$ (vecteur inter-centre des grains i et j), il peut être donc défini par :

$$\vec{n} = \frac{\vec{x}_j - \vec{x}_i}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} \quad (1.3)$$

Au moment du contact, les vitesses du point de contact C considéré comme appartenant à la surface du grain i puis comme appartenant à la surface du grain j

s'écrivent :

$$\begin{cases} \vec{u}_{C,i} = \vec{u}_i + \vec{\omega}_i \wedge \overrightarrow{G_i C} \\ \vec{u}_{C,j} = \vec{u}_j + \vec{\omega}_j \wedge \overrightarrow{G_j C} \end{cases} \quad (1.4)$$

En tenant compte du fait que $\overrightarrow{G_i C} = r_i \vec{n}$ et $\overrightarrow{G_j C} = -r_j \vec{n}$, la vitesse relative du grain j par rapport au grain i au point de contact est :

$$\vec{u}_{rel,C} = \vec{u}_{C,j} - \vec{u}_{C,i} = \vec{u}_j - \vec{u}_i - (r_j \vec{\omega}_j + r_i \vec{\omega}_i) \wedge \vec{n} \quad (1.5)$$

Les composantes normale et tangentielle de la vitesse relative sont :

$$\begin{cases} V_n = \vec{u}_{rel,C} \cdot \vec{n} \\ V_s = \|\vec{u}_{rel,C} - (\vec{u}_{rel,C} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}\| \end{cases} \quad (1.6)$$

Le vecteur \vec{s} s'exprime sous la forme :

$$\vec{s} = \frac{\vec{V}_s}{V_s} = \frac{\vec{u}_{rel,C} - (\vec{u}_{rel,C} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}}{\|\vec{u}_{rel,C} - (\vec{u}_{rel,C} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}\|} \quad (1.7)$$

Il faut noter que lorsque la composante tangentielle de la vitesse relative est nulle, le vecteur \vec{s} ne peut être déterminé à partir de l'expression 1.7. Dans ce cas, il n'est même pas utile de le définir, puisque la composante tangentielle de la force d'interaction \vec{F}_s est nulle, sa projection dans le repère global est donc automatiquement nulle.

On peut remarquer enfin que selon cette convention, la vitesse relative normale V^n est positive si les deux grains s'éloignent.

1.2.2 Lois d'interaction

Il s'agit des lois permettant de calculer les forces d'interaction au contact de deux grains ou bien au contact d'un grain avec un mur extérieur. La modélisation complète d'un contact est assez complexe et peut conduire à des lois d'interaction coûteuses en matière de temps de calcul. En effet dans la simulation des milieux granulaires, ces lois sont utilisées à chaque pas de temps pour tous les contacts, ce qui augmente rapidement le nombre d'opérations de calcul. Par conséquent, les modèles simples sont souvent

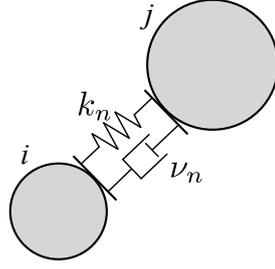


FIGURE 1.3 – Modèle de force de contact normale utilisé

favorisés tant qu'ils ne s'écartent pas beaucoup de la description du comportement réel.

1.2.2.1 Loi d'interaction pour la force normale

Le modèle d'interaction entre deux sphères le plus fameux est due à Hertz (1882) [Johnson 1985], il est basé sur la théorie de l'élasticité linéaire. D'autres modèles sont proposés par la suite afin de tenir compte de la nature non-linéaire et/ou plastique du comportement du matériau aux points de contact, une étude détaillée de ces modèles peut être retrouvée dans les références [Schäfer 1996], [Stevens 2005], [Kruggel-Emden 2007]. Dans le présent travail un modèle simple est adopté, il s'agit du modèle viscoélastique linéaire utilisé initialement par Cundall et Strack [Cundall 1979] (figure 1.3). La force normale d'interaction est la superposition d'une force élastique linéaire et d'une autre dissipative visqueuse. Cette force est répulsive et a pour expression :

$$F_n = -k_n D_n - \nu_n V_n \quad (1.8)$$

où k_n est la constante élastique et ν_n est la constante d'amortissement visqueux.

Tant que le contact persiste, le système peut être vu comme un oscillateur harmonique amorti de masse effective $m_{eff} = m_i m_j / (m_i + m_j)$, m_i et m_j étant les masses des deux grains en contact. La durée d'un contact t_c est la moitié de la période naturelle de l'oscillateur et peut être exprimée :

$$t_c = \frac{\pi}{\sqrt{(k_n/m_{eff}) - (\nu_n/2m_{eff})^2}} \quad (1.9)$$

Cette durée de contact t_c a une importance pratique, en effet l'intégration des

équations de mouvement n'est stable que si le pas de temps d'intégration Δt est suffisamment faible devant t_c , en d'autres termes l'évolution du contact doit être bien décrite. Dans le cas contraire des instabilités de calcul peuvent se produire à cause de la détection tardive ou même la non détection des contacts. Pour éviter ces instabilités, il est courant de discrétiser la durée du contact t_c au moins en dix pas de temps [Richefeu 2005] :

$$\Delta t \leq \frac{t_c}{10} \quad (1.10)$$

La présence de l'amortissement visqueux a pour effet de réduire la valeur de la vitesse relative normale des grains entre le début et la fin du contact. Cette réduction est quantifiée par le coefficient de restitution qui est défini comme le rapport entre la vitesse de séparation (vitesse de rebondissement) V_{ns} et la vitesse d'initiation du contact (vitesse d'impact) V_{n0} , il s'exprime dans ce cas :

$$\varepsilon_n = \frac{V_{ns}}{V_{n0}} = \exp\left(-\frac{\pi\nu_n}{\sqrt{4k_n m_{eff} - \nu_n^2}}\right) \quad (1.11)$$

et qui a pour valeur $0 \leq \varepsilon_n \leq 1$. Lorsque $\nu_n = 0$, $\varepsilon_n = 1$, la collision est parfaitement élastique. Il faut noter que cette expression donne un coefficient de restitution indépendant de la vitesse d'impact V_{n0} .

Le coefficient de restitution est une grandeur mesurable expérimentalement, ainsi en pratique, il est courant d'introduire en données le coefficient de restitution ε_n au lieu de la constante d'amortissement ν_n , cette constante peut être calculée ensuite à partir de la relation :

$$\nu_n = -\frac{2\ln\varepsilon_n\sqrt{k_n m_{eff}}}{\sqrt{\pi^2 + (\ln\varepsilon_n)^2}} \quad (1.12)$$

Notons que l'expression (1.8) peut donner une force normale attractive à la fin d'un contact. En effet, dans ce cas l'interpénétration D_n devient faible devant la vitesse normale V_n qui est de signe positif (séparation). Il résulte ainsi une sorte de cohésion au moment de la fin du contact qui n'existe pas en réalité pour les milieux non cohésifs. Pour corriger, la valeur de F_n n'est prise en compte que si elle est positive, l'expression

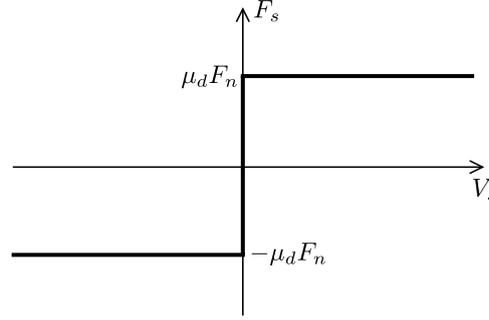


FIGURE 1.4 – Modèle de la force de contact tangentielle

(1.8) est substituée donc par :

$$F_n = \begin{cases} -k_n D_n - \nu_n V_n & \text{si } F_n > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.13)$$

1.2.2.2 Loi d'interaction pour la force tangentielle

Comme pour la composante normale de la force d'interaction, il existe plusieurs modèles pour la composante tangentielle, une étude détaillée de ces modèles peut être retrouvée dans les références [Schäfer 1996], [Stevens 2005], [Kruggel-Emden 2008]. L'un des modèles souvent utilisé pour la simulation des phénomènes dynamiques se base sur la loi de frottement de Coulomb, qui stipule que si la vitesse relative tangentielle n'est pas nulle la force d'interaction tangentielle est proportionnelle à la force normale F_n . Le coefficient de proportionnalité étant le coefficient de frottement dynamique μ_d .

La force tangentielle appliquée par un grain j sur le grain i est orientée dans la direction de la vitesse relative tangentielle (suivant le vecteur \vec{s}), elle s'exprime donc comme suit (voir figure 1.4) :

$$\vec{F}_s = \mu_d F_n \vec{s} \quad (1.14)$$

Il est évident que ce modèle est mal adapté aux cas statiques ou quasi-statiques puisque la force tangentielle ne peut pas être définie lorsque la vitesse tangentielle s'annule. Pour ces cas il faut recourir à des modèles plus compliqués où le déplacement relatif tangentiel est pris en considération dans le calcul de la force tangentielle.

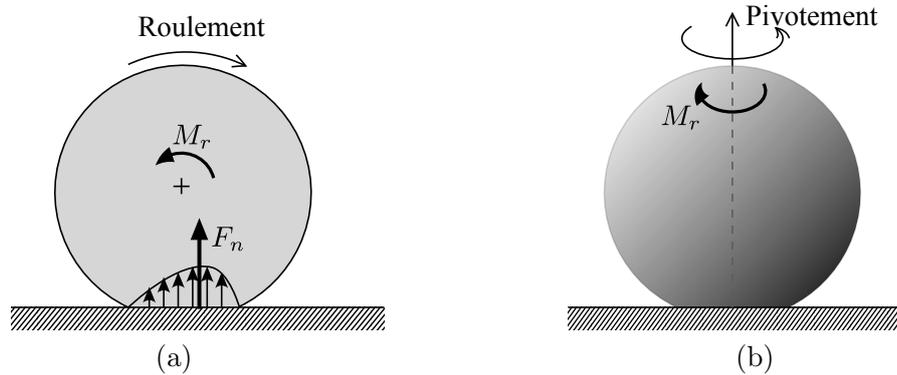


FIGURE 1.5 – (a) Illustration schématique de la résistance au roulement, (b) Pivotement

Etant donné que l'objectif visé dans ce travail est la simulation de phénomènes dynamiques, la loi de Coulomb est ainsi choisie pour sa simplicité d'implémentation et pour son économie en temps de calcul.

1.2.2.3 Résistance au roulement

Pour un grain de forme sphérique, il est courant de considérer que le mouvement de rotation est produit par les forces tangentielles de contact ainsi que d'éventuelles forces tangentes extérieures telles que les forces hydrodynamiques. Les composantes normales aux contacts ne sont pas considérées en admettant que les contacts sont ponctuels. Avec cette modélisation le mouvement de roulement n'est pas amorti. A titre d'illustration si un grain mis sur un plan horizontal, acquiert un mouvement de roulement uniforme rien n'amortit son mouvement et en conséquence il ne s'arrête jamais.

En réalité, un contact n'est jamais ponctuel, mais il se fait plutôt sur une surface, et ce à cause de l'état de surface du grain (présence d'aspérités) ou bien de sa déformation. La distribution non uniforme des contraintes normales sur cette surface fait que leur résultante (force normale de contact) peut produire un moment sur le grain (figure 1.5(a)).

Cette résultante naturellement décalée vers la direction du mouvement [Zhu 2003] produit un moment résistant aux roulements M_r qui a effet d'amortissement. La discussion faite ici au cas du roulement d'un grain sur plan est valable aussi pour le roulement d'un grain sur l'autre.

Dans le cas 3D, en plus du mouvement de roulement, une sphère peut faire aussi

un mouvement de pivotement pour lequel l'amortissement doit être considéré (figure 1.5(b)).

La quantification de l'amortissement de roulement et de pivotement reste un problème complexe. Pour la simulation de phénomènes dynamiques Zhu et Yu [Zhu 2003] proposent une loi phénoménologique exprimant la résistance au roulement ou au pivotement comme suit ; sur un grain i le moment amortissant de roulement ou de pivotement provoqué par un contact est :

$$\vec{M}_r = -\min(\mu_r F_n, \mu'_r \|\vec{\omega}'_i\|) \frac{\vec{\omega}'_i}{\|\vec{\omega}'_i\|} \quad (1.15)$$

où $\vec{\omega}'_i$ est la vitesse angulaire relative de roulement du grain i , elle s'exprime dans le cas général du roulement du grain i sur un grain j : $\vec{\omega}'_i = \vec{\omega}_i - \vec{\omega}_j$, μ_r est le coefficient de frottement de roulement et μ'_r est un coefficient d'amortissement visqueux de rotation. Les auteurs suggèrent de prendre un coefficient de frottement $\mu_r = 0.004d$ à $0.006d$, où d est le diamètre du grain.

1.2.2.4 Choix des constantes et coefficients intervenants dans les lois d'interaction

Le choix des constantes et coefficients à prendre en compte pour une simulation numérique d'un phénomène donné reste difficile. En effet, ces grandeurs dépendent de paramètres multiples, notamment des propriétés mécaniques des matériaux, de la vitesse de choc, de la taille et de l'état de surface des grains ainsi que d'autres paramètres.

Dans la pratique de la simulation il est ainsi courant de choisir ces constantes et coefficients de façon à approcher le comportement réel du problème traité. Toutefois une importance particulière est donnée à la raideur élastique k_n , du fait qu'elle est d'un effet déterminant sur le pas de temps d'intégration Δt . En effet elle doit être choisie suffisamment élevée pour éviter des interpénétrations importantes qui peuvent compromettre la qualité de la modélisation, mais pas trop élevée pour donner un pas de temps pas trop petit conduisant à un ralentissement considérable de la simulation.

1.2.3 Intégration des équations de mouvement

Les forces qui agissent sur les grains varient avec le temps d’une façon complexe, en effet, il y a des contacts qui disparaissent, d’autres qui s’établissent, des variations rapides des forces des fluides entourants ...etc. En conséquence l’intégration des équations de mouvement (Eqs. 1.1) nécessite des méthodes numériques incrémentales avec un pas de temps Δt suffisamment petit. L’idée de ces méthodes est : connaissant les positions, les vitesses et autres variables dynamiques d’un grain à l’instant t , il faut essayer de les estimer à l’instant $(t + \Delta t)$ avec une précision satisfaisante.

Nous décrivons deux méthodes permettant de calculer la trajectoire du grain numériquement, notamment l’algorithme “*predictor-corrector*” de Gear et l’algorithme “*Velocity-Verlet*”.

Les développements qui seront présentés dans la suite concernent le mouvement de translation, des expressions similaires peuvent être écrites pour le mouvement de rotation.

1.2.3.1 Algorithme “*Predictor-Corrector*”

D’un point de vue mathématique, il est supposé que la trajectoire du grain est continue, les variables dynamiques du grain peuvent donc être estimées à l’instant $(t + \Delta t)$ à partir d’un développement limité de Taylor à l’instant t :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x}^p(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{\dot{x}}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{\ddot{x}}(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}}(t) + \dots \\ \vec{\dot{x}}^p(t + \Delta t) = \vec{\dot{x}}(t) + \Delta t \vec{\ddot{x}}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}}(t) + \dots \\ \vec{\ddot{x}}^p(t + \Delta t) = \vec{\ddot{x}}(t) + \Delta t \vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}}(t) + \dots \\ \vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}}^p(t + \Delta t) = \vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}}(t) + \dots \end{array} \right. \quad (1.16)$$

avec $\vec{\dot{x}} = \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \vec{u}$, $\vec{\ddot{x}} = \frac{\partial^2 \vec{x}}{\partial t^2}$ et $\vec{\overset{\cdot\cdot\cdot}{x}} = \frac{\partial^3 \vec{x}}{\partial t^3}$.

L’ordre du développement (ici 4 termes) peut être augmenté ou diminué selon la précision souhaitée. La taille mémoire mise en jeu et le nombre d’opérations de calcul augmentent évidemment avec l’augmentation du nombre de termes retenus. L’exposant “ p ” indique les valeurs prédites des différentes variables (position, vitesse, ...etc.) à

l'instant $t + \Delta t$. Ces valeurs doivent être corrigées puisque les forces agissantes sur le grain évoluent entre les instants t et $t + \Delta t$.

En utilisant les valeurs prédites à l'instant $t + \Delta t$, les forces extérieures sont calculées (notamment les forces de contact sont calculées à partir des expressions 1.13 et 1.14). L'équation de mouvement (1.1a) est ensuite utilisée pour déterminer l'accélération corrigée $\vec{x}^c(t + \Delta t)$. La différence entre les valeurs corrigée et prédite de l'accélération $\Delta\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}^c(t + \Delta t) - \vec{x}^p(t + \Delta t)$, donne une première approximation de l'erreur sur l'accélération prédite. Cette erreur est utilisée pour corriger les valeurs prédites de toutes les variables dynamiques comme suit [Allen 1987] :

$$\begin{cases} \vec{x}^c(t + \Delta t) = \vec{x}^p(t + \Delta t) + c_0 A_0 \Delta\vec{x}(t + \Delta t) \\ \dot{\vec{x}}^c(t + \Delta t) = \dot{\vec{x}}^p(t + \Delta t) + c_1 A_1 \Delta\vec{x}(t + \Delta t) \\ \ddot{\vec{x}}^c(t + \Delta t) = \ddot{\vec{x}}^p(t + \Delta t) + c_2 A_2 \Delta\vec{x}(t + \Delta t) \\ \vec{x}^c(t + \Delta t) = \vec{x}^p(t + \Delta t) + c_3 A_3 \Delta\vec{x}(t + \Delta t) \end{cases} \quad (1.17)$$

où c_0, c_1, c_2, c_3 sont les coefficients de correction de Gear et A_0, A_1, A_2, A_3 sont des facteurs tenant compte de l'adaptation de la correction à la variable considérée ; $A_0 = \frac{\Delta t^2}{2}, A_1 = \frac{\Delta t}{2}, A_2 = 1, A_3 = \frac{3}{\Delta t}$.

Les coefficients de correction proposés par Gear pour un optimum entre la précision et la stabilité des calculs, pour les différents ordres de développements sont donnés dans le tableau suivant :

Nombre de termes du développement	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
3	0	1	1			
4	$\frac{1}{6}$	$\frac{5}{6}$	1	$\frac{1}{3}$		
5	$\frac{19}{120}$ (ou $\frac{19}{90}$)	$\frac{3}{4}$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}$	
6	$\frac{3}{20}$ (ou $\frac{3}{16}$)	$\frac{251}{360}$	1	$\frac{11}{18}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{60}$

Pour les développements d'ordres 5 et 6 les facteurs supplémentaires d'adaptation de la correction sont : $A_4 = \frac{12}{\Delta t^2}$ et $A_5 = \frac{60}{\Delta t^3}$.

Les valeurs du coefficient c_0 données entre parenthèses sont à utiliser lorsque la résultante des forces extérieures évaluée à chaque pas de temps dépend de la vitesse en plus de la position.

Notons enfin qu'il est possible de refaire l'étape de correction plus d'une fois en affectant à chaque fois aux valeurs prédites les dernières valeurs corrigées. Néanmoins une seule correction est généralement satisfaisante.

1.2.3.2 Algorithme “*Velocity-Verlet*” :

C'est une version modifiée de l'algorithme adopté initialement par Verlet (1967) [Allen 1987]. Cet algorithme est attractif, du fait qu'il est simple et qu'il nécessite peu d'opérations de calcul. Les variables dynamiques qu'il faut stocker à chaque pas de temps t sont les positions $\vec{x}(t)$, les vitesses $\vec{u}(t)$ et les accélérations $\vec{x}''(t)$ ($9N$ variables, N étant le nombre de grains). L'accélération $\vec{x}''(t)$ qui est calculée à partir de l'équation de mouvement (1.1a) en connaissant la résultante des forces agissantes sur le grain en un instant t , est supposée constante durant l'intervalle de temps $[t - \frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}]$. La position et la vitesse d'un grain à l'instant $t + \Delta t$ sont alors exprimées par :

$$\begin{cases} \vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{u}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{x}''(t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2}) \\ \vec{u}(t + \Delta t) = \vec{u}(t) + \Delta t \frac{[\vec{x}''(t) + \vec{x}''(t + \Delta t)]}{2} \end{cases} \quad (1.18)$$

L'algorithme se présente ainsi en pratique comme suit :

- Calcul de la vitesse à l'instant $t + \frac{\Delta t}{2}$; $\vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \vec{u}(t) + \frac{\Delta t}{2} \vec{x}''(t)$
- Calcul de la position à l'instant $t + \Delta t$; $\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2})$
- Calcul de la résultante des forces agissantes sur le grain $(\sum \vec{F}^{ext})_{t+\Delta t}$ en utilisant les nouvelles positions $\vec{x}(t + \Delta t)$ et éventuellement les nouvelles vitesses $\vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2})$
- Calcul de l'accélération à l'instant $t + \Delta t$; $\vec{a}(t + \Delta t) = \frac{(\sum \vec{F}^{ext})_{t+\Delta t}}{m}$
- Calcul de la vitesse à l'instant $t + \Delta t$; $\vec{u}(t + \Delta t) = \vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\Delta t}{2} \vec{x}''(t + \Delta t)$

Cet algorithme est équivalent à l'algorithme “*Predictor-corrector*” pour un ordre de développement de 3 termes, lorsque la force calculée à chaque pas est indépendante de la vitesse. Lorsque la force dépend de la vitesse, l'algorithme fait intervenir une erreur théoriquement, puisque la vitesse utilisée dans le calcul de la force à l'instant $t + \Delta t$ est $\vec{u}(t + \frac{\Delta t}{2})$ correspondante à l'instant $t + \frac{\Delta t}{2}$. Cependant l'expérience montre que cette erreur a très peu d'effet sur le comportement global [Taberlet 2005]. Pour vérifier ce fait, l'exemple de chute d'une bille sous l'effet de la gravité sur un plan horizontal est

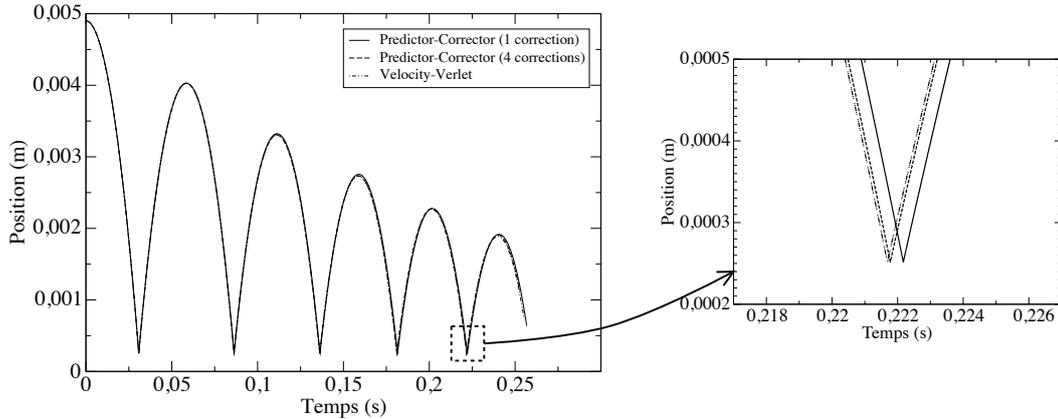


FIGURE 1.6 – Position d’une bille en chute sur un plan horizontal en fonction du temps ; comparaison des différents algorithmes

étudié en utilisant les deux algorithmes. La figure 1.6 montre l’évolution de la position de la bille en fonction du temps, cette position est calculée en utilisant l’algorithme “*Predictor-Corrector*” avec un ordre de développement de 5 termes pour une seule correction puis pour quatre corrections ainsi que l’algorithme “*Velocity-Verlet*”.

La force de contact avec le plan est calculée à partir du modèle viscoélastique linéaire (Eq. 1.13). Le coefficient de restitution est pris $\varepsilon_n = 0.9$. Du fait que la force de contact est fonction de la vitesse, la valeur du coefficient de correction c_0 est prise $\frac{19}{90}$. Comparativement à l’algorithme “*Predictor-Corrector*” à 4 corrections, ce graphique montre que l’algorithme “*Velocity-Verlet*” décrit avec une bonne précision le mouvement de la bille. Il est même plus précis que l’algorithme “*Predictor-Corrector*” à une seule correction (voir l’agrandissement de la 5^e collision avec le plan sur la figure).

Ainsi, en tenant compte de sa précision et de sa simplicité en termes de calculs nous utilisons dans ce travail essentiellement l’algorithme “*Velocity-Verlet*”, l’algorithme “*Predictor-Corrector*” sera réservé pour d’éventuelles vérifications.

1.2.4 Détection des contacts

Les forces de contact sont déterminantes dans la description du mouvement d’un grain. Leur calcul nécessite la recherche préalable de tous les contacts du grain en considération. Une manière directe pour rechercher ces contacts est de calculer la distance normale (Eq. 1.2) du grain avec tous les grains du système. Ainsi, à chaque pas de

temps il faut calculer cette distance pour toutes les paires possibles de grains soit au total $(N(N - 1)/2)$ fois (N étant le nombre de grains). Néanmoins, la majorité de ces calculs ne sont pas nécessaires à chaque pas de temps, puisque pour deux grains éloignés si le contact aura lieu, il ne peut se produire qu'après un nombre considérable de pas de temps.

Une idée pour diminuer le nombre de calculs d'une manière significative est d'utiliser les *listes de Verlet*. En effet pour chaque grain i , on peut associer une *liste de Verlet* (L_i) composée des grains voisins les plus proches ; ce sont les seuls grains avec lesquels les contacts sont recherchés pendant un nombre de pas de temps donné $N_{actuList}$. Ces listes ne sont donc actualisées qu'au bout d'un temps ($N_{actuList} \times \Delta t$).

Les grains j formant la *liste de Verlet* associée au grain i sont tous les grains dont la distance normale avec le grain i est plus faible qu'une distance pré-définie dite *distance de Verlet* (D_{Verlet}), soit :

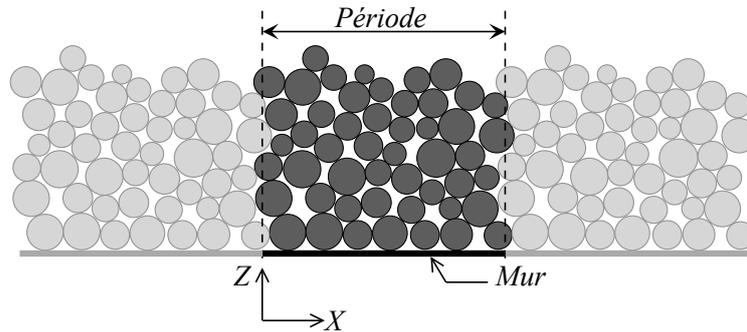
$$j \in L_i \quad \text{si} \quad \|\vec{x}_j - \vec{x}_i\| - r_i - r_j \leq D_{verlet} \quad (1.19)$$

La distance de Verlet (D_{Verlet}) est une petite distance qui peut être choisie librement. Si cette distance est trop faible, le nombre de voisins à considérer pour chaque grain est réduit mais la fréquence d'actualisation des listes doit être augmentée (i.e. $N_{actuList}$ doit être diminué). Sinon, ils peuvent se passer des contacts non percevables entre des grains non reconnus comme voisins. Une manière certaine pour éviter qu'un tel fait se produise, est d'actualiser les listes à chaque fois que l'un des grains de l'échantillon se déplace d'une distance au plus égale à $\frac{1}{2}D_{Verlet}$.

Le choix de la distance de Verlet (D_{Verlet}) dépend de la vitesse des grains dans le phénomène à simuler ainsi que du pas de temps de simulation, elle doit être choisie de façon à obtenir le minimum de temps de calcul.

1.2.5 Conditions aux frontières

Les conditions aux frontières sont parmi les éléments de base qu'il faut définir dans une simulation d'un milieu granulaire. Deux types de conditions sont généralement utilisées notamment les murs fixes ou mouvants et les conditions périodiques. Chacune

FIGURE 1.7 – Système de disques (2D) périodique dans la direction X

de ces conditions est utile pour des applications spécifiques.

La condition de mur peut être imposée en utilisant des lois de calcul des forces d'interaction entre le mur et les grains similaires aux lois d'interaction grain-grain discutées plus haut (Section 1.2.2).

La périodicité est un artefact de calcul utilisé pour réduire la taille du modèle. En effet, lorsque les moyens de calcul ne permettent pas de simuler le problème dans sa taille réelle et / ou le comportement est semblable sur l'ensemble du problème, l'analyse peut être faite à travers la simulation d'un volume élémentaire représentatif supposé à répétition périodique dans l'espace (figure 1.7). Les conditions aux frontières périodiques sont les conditions qui engendrent la duplication du volume élémentaire étudié. Leur principe consiste à réintroduire tout grain qui sort par une frontière du système par la frontière opposée. En conséquence les grains qui se trouvent sur deux frontières opposées sont voisins et peuvent être en contact, dans quel cas il faut considérer les forces d'interactions entre eux.

1.2.6 Contrainte intergranulaire moyenne

Dans certaines situations il se trouve utile de passer de la modélisation micromécanique par éléments discrets d'un milieu granulaire à la modélisation macroscopique par milieu continu équivalent. Ce passage nécessite entre autres la définition du tenseur de contraintes à partir des forces d'interaction intergranulaires. Ce sujet a fait l'objet de nombreuses études et plusieurs définitions des contraintes ont été proposées dans la littérature. Nous nous limitons ici à présenter la définition du tenseur de contrainte don-

née dans la référence [Andreotti 2011], obtenue en utilisant un processus de moyennage des forces intergranulaires.

Pour des problèmes statiques ou quasistatiques de milieux granulaire, la composante $\sigma_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$) du tenseur de contraintes moyen en un point M s'exprime sous la forme :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{n_c=1}^{N_c} F_{\alpha}^{n_c} \ell_{\beta}^{n_c} \quad (1.20)$$

avec V est le volume centré au point M , sur lequel la moyenne de la contrainte est calculée, N_c est le nombre total de contacts dans le volume V , n_c est le numéro du contact, $F_{\alpha}^{n_c}$ est la composante α de la force d'interaction au contact n_c et $\ell_{\beta}^{n_c}$ est la composante β du vecteur $\vec{\ell}$ reliant les centres des deux grains du contact n_c (vecteur branche). Lorsque l'un des grains est à l'extérieur du volume V , le vecteur $\vec{\ell}$ est pris égal à la portion du vecteur branche comprise dans le volume V .

Notions essentielles de dynamique des fluides

Sommaire

2.1	Introduction	27
2.2	Quelques définitions relatives aux fluides et écoulements	28
2.3	Equations de dynamique des fluides	30
2.3.1	Equation de continuité	30
2.3.2	Equations de Navier-Stokes	31
2.3.3	Forme adimensionnelle des équations de Navier-Stokes	31
2.4	Exemple de solution : écoulement de Poiseuille	32

2.1 Introduction

La dynamique des fluides est l'étude du mouvement des fluides, qu'ils soient liquides ou gaz. La résolution d'un problème de dynamique des fluides revient à calculer diverses propriétés du fluide telles que la vitesse, la pression et la température en fonction de l'espace et du temps. Ces calculs se basent principalement sur les lois fondamentales de la physique et de la mécanique, notamment le principe de conservation de masse, le principe de conservation de la quantité de mouvement (2^e loi de Newton) et les lois de la thermodynamique. Les expressions mathématiques de ces lois conduisent aux équations gouvernant la dynamique du fluide, à savoir, l'équation de continuité, les équations de la quantité de mouvement et les équations de l'énergie.

Ce chapitre est dédié à la présentation de quelques notions de base de la dynamique

des fluides dans le but de faciliter la connexion avec les parties suivantes de la thèse. D'abord, quelques concepts et définitions relatifs aux écoulements des fluides sont donnés, puis un rappel sommaire des équations de la dynamique des fluides est présenté et enfin, comme exemple simple des solutions de problèmes de dynamique des fluides, l'écoulement de Poiseuille est traité.

2.2 Quelques définitions relatives aux fluides et écoulements

Les écoulements des fluides peuvent avoir différentes formes dépendantes de la nature du fluide et des conditions entourantes. A titre d'exemples, il est facilement remarquable que l'écoulement d'huile est plus lent que celui de l'eau et que l'écoulement d'eau dans un canal peut être doux en un point mais turbulent en un autre. Afin de distinguer ces différentes situations, il est utile de donner les définitions suivantes :

- *Viscosité, fluides Newtonien et non Newtonien* : La viscosité est une grandeur physique reliant la contrainte de cisaillement à la vitesse de cisaillement, elle mesure donc la résistance à l'écoulement du fluide. Pour de nombreux fluides (eau, gaz ...), la contrainte de cisaillement est proportionnelle à la vitesse de cisaillement, ces fluides sont dits alors fluides *Newtoniens*. La constante de proportionnalité entre la contrainte de cisaillement et la vitesse de cisaillement est appelée *viscosité dynamique* du fluide, elle est notée μ . La *viscosité cinématique* ν est le rapport de la viscosité dynamique à la masse volumique fluide ρ soit :

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (2.1)$$

Pour d'autres fluides tels que les émulsions, la viscosité n'est pas une constante mais dépend de la vitesse de cisaillement, dans ce cas le fluide est dit *non-Newtonien*.

- *Fluide compressible et incompressible* : lorsque dans un écoulement, sous l'effet de la variation de la pression, la masse volumique du fluide change de façon qu'elle ne peut pas être considérée constante, le fluide est dit compressible. Au

contraire, le fluide est dit incompressible si la variation de sa masse volumique peut être considérée négligeable. A titre d'exemples, l'eau en écoulements courants est considérée incompressible, tandis-que les gaz sont généralement considérés compressibles. L'effet de la compressibilité sur les propriétés d'un écoulement est caractérisé par le *Nombre de Mach*, défini comme le rapport de la vitesse de l'écoulement u à la vitesse de propagation du son dans le fluide c_s (i. e. vitesse de propagation des ondes de compression) :

$$Ma = \frac{u}{c_s} \quad (2.2)$$

Dans la pratique, il est courant de négliger les effets de compressibilité pour des nombres de Mach inférieurs à 0,3, en fait ces effets n'excède pas 1% pour $Ma \leq 0,3$ [LeQuéré 2010]. Presque tous les problèmes impliquant des liquides se trouvent dans cette catégorie.

- *Écoulement laminaire et turbulent* : la turbulence est un régime d'écoulement dominée par des recirculations et des fluctuations de vitesses d'un aspect apparent aléatoire. Le régime laminaire est le caractère de l'écoulement du fluide en lames parallèles sans perturbation. Les deux régimes laminaire et turbulent sont étroitement liés au *Nombre de Reynolds* défini par l'expression :

$$Re = \frac{u\mathcal{L}}{\nu} \quad (2.3)$$

Le nombre de Reynolds définit l'importance des forces d'inertie par rapport aux forces résistantes de viscosité, il peut être affirmé qu'un écoulement de nombre de Reynolds très élevé est turbulent par-contre un écoulement à petit nombre de Reynolds est laminaire.

En tenant compte que nous nous intéressons dans le cadre de cette thèse spécialement à la dynamique des sables saturés d'eau qui fait intervenir des écoulements dans des pores interstitiels de petites tailles, Il peut être admis qu'il s'agit d'écoulements de fluide newtonien, incompressible à faibles nombres de Reynolds.

2.3 Equations de dynamique des fluides

Comme il est mentionné plus haut les équations gouvernant la dynamique des fluides s'obtiennent à partir de principes fondamentaux de la physique notamment, les principes de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Comme nous nous intéressons à des écoulements isothermaux, les deux principes de conservation de masse et de quantité de mouvement suffisent pour dériver les équations de mouvement. Ces équations sont présentées dans ce qui suit d'une façon sommaire, les procédures détaillées de leurs dérivation peuvent être retrouvées dans les ouvrages spécialisés comme [Batchelor 1967].

Il convient de noter que les principes de conservation s'appliquent à des volumes élémentaires de fluide. Un volume élémentaire peut être considéré comme un volume infinitésimal dV au sens mathématique, mais suffisamment grand pour contenir un grand nombre de molécules de façon qu'il peut être vu comme un milieu continu.

Le mouvement du fluide est décrit ici par rapport à un référentiel similaire au repère global présenté au chapitre précédent. Cependant, contrairement aux grains solides pour lesquels le mouvement est décrit au sens de Lagrange, l'écoulement du fluide est décrit au sens d'Euler où le vecteur \vec{x} désigne la position d'un volume élémentaire fixe dans l'espace à travers lequel passent les particules du fluide.

Nous notons $\vec{u}(\vec{x}, t)$ le vecteur vitesse, $p(\vec{x}, t)$ la pression et $\rho(\vec{x}, t)$ la masse volumique du fluide.

2.3.1 Equation de continuité

C'est l'équation de conservation de la masse, elle s'obtient en exprimant que la variation de la masse incluse dans le volume est égale à la masse nette qui traverse la surface délimitante. Elle s'écrit en tout point :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.4)$$

où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur divergence ; $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_X + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_Y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_Z$

Pour des raisons de simplicité nous utilisons dans ce qui suit la notation indicielle, l'équation de continuité (Eq.2.4) peut être exprimée :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (2.5)$$

Rappelons que α peut prendre les valeurs 1, 2 ou 3 (i.e. x , y ou z) et $\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = \sum_{\alpha=0}^3 \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha}$

Pour un fluide incompressible la masse volumique est indépendante de la position \vec{x} et du temps t , l'équation de continuité se réduit à :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad \text{ou bien} \quad \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (2.6)$$

2.3.2 Equations de Navier-Stokes

Ce sont les équations de conservation de la quantité de mouvement, elles peuvent être obtenues à partir de la seconde loi de Newton exprimant l'équilibre dynamique d'un élément volumique du fluide. Pour un fluide Newtonien incompressible de viscosité dynamique μ , en l'absence des forces de volume les équations de Navier-Stokes correspondantes aux directions α ($\alpha = 1, 2$ et 3) s'expriment :

$$\rho \frac{Du_\alpha}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \mu \nabla^2 u_\alpha \quad (2.7)$$

où $p = -\frac{\sigma_{\alpha\alpha}}{3}$ est la pression statique conventionnelle, $\frac{\sigma_{\alpha\alpha}}{3}$ étant la contrainte normale moyenne, ∇^2 est l'opérateur Laplacien ; $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ et $\frac{Du_\alpha}{Dt} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta}$ est la composante α de l'accélération particulaire en description Eulerienne¹.

2.3.3 Forme adimensionnelle des équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes sont souvent utilisées sous forme adimensionnelle en introduisant une longueur et une vitesse caractéristiques de l'écoulement \mathcal{L} et \mathcal{U} respectivement. Des grandeurs adimensionnelles sont alors définies :

1. L'accélération particulaire est composée de deux termes ; le premier ($\frac{\partial u_\alpha}{\partial t}$) représente le taux de la variation locale de la vitesse et le second ($u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta}$) représente le taux de variation advective, liée au changement de position de la particule pendant l'incrément de temps Dt

$$\begin{cases} \tilde{t} = t\mathcal{U}/\mathcal{L}, \\ \tilde{x}_\alpha = x_\alpha/\mathcal{L}, \\ \tilde{u}_\alpha = u_\alpha/\mathcal{U}, \\ \tilde{p} = p\mathcal{L}/\mu\mathcal{U} \end{cases} \quad (2.8)$$

et l'équation (2.7) s'écrit sous la forme :

$$\frac{\rho\mathcal{U}\mathcal{L}}{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u}_\beta \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial \tilde{x}_\beta} \right) = - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}_\alpha} + \tilde{\nabla}^2 \tilde{u}_\alpha \quad (2.9)$$

$$\text{avec } \tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_3^2}$$

La constante résultante dans le premier membre de cette équation ($\frac{\rho\mathcal{U}\mathcal{L}}{\mu}$) étant le nombre adimensionnel de Reynolds. Cette équation montre que pour des problèmes de différentes tailles, de géométries et conditions aux limites semblables, les écoulements sont semblables lorsque leurs nombres de Reynolds caractéristiques sont égaux².

Notons enfin que pour décrire l'écoulement du fluide, l'équation de Navier-Stokes doit être utilisée conjointement avec l'équation de continuité, soit pour un fluide Newtonien incompressible les équations 2.6 et 2.7.

2.4 Exemple de solution : écoulement de Poiseuille

Les équations de Navier-Stokes sont résolubles analytiquement pour certains problèmes simples de dynamique des fluides tels que les écoulement de Couette et de Poiseuille. Nous donnons ici comme exemple la solution de l'écoulement de Poiseuille qui est souvent utilisée pour valider les modèles de calcul dynamique des fluides. Il s'agit de l'écoulement permanent d'un fluide dans un tube uniforme à faible nombre de Reynolds de sorte qu'il est considéré en régime laminaire. Il peut être causé par un gradient de pression ou une force de volume.

Pour simplifier, nous nous intéressons à l'écoulement de Poiseuille plan qui se produit entre deux plaques planes parallèles et fixes (voir Fig. 2.1), c'est un cas d'écoulement 2D, c'est à dire $u_z \equiv 0$ et $\frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \equiv 0$ pour $\alpha = x, y$ ou z . L'écoulement est entraîné

². Les conditions aux limites sont semblables si leurs valeurs adimensionnées sont égales.

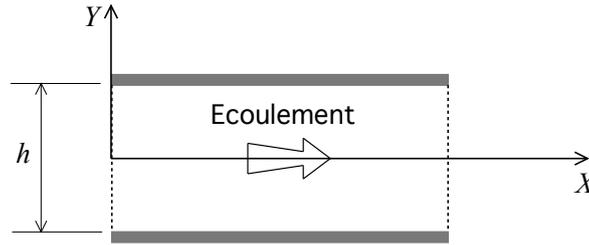


FIGURE 2.1 – Ecoulement de Poiseuille plan

par un gradient de pression dans la direction \vec{x} soit $\frac{\partial p}{\partial x}$.

En raison du caractère laminaire de l'écoulement, la vitesse normale à la direction d'écoulement est aussi nulle ($u_y = 0$). De plus, du fait que l'écoulement est stationnaire et que la section du canal est uniforme (plans parallèles) alors $\frac{\partial u_x}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0$ ³. Dans ce cas le terme relatif aux forces d'inertie dans l'équation de Navier-Stokes (Eq. 2.7) disparaît et l'équation gouvernant l'écoulement est appelée *équation de Stokes*, elle s'écrit dans la direction \vec{x} :

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.10)$$

C'est une équation à variables séparées dont l'intégration donne la pression $p(x)$ et la vitesse $u_x(y)$:

$$\begin{cases} p(x) = Kx + p_0 & \text{(a)} \\ u_x(y) = \frac{K}{2\mu}y^2 + Ay + B & \text{(b)} \end{cases} \quad (2.11)$$

où $K = \frac{\partial p}{\partial x}$ et p_0 est la pression à l'entrée du canal. Les constantes A et B sont à déterminer à partir des conditions de non-glissement du fluide sur les parois solides. Ce sont des conditions couramment utilisées pour des problèmes d'écoulements laminaires⁴. Les parois solides du présent problème sont fixes, ces conditions s'expriment alors sous la forme $u_x(-\frac{h}{2}) = u_x(\frac{h}{2}) = 0$, et les constantes qui en résultent sont $A = 0$

3. Cette équation résulte de l'équation de continuité d'un fluide incompressible en posant $\frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$

4. Il est admis que le frottement fluide-solide est plus grand que le frottement fluide-fluide donc les particules du fluide en contact direct avec un solide adhèrent à celui-ci et le mouvement du fluide résulte du glissement des particules du fluide les unes sur les autres.

et $B = -\frac{K}{2\mu} \left(\frac{h}{2}\right)^2$. L'expression finale de la vitesse (u_x) est alors :

$$u_x(y) = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \left[\left(\frac{h}{2}\right)^2 - y^2 \right] \quad (2.12)$$

L'expression de $p(x)$ (Eq. 2.11a) montre que la pression varie linéairement le long du canal et l'expression de u_x (Eq. 2.12) montre que la variation de la vitesse est parabolique dont le maximum est au centre ($y = 0$) (voir Fig. 2.2). Le signe "-" dans l'expression de la vitesse indique que l'écoulement se produit dans la direction inverse à la direction du gradient de pression $\frac{\partial p}{\partial x}$.

Pour un écoulement dans un canal de longueur L produit par une différence de pression $\Delta p = p_L - p_0$, l'expression de la vitesse est alors :

$$u_x(y) = -\frac{1}{2\mu} \frac{\Delta p}{L} \left[\left(\frac{h}{2}\right)^2 - y^2 \right] \quad (2.13)$$

et la vitesse maximale est :

$$u_{xmax} = u_x(y = 0) = -\frac{1}{8\mu} \frac{\Delta p}{L} h^2 \quad (2.14)$$

L'écoulement de Poiseuille peut être entraîné par une force de volume telle qu'une accélération dans la direction x soit a_x . Dans ce cas le gradient de pression équivalent est $\frac{\partial p}{\partial x} = -\rho a_x$ ⁵. Par conséquent, l'expression de la vitesse d'écoulement devient :

$$u_x(y) = \frac{\rho a_x}{2\mu} \left[\left(\frac{h}{2}\right)^2 - y^2 \right] \quad (2.15)$$

5. Cette équivalence s'établit en égalisant la force motrice produite par le gradient de pression sur un élément volumique de section A_s et de longueur dx soit $(-\frac{\partial p}{\partial x} dx A_s)$ à la force de volume (due à l'accélération a_x) agissante sur le même élément $\rho a_x dx A_s$.

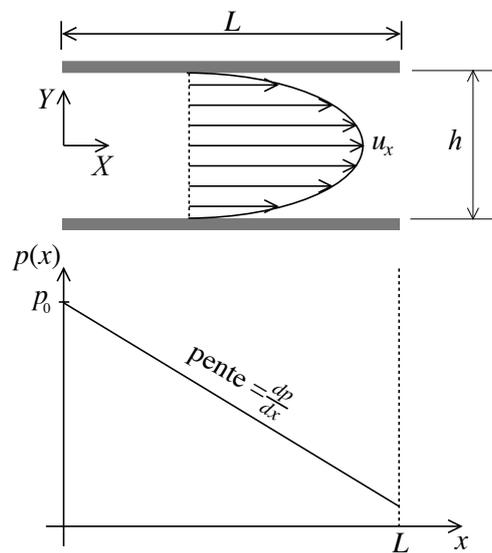


FIGURE 2.2 – Profils de vitesse et de pression pour l'écoulement de Poiseuille plan

Méthode Lattice-Boltzmann pour la dynamique des fluides

Sommaire

3.1	Introduction	37
3.2	Fonction de distribution et équation de base	37
3.3	Discrétisation de l'équation BGK	39
3.4	Exemples de modèles Lattice-Boltzmann	41
3.4.1	Modèle bidimensionnel "D2Q9"	41
3.4.2	Modèle tridimensionnel "D3Q19"	42
3.5	Algorithme de calcul	44
3.6	Prise en compte de l'effet d'une force de volume	45
3.7	Paramètres de discrétisation	45
3.8	Conditions aux frontières	47
3.8.1	Condition de frontières périodiques	47
3.8.2	Condition de non-glissement sur une frontière solide, condition du "Bounce Back"	47
3.8.3	Condition de pression ou de vitesse imposée	49
3.9	Force hydrodynamique sur un obstacle solide, méthode des échanges de quantités de mouvement	52
3.10	Unités Lattice boltzmann	54
3.11	Application à l'écoulement de Poiseuille	54

3.1 Introduction

La méthode Lattice-Boltzmann ou méthode de Boltzmann sur réseau a émergé comme un outil puissant de simulation en dynamique des fluides. Cette méthode est basée sur le concept de modélisation du fluide par des particules mésoscopiques se déplaçant à l'intérieur d'un réseau (une grille) fixe. C'est un concept originalement adopté en simulation de dynamique des gaz par des automates cellulaires (Lattice Gas Automata). Du point de vue formulation, la méthode peut être vue comme une discrétisation spéciale en différences finies de l'équation de la cinétique des gaz de Boltzmann. Une telle discrétisation est choisie de sorte à conserver la dynamique macroscopique du système, notamment la satisfaction des équations de Navier-Stokes.

La méthode a connu un succès considérable pour :

- sa capacité à modéliser différentes situations d'écoulements y compris les problèmes de géométries complexes et les écoulements polyphasiques.
- sa capacité à s'accommoder avec différentes conditions aux limites.
- sa facilité de mise en œuvre en raison de la simplicité de son algorithme de calcul.

Ce chapitre donne une brève présentation de la méthode Lattice-Boltzmann, notamment la discrétisation de l'équation de Boltzmann, l'algorithme de calcul, les conditions aux frontières ainsi que d'autres aspects relatifs à la mise en œuvre de la méthode sont discutés. A la fin du chapitre, une application de la méthode à la simulation de l'écoulement de Poiseuille est présentée.

3.2 Fonction de distribution et équation de base

Dans la méthode Lattice-Boltzmann la description du fluide se fait à travers la fonction de distribution des particules $\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ telle que \vec{x} est la position dans l'espace, $\vec{\xi}$ est la vitesse des particules et $\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)d\vec{x}d\vec{\xi}$ représente le nombre de particules qui se trouvent à l'instant t dans le volume $[\vec{x}, \vec{x} + d\vec{x}]$ et ayant des vitesses comprises dans l'intervalle $[\vec{\xi}, \vec{\xi} + d\vec{\xi}]$.

En supposant que chaque particule est d'une masse m_0 , on définit la fonction de distribution massique :

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = m_0 \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (3.1)$$

La masse volumique macroscopique du fluide, qui est la somme des masses de toutes les particules au point et au temps considérés indépendamment de leurs vitesses, peut donc être exprimée :

$$\rho(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} \quad (3.2)$$

De même, la vitesse macroscopique du fluide est la moyenne des vitesses particulières au point et au temps considérés, elle s'obtient à partir de la densité de quantité de mouvement $\rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \int \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}$ et s'exprime donc :

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} \quad (3.3)$$

La variation de la fonction de distribution est théoriquement gouvernée par l'équation de Boltzmann qui s'écrit en l'absence des forces de volume [Struchtrup 2005] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \Omega_c \quad (3.4)$$

où Ω_c est le terme qui tient compte des collisions interparticulaires. Cette équation qui peut être écrite sous la forme $\frac{\partial f}{\partial t} = -\xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} + \Omega_c$, montre que la variation locale par rapport au temps de la distribution ($\frac{\partial f}{\partial t}$) résulte de deux effets ; l'effet de l'advection ($-\xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha}$) et l'effet de la collision des particules (Ω_c)¹.

La résolution de l'équation de Boltzmann est difficile à cause de la complexité du terme des collisions Ω_c . De ce fait, cette équation est souvent abandonnée en faveur d'autres modèles plus simples. Un modèle populaire souvent adopté pour la résolution numérique est le modèle BGK (Bhatnagar, Gross et Krook) [Struchtrup 2005] qui

1. *Illustration* : Si on imagine que toutes les particules se déplacent à la même vitesse ξ_x ($\xi_y = \xi_z = 0$), il n'y a pas de collisions ($\Omega_c = 0$), la variation locale par rapport au temps de la distribution ($\frac{\partial f}{\partial t}$) n'est due qu'à l'arrivée de particules (advection) qui étaient à la position $(x - dx)$ à la position (x) , soit : $df = \frac{\partial f}{\partial x}(-dx) \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = -\xi_x \frac{\partial f}{\partial x}$

s'exprime par l'équation :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{(0)}) \quad (3.5)$$

où λ est le temps de relaxation (temps de parcourt libre moyen des particules) et $f^{(0)}$ est la distribution d'équilibre de Maxwell-Boltzmann telle que :

$$f^{(0)} = \rho(2\pi\theta)^{-D/2} \exp\left[-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2\theta}\right] \quad (3.6)$$

avec $\theta = k_B T/m_0$, k_B , T et m_0 sont la constante de Boltzmann, la température et la masse d'une particule respectivement et D est la dimension de l'espace ($D = 2$ pour le cas plan, $D = 3$ pour l'espace 3D).

$f^{(0)}$ est la distribution la plus probable des vitesses particulières ($\vec{\xi}$) autour de la vitesse moyenne (\vec{u}), qui conserve les densités de masse et de quantité de mouvement, c'est à dire :

$$\int f^{(0)} d\vec{\xi} = \rho \quad \text{et} \quad \int \vec{\xi} f^{(0)} d\vec{\xi} = \rho \vec{u} \quad (3.7)$$

L'équation 3.5 signifie que la variation due aux collisions interparticulaires ($\Omega_c = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{(0)})$) est proportionnelle à l'éloignement de l'équilibre ($f - f^{(0)}$). De plus le retour à l'équilibre est d'autant plus rapide que la fréquence des collisions ($\frac{1}{\lambda}$) est grande².

3.3 Discrétisation de l'équation BGK

Pour le calcul numérique de la fonction de distribution f , l'équation 3.5 est discrétisée par rapport au temps puis par rapport au champs des vitesses [He 1997b]. La discrétisation par rapport au temps donne l'équation d'évolution incrémentale :

$$f(\vec{x} + \vec{\xi}\Delta t, \vec{\xi}, t + \Delta t) - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = -\frac{1}{\tau} \left(f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right) \quad (3.8)$$

2. On peut remarquer que la variation due aux collisions est nulle lorsque la distribution f est égale à la distribution d'équilibre $f^{(0)}$ ou bien lorsque $\lambda \rightarrow \infty$; cas pour lequel il n'y a pas de collisions.

où Δt est le pas de temps et τ est le temps de relaxation adimensionnel tel que $\frac{1}{\tau} = \frac{\Delta t}{\lambda}$.

En deuxième étape, les vitesses particulières $\vec{\xi}$ initialement en nombre infini, sont réduites à un nombre fini de vitesses possibles \vec{e}_i . Ces vitesses sont choisies de façon à obtenir une structure de grille dans l'espace. A ces vitesses (\vec{e}_i) sont associées des distributions discrètes $f_i(\vec{x}, t) = W_i f(\vec{x}, \vec{e}_i, t)$ avec W_i sont des coefficients de pondération. $f_i(\vec{x}, t)$ peut être comprise comme la masse volumique des particules en mouvement à la vitesse \vec{e}_i .

L'équation décrivant l'évolution des distributions discrètes $f_i(\vec{x}, t)$ peut ainsi être déduite de l'équation 3.8 et s'écrit³ :

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right) \quad (3.9)$$

La fonction clef dans cette équation est la distribution d'équilibre discrète $f_i^{(eq)}$, elle est construite à partir de la distribution d'équilibre $f^{(0)}$ (Eq. 3.6) de sorte que les densités de masse et de quantité de mouvement soient conservées, c'est à dire :

$$\sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{(eq)} = \int f^{(0)} d\vec{\xi} \quad \text{et} \quad \sum_{i=0}^{Q-1} \vec{e}_i f_i^{(eq)} = \int \vec{\xi} f^{(0)} d\vec{\xi} \quad (3.10)$$

Q étant le nombre de vitesses discrètes choisies.

Pour construire $f_i^{(eq)}$, un développement limité de la distribution d'équilibre $f^{(0)}$ jusqu'à l'ordre $O(u^2)$ est utilisé. Ensuite les équations 3.10 sont utilisées pour déterminer les fonctions $f_i^{(eq)}$ ainsi que les longueurs des vecteurs \vec{e}_i .

Le développement limité jusqu'à l'ordre $O(u^2)$ est justifiée par l'hypothèse d'écoulement à faible nombre de Mach, c'est à dire la vitesse de l'écoulement (u) est faible devant la vitesse de propagation du son dans le fluide c_s donnée par :

$$c_s = \sqrt{\theta} = \sqrt{k_B T / m_0} \quad (3.11)$$

En terme des distributions discrètes la masse volumique et la vitesse macroscopique

3. Cette équation est souvent appelée équation LBGK (Lattice BGK) puisqu'elle décrit l'évolution des distributions discrètes dans des noeuds d'une grille ou "lattice" en anglais.

(Eqs. 3.2 et 3.2) s'expriment finalement :

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i \quad (3.12)$$

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{Q-1} \vec{e}_i f_i \quad (3.13)$$

3.4 Exemples de modèles Lattice-Boltzmann

Afin d'illustrer la méthode nous décrivons dans la suite en détail deux modèles utilisés en simulation d'écoulements 2D et 3D.

3.4.1 Modèle bidimensionnel "D2Q9"

Le modèle D2Q9 (2 Dimensions, 9 vecteurs vitesses) est largement utilisé en simulation d'écoulements 2D. Dans ce cas les vecteurs vitesses discrets \vec{e}_i sont choisis comme suit (voir Fig. 3.1a) :

$$\begin{cases} \vec{e}_0 = c(0, 0) \\ \vec{e}_2 = c(-1, 0), \vec{e}_4 = c(0, -1), \vec{e}_6 = c(1, 0), \vec{e}_8 = c(0, 1) \\ \vec{e}_1 = c(-1, 1), \vec{e}_3 = c(-1, -1), \vec{e}_5 = c(1, -1), \vec{e}_7 = c(1, 1) \end{cases} \quad (3.14)$$

avec c est une vitesse caractéristique du modèle. L'ordre de numérotation des vitesses peut être quelconque, mais l'ordre choisi ici permet de simplifier la mise en oeuvre de la méthode.

Pour ce choix de vitesses, la résolution des équations (3.10) donne les expressions de la vitesse caractéristique et des distributions d'équilibre discrètes :

$$c = \sqrt{3\theta} = c_s \sqrt{3} \quad (3.15)$$

et

$$f_i^{(eq)} = \rho w_i \left[1 + \frac{3}{c^2} \vec{e}_i \cdot \vec{u} + \frac{9}{2c^4} (\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \vec{u} \cdot \vec{u} \right] \quad (3.16)$$

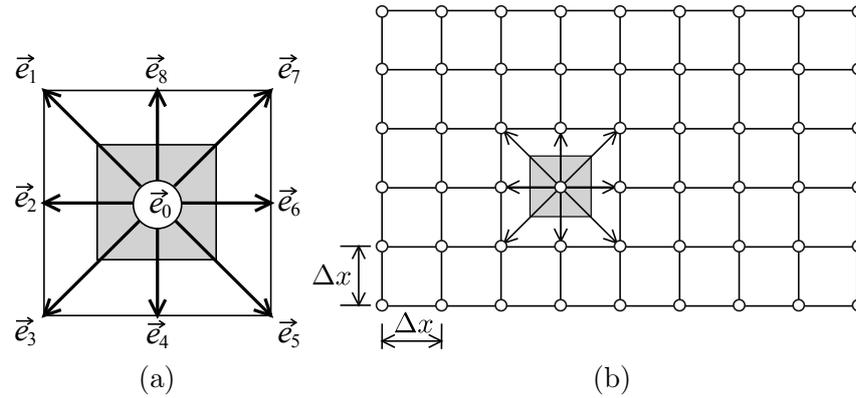


FIGURE 3.1 – (a) Modèle D2Q9, (b) Discrétisation du domaine d'écoulement selon le modèle D2Q9

où w_i sont des facteurs de pondération tel que :

$$w_i = \begin{cases} 4/9 & \text{pour } i = 0 \\ 1/9 & i = 2, 4, 6, 8 \\ 1/36 & i = 1, 3, 5, 7 \end{cases}$$

L'équation (3.9) décrit dans ce cas l'évolution des distributions discrètes f_i dans les noeuds d'une grille régulière (ou réseau régulier) (voir Fig. 3.1b), le pas de discrétisation spatial Δx étant défini par :

$$\Delta x = c\Delta t \quad (3.17)$$

3.4.2 Modèle tridimensionnel "D3Q19"

Il existe plusieurs modèles pour la simulation d'écoulements 3D. Le modèle le plus populaire est le D3Q19, étant donné qu'il représente bon compromis entre volume des calculs et qualité des résultats [Mei 2000]. Pour ce modèle les vecteurs vitesses discrets correspondants sont (voir Fig. 3.2) :

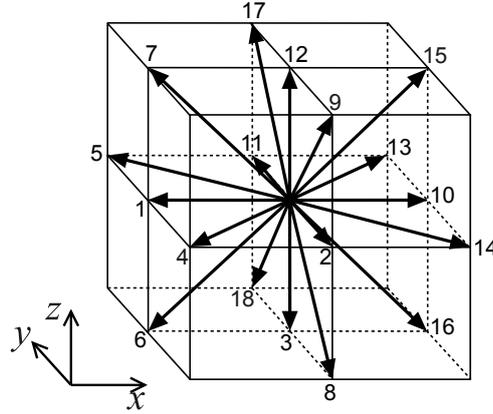


FIGURE 3.2 – Modèle tridimensionnel D3Q19

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \vec{e}_0 = c(0, 0, 0) \\
 \vec{e}_1 = c(-1, 0, 0), \quad \vec{e}_2 = c(0, -1, 0), \quad \vec{e}_3 = c(0, 0, -1) \\
 \vec{e}_4 = c(-1, -1, 0), \quad \vec{e}_5 = c(-1, 1, 0), \quad \vec{e}_6 = c(-1, 0, -1) \\
 \vec{e}_7 = c(-1, 0, 1), \quad \vec{e}_8 = c(0, -1, -1), \quad \vec{e}_9 = c(0, -1, 1) \\
 \vec{e}_{10} = c(1, 0, 0), \quad \vec{e}_{11} = c(0, 1, 0), \quad \vec{e}_{12} = c(0, 0, 1) \\
 \vec{e}_{13} = c(1, 1, 0), \quad \vec{e}_{14} = c(1, -1, 0), \quad \vec{e}_{15} = c(1, 0, 1) \\
 \vec{e}_{16} = c(1, 0, -1), \quad \vec{e}_{17} = c(0, 1, 1), \quad \vec{e}_{18} = c(0, 1, -1)
 \end{array} \right. \quad (3.18)$$

c est la vitesse caractéristique du modèle qui s'obtient avec les distributions d'équilibre discrètes $f_i^{(eq)}$ à partir des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement (3.10). Elles ont les mêmes expressions que modèle D2Q9 (Eqs. 3.15 et 3.16). Les facteurs de pondération w_i correspondants sont :

$$w_i = \begin{cases} 1/3 & \text{pour } i = 0, \\ 1/18 & \text{pour les vitesses courtes comme : } c(1, 0, 0), \\ 1/36 & \text{pour les vitesses longues comme : } c(1, 1, 0). \end{cases}$$

L'utilisation du modèle D3Q19 conduit à la modélisation de l'espace par une grille tridimensionnelle régulière dont les noeuds sont espacés dans les trois directions d'un pas $\Delta x = c\Delta t$.

Dans les sections suivantes nous présenterons les différents aspects et concepts relatifs à la mise en pratique de la méthode en utilisant pour illustration le modèle D2Q9. Ces concepts sont valables pour d'autres modèles tels que les modèles 3D.

3.5 Algorithme de calcul

Pour calculer les distributions f_i , l'équation (3.9) est réécrite sous la forme :

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right) \quad (3.19)$$

Les calculs peuvent donc être effectués en deux étapes :

- Etape des collisions :

$$f_i^{out}(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right) \quad (3.20)$$

- Etape de propagation :

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{out}(\vec{x}, t) \quad (3.21)$$

f_i^{out} représente la distribution de post-collision. L'exposant "out" est mis pour indiquer la distribution qui sera affectée (propagée) au pas de temps suivant au noeud voisin suivant la direction i pendant l'étape de propagation.

Après l'étape de propagation les distributions discrètes f_i sont obtenues dans tous les noeuds, en conséquence, la masse volumique et la vitesse macroscopique peuvent être calculées à travers les équations (3.12 et 3.13) et la pression p peut être calculée à partir de la masse volumique en utilisant l'équation d'état⁴ :

$$p = c_s^2 \rho \quad (3.22)$$

Notons que tous les calculs se font dans l'étape des collisions et sont locaux pour chacun des noeuds. L'étape de propagation n'est que des affectations des distributions de post-collision aux noeuds voisins.

4. Equation d'état des gaz : $p.V = N.k_B.T \Leftrightarrow p = \frac{N.m_0}{V} \frac{k_B.T}{m_0} = \rho c_s^2$

Le processus de calculs peut donc être résumé en les étapes suivantes :

1. Etant données les distributions discrètes f_i au temps t , les distributions de post-collision f_i^{out} sont calculées (Eq. 3.20) dans tous les noeuds du domaine fluide.
2. En utilisant les conditions aux frontières, les distributions (f_i^{out}) à propager à partir des noeuds de frontières aux noeuds de fluide sont calculées.
3. L'étape de propagation (Eq. 3.21) est ensuite effectuée pour obtenir les distributions f_i au temps $t + \Delta t$.

La répétition de ce cycle permet d'obtenir les distributions et par conséquent les pressions et les vitesses macroscopiques (à travers les équations 3.12, 3.13 et 3.22) à chaque pas de temps.

Les distributions f_i initiales sont calculées à partir des conditions de pressions et de vitesses initiales. Pour cela il est courant d'utiliser les distributions d'équilibre (Eq. 3.16), soit $f_{i_initiale} = f_i^{(eq)}(\rho_{initiale}, \vec{u}_{initiale})$.

3.6 Prise en compte de l'effet d'une force de volume

L'effet d'une force volumique induite par une accélération \vec{a} peut être pris en compte dans la méthode Lattice-Boltzmann en introduisant un terme additionnel dans le calcul de la distribution de post-collision [Luo 2000]. L'équation 3.20 devient par conséquent :

$$f_i^{out}(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right) + 3\omega_i \rho \left(\frac{\Delta t^2}{\Delta x} \right) \vec{a} \cdot \left(\frac{\vec{e}_i}{c} \right) \quad (3.23)$$

et l'algorithme de calcul reste inchangé.

3.7 Paramètres de discrétisation

La procédure de discrétisation de l'équation BGK (Eq. 3.5) présentée ci-dessus aboutit à un pas de discrétisation spatial imposé si Δt est choisi ($\Delta x = c\Delta t$). La vitesse c étant une vitesse caractéristique du fluide. Néanmoins, il est possible de choisir Δx et Δt , dans ce cas $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ devient imposée. $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$ (suite à l'Eq. 3.15) est appelée dans

ce cas *vitesse de propagation du son du modèle*, autrement dit le fluide est substitué par un milieu modèle ayant une autre vitesse de propagation du son. Les calculs restent dans ce cas corrects à condition que le nombre de Mach de calcul soit faible (voir la condition 3.25 suivante).

D'autres part, il est montré à travers l'analyse de Chapman-Enskog [He 1997a] que les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible peuvent être retrouvées à partir de la méthode lattice-Boltzmann si la fluctuation de la masse volumique peut être supposée négligeable. La viscosité cinématique équivalente est :

$$\nu = c_s^2 \Delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right) = c \Delta x \bar{\nu} \quad (3.24)$$

$\bar{\nu} = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right)$ est dite viscosité adimensionnelle.

Il est claire de cette équation que la viscosité n'est positive que pour $\tau > 0.5$.

Ainsi, afin de simuler un écoulement incompressible correctement, il faut s'assurer que la fluctuation de la masse volumique est suffisamment faible, ce qui équivaut à maintenir le nombre de Mach suffisamment faible. En d'autres termes, il faut utiliser un modèle dont la vitesse du son (c_s) est suffisamment grande par rapport à la vitesse maximale dans l'écoulement simulé (u_{max}). Dans la pratique, cette condition est vérifiée à travers le nombre de Mach (M_a) de la simulation défini par rapport à la vitesse caractéristique du modèle (c). Il est couramment considéré que les simulations sont suffisamment précises si :

$$M_a = \frac{u_{max}}{c} \leq 0,25 \quad (3.25)$$

De ce qui est avancé il ressort que les paramètres de discrétisation sont au nombre de trois ; Δx , Δt et τ , cependant, du fait de la relation (3.24) et en tenant compte que $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, si la viscosité du fluide est donnée seuls deux de ces paramètres peuvent être choisis librement. Dans la pratique, il est souvent avantageux de choisir τ et Δx et calculer Δt à partir de l'équation (3.24). Ceci est dû au fait que τ est d'un effet déterminant sur la stabilité des calculs et Δx est souvent dicté par les détails géométriques du domaine d'écoulement.

La méthode Lattice Boltzmann basée sur l'équation BGK est théoriquement conver-

gente pour toutes les valeurs de τ donnant des viscosités positives, soit $0.5 < \tau < \infty$ [Wolf-Gladrow 2000]. Cependant pour des simulations précises τ est habituellement choisi dans l'intervalle $0.5 < \tau < 3$ [Nourgaliev 2003].

3.8 Conditions aux frontières

Dans la pratique de simulation des fluides, les conditions aux frontières sont couramment données en termes de grandeurs macroscopiques telles que la vitesse et la pression. Ces conditions ne peuvent être imposées directement dans la méthode Lattice-Boltzmann puisque la pression et la vitesse ne sont pas des variables explicites dans la formulation mais plutôt des résultats du calcul. Par conséquent, des conditions équivalentes en termes de fonctions de distribution (f_i) doivent être construites.

Cette section présente le traitement des frontières les plus fréquemment rencontrés en simulation des fluides, notamment les frontières solides fixes ou mobiles, les frontières de pression ou de vitesse imposée et les frontières périodiques.

3.8.1 Condition de frontières périodiques

Ce sont les conditions à utiliser pour la simulation d'un système à répétition périodique. Dans la méthode Lattice-Boltzmann la mise en oeuvre de ces conditions est simple, en effet il suffit de traiter les noeuds de deux frontières opposées comme des noeuds voisins qui s'échangent les distributions pendant l'étape de propagation. En d'autres termes, les particules (distributions f_i) qui sortent d'une frontière du système doivent être réinjectées par la frontière opposée (Fig. 3.3).

3.8.2 Condition de non-glissement sur une frontière solide, condition du "Bounce Back"

Il est couramment admis qu'il n'y a pas de glissement du fluide sur une surface solide, en d'autres termes les particules fluides en contact d'une surface solide prennent la vitesse de cette surface. Ce concept peut être pris en compte dans la méthode Lattice-Boltzmann d'une façon simple à travers la condition de rebondissement parfait appelée

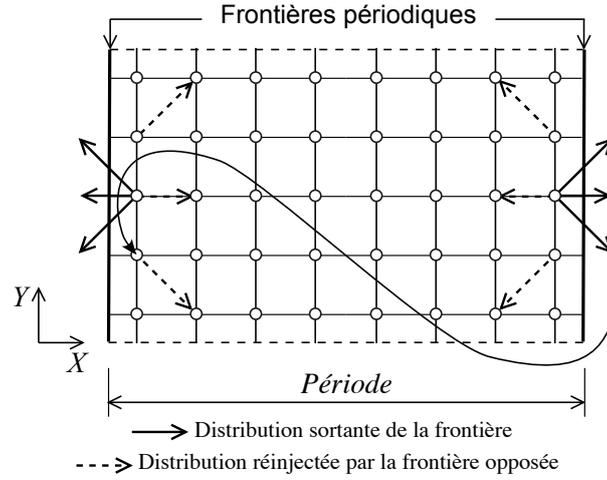
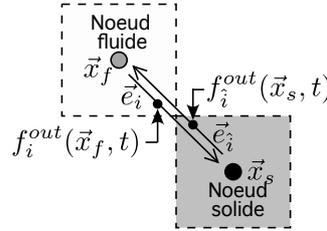

 FIGURE 3.3 – Exemple de frontières périodiques suivant la direction x


FIGURE 3.4 – Schéma standard la condition "Bounce Back"

communément condition du "Bounce-Back". Cette condition signifie que si une particule fluide percute une frontière solide, sa quantité de mouvement est inversée. Ceci peut être réalisée comme suit : soit \vec{x}_s un noeud solide (noeud couvert par un obstacle solide) et \vec{x}_f un noeud fluide voisin à \vec{x}_s (Fig. 3.4), si $f_i^{out}(\vec{x}_f, t)$ est la distribution de post-collision au noeud \vec{x}_f qui sera propagée au noeud \vec{x}_s au cours de l'étape de propagation, la condition de du Bounce-Back, est réalisée si la distribution qui sera propagée du noeud \vec{x}_s vers le noeud \vec{x}_f est posée :

$$f_{\hat{i}}^{out}(\vec{x}_s, t) = f_i^{out}(\vec{x}_f, t) \quad (3.26)$$

où \hat{i} est la direction opposée à la direction i .

Il convient de noter que, en appliquant la condition du Bounce-Back, la frontière entre les deux milieux se trouve située à mi-chemin le long des liens entre les noeuds

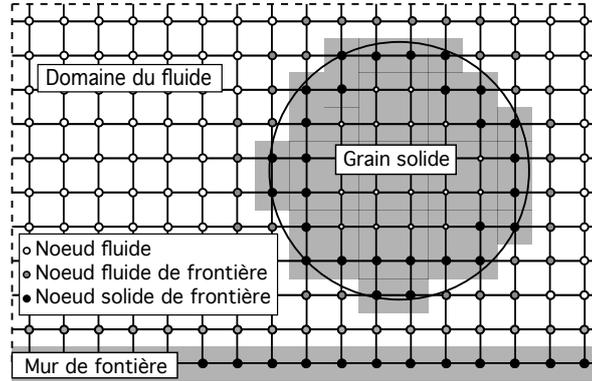


FIGURE 3.5 – Représentation des frontières solide-fluide suite à l’application de la condition du Bounce-Back

fluides et les nœuds solides de frontière⁵ [Ladd 1994]. Il résulte donc qu’une frontière d’un grain solide naturellement courbe, est représentée par une frontière en forme d’escalier (voir figure 3.5).

Lorsqu’une frontière solide est en mouvement à une vitesse \vec{u}_w , la quantité de mouvement de la particule rebondissante se trouve modifiée, la condition du bounce-back qui tient compte de cette modification s’écrit [Yu 2003] :

$$f_i^{out}(\vec{x}_s, t) = f_i^{out}(\vec{x}_f, t) + 6w_i\rho_w \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}_w}{c^2} \quad (3.27)$$

où ρ_w est la masse volumique du fluide au niveau de la frontière.

3.8.3 Condition de pression ou de vitesse imposée

Plusieurs problèmes pratiques font intervenir des frontières à pressions ou à vitesses imposées. Dans la méthode Lattice-Boltzmann, la pression (ou bien même la vitesse) peuvent être contrôlées à travers la masse volumique par application de l’équation d’état (Eq. 3.22)⁶. La construction de distributions correspondantes à une pression spécifiée, peut être faite selon différentes approches [Yu 2003]. Dans le présent travail

5. Un *nœud solide de frontière* est nœud solide ayant au moins un lien avec un nœud fluide. Inversement un *nœud fluide de frontière* est un nœud fluide ayant au moins un lien avec un nœud solide.

6. Il faut rappeler toutefois que la variation de la masse volumique doit rester suffisamment faible afin de ne pas diminuer de la qualité de la modélisation. Par conséquent, pour des problèmes faisant intervenir de grandes variations de pression, la vitesse de propagation du son du modèle c_s doit être suffisamment élevée.

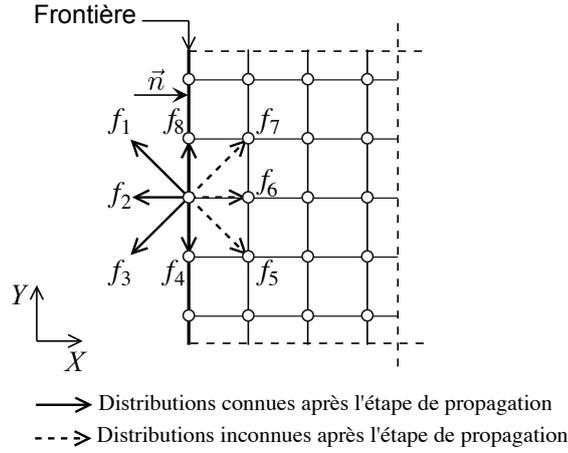


FIGURE 3.6 – Frontière à pression (ou vitesse) spécifiée pour le modèle D2Q9. Les distributions qui restent inconnues après l'étape de propagation sont calculées de sorte à obtenir la pression (ou la vitesse) souhaitée.

nous utilisons la méthode proposée par Zou et He [Zou 1997] que nous décrivons d'une façon sommaire dans la suite.

Dans cette méthode, il est supposé que la frontière est droite, parallèle aux lignes de la grille de discrétisation et passe par les noeuds (Fig. 3.6). La pression (ou la vitesse) sur une frontière est spécifiée en donnant les distributions (f_i) adéquates dans les noeuds de cette frontière. Au niveau d'un noeud de la frontière, après l'étape de propagation certaines distributions sont connues (voir Fig. 3.6), les distributions qui restent inconnues sont calculées de façon à obtenir la pression (ou la vitesse) souhaitée, la procédure de leurs calcul est présentée ci-après.

Soit ρ_m la masse volumique moyenne dans le système, une variation de la pression Δp s'accompagne d'une variation de la masse volumique $\Delta \rho = \frac{\Delta p}{c_s^2}$. La masse volumique sur une frontière de pression spécifiée (Δp) est donc :

$$\rho = \rho_m + \frac{\Delta p}{c_s^2} \quad (3.28)$$

Soit \vec{n} la normale rentrante à la frontière du domaine discrétisé (Fig. 3.6). Pour un noeud de frontière posons :

$$\rho_1 = \sum_{i|\vec{e}_i \cdot \vec{n}=1} f_i \quad (3.29)$$

$$\rho_{-1} = \sum_{i|\vec{e}_i \cdot \vec{n} = -1} f_i \quad (3.30)$$

$$\rho_0 = \sum_{i|\vec{e}_i \cdot \vec{n} = 0} f_i \quad (3.31)$$

ρ_1 , ρ_{-1} et ρ_0 sont des fractions de la masse volumique ρ .

Après l'étape de propagation seule ρ_1 reste inconnue, elle peut être exprimée :

$$\rho_1 = \rho - \rho_{-1} - \rho_0 \quad (3.32)$$

La vitesse dans la direction \vec{n} peut être exprimée à partir des équations 3.13 comme $u_n = c(\rho_1 - \rho_{-1})/\rho$, en tenant compte de l'équation 3.32, elle s'écrit en termes des fractions de masses volumiques connues :

$$u_n = c \left(1 - \frac{2\rho_{-1} + \rho_0}{\rho} \right) \quad (3.33)$$

Ainsi, si la pression est donnée sur la frontière, la vitesse dans la direction normale à la frontière peut être calculée. En conséquence les distributions d'équilibre aux noeuds de frontière sont connues. A partir de là, la distribution inconnue normale à la frontière est calculée en supposant que sa partie hors-équilibre est égale à sa correspondante de direction inverse. Les autres distributions inconnues sont calculées à partir des équations des quantités de mouvement dans les différentes directions. Ceci s'exprime pour l'exemple de la frontière du modèle D2Q9 montrée sur la figure 3.6, par les équations :

$$\begin{cases} f_6 - f_6^{(eq)} = f_2 - f_2^{(eq)} \\ c(f_5 + f_6 + f_7 - f_1 - f_2 - f_3) = \rho u_x \\ c(f_1 + f_7 + f_8 - f_3 - f_4 - f_5) = \rho u_y \end{cases}$$

Ces équations donnent les distributions inconnues f_5 , f_6 et f_7 comme :

$$\begin{cases} f_6 = f_2 + \frac{2}{3} \frac{\rho u_x}{c} \\ f_5 = f_1 - \frac{1}{2}(f_4 - f_8) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_x}{c} - \frac{1}{2} \frac{\rho u_y}{c} \\ f_7 = f_3 + \frac{1}{2}(f_4 - f_8) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_x}{c} + \frac{1}{2} \frac{\rho u_y}{c} \end{cases} \quad (3.34)$$

Notons enfin, que pour une frontière de pression imposée, la vitesse du fluide dans le plan de la frontière est couramment supposée nulle, c'est à dire pour le cas de la figure 3.6, $u_y = 0$.

Pour le modèle D3Q19, les équations de quantités de mouvement ne suffisent pas pour déterminer toutes les distributions inconnues. Ainsi pour les calculer, il est d'abord supposé que leurs parties hors-équilibre sont égales à leurs correspondantes de directions inverses, les expressions des distributions inconnues qui s'obtiennent sont ensuite modifiées de sorte à obtenir des densités de quantités de mouvement correctes dans les directions parallèles à la frontière (voir Annexe A).

Pour le cas de frontière à vitesse imposée, l'équation 3.33 peut être utilisée pour calculer la masse volumique à la frontière et les distributions d'équilibre sont en conséquence connue aux noeuds de frontière. Les distributions inconnues sur la frontière sont ensuite calculées d'une façon similaire à celle présentée ci-dessus.

3.9 Force hydrodynamique sur un obstacle solide, méthode des échanges de quantités de mouvement

La procédure la plus directe pour le calcul de la force hydrodynamique sur un obstacle solide dans la méthode Lattice-Boltzmann, part de la considération des échanges de quantités de mouvement entre le fluide et le solide [Ladd 1994]. En effet, en appliquant la condition du Bounce-back (Sect. 3.8.2), le noeud solide (noeud d'un obstacle solide) subit une force proportionnelle au changement de la quantité de mouvement de la particule fluide réfléchi.

En se référant à la figure 3.4, les masses des particules fluides incidente et réfléchi sur la frontière solide sont respectivement $f_i^{out}(\vec{x}_f, t)\Delta x^3$ et $f_i^{out}(\vec{x}_s, t)\Delta x^3$ ⁷. La variation de la quantité de mouvement d'une particule propagée puis réfléchi sur une frontière solide peut donc être écrite $\left(f_i^{out}(\vec{x}_s, t).\vec{e}_i - f_i^{out}(\vec{x}_f, t).\vec{e}_i\right)\Delta x^3$. La force moyenne sur un pas de temps Δt , appliquée sur l'obstacle solide (grain solide par exemple), le long du lien ℓ défini par les noeuds de frontière \vec{x}_f et \vec{x}_s (Fig. 3.7) s'obtient à partir de

⁷. Rappelons que f_i est la masse volumique de la particule se propageant dans la direction \vec{e}_i et Δx^3 est le volume attaché à un noeud.

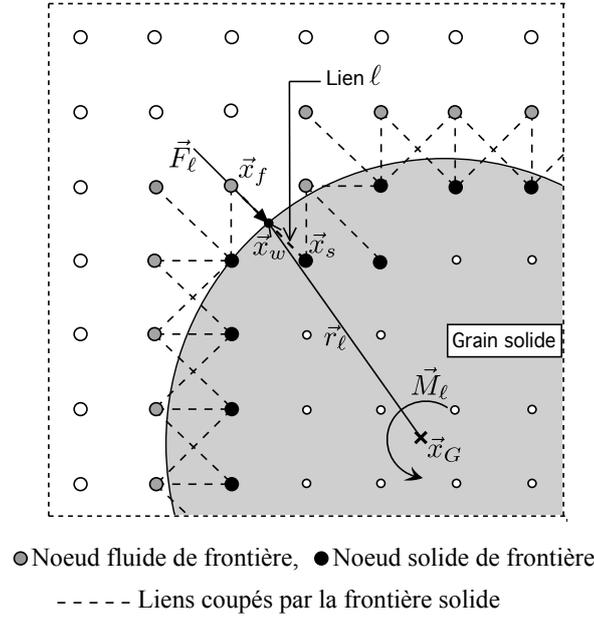


FIGURE 3.7 – Force et moment appliqués sur un grain solide par une particule fluide propagée et réfléchié suivant le lien ℓ

la 2^e loi de Newton :

$$\vec{F}_\ell = -\frac{\Delta x^3}{\Delta t} \left[f_i^{out}(\vec{x}_s, t) \cdot \vec{e}_i - f_i^{out}(\vec{x}_f, t) \cdot \vec{e}_i \right] \quad (3.35)$$

La force \vec{F}_ℓ produit un moment autour du centre de gravité du grain solide :

$$\vec{M}_\ell = \vec{r}_\ell \times \vec{F}_\ell \quad (3.36)$$

l'opérateur (\times) indique ici le produit vectoriel et \vec{r}_ℓ est le bras de levier de la force \vec{F}_ℓ par rapport au centre de gravité du grain solide tel que :

$$\vec{r}_\ell = \vec{x}_w - \vec{x}_G \quad (3.37)$$

\vec{x}_w étant la position du point d'intersection de la frontière avec le lien ℓ , en tenant compte du fait que la condition du Bounce-back positionne la frontière au milieu du lien, $\vec{x}_w = \frac{\vec{x}_f + \vec{x}_s}{2}$.

Les force et moment hydrodynamiques qui s'exercent sur le grain solide peuvent être calculés par sommation sur l'ensemble des liens coupés par la frontière de la particule :

$$\vec{F}_h = \sum_{\ell} \vec{F}_{\ell}, \quad \vec{M}_h = \sum_{\ell} \vec{M}_{\ell} \quad (3.38)$$

3.10 Unités Lattice boltzmann

Une longueur l dans le problème à simuler peut être représentée par un nombre adimensionnel \bar{l} tel que $\bar{l} = l/\Delta x$. De même, un temps t , peut être représenté par un nombre adimensionnel \bar{t} tel que $\bar{t} = t/\Delta t$. Une vitesse macroscopique adimensionnelle \bar{u} peut aussi être définie par $\bar{u} = u/c$, c étant la vitesse caractéristique du modèle.

Le nombre de Reynolds caractéristique de l'écoulement, défini à partir de longueur et de vitesse caractéristique \mathcal{L} et \mathcal{U} et de la viscosité du fluide (Eq. 2.3), peut donc être écrit en termes de la longueur, de la vitesse et de la viscosité adimensionnelles (voir Eq. 3.24) comme :

$$Re = \frac{\mathcal{L}\mathcal{U}}{\nu} = \frac{\bar{\mathcal{L}}\bar{\mathcal{U}}}{\bar{\nu}} \quad (3.39)$$

Il peut être remarqué à partir de cette expression que le nombre de Reynolds est indépendant des pas de discrétisation (Δx et Δt). Par conséquent, pour simplifier le processus de calcul des pas unités sont utilisés ($\bar{\Delta x} = \bar{\Delta t} = 1$), ce sont les *unités Lattice Boltzmann*.

Une fois les calculs effectués, les grandeurs dimensionnées peuvent facilement être retrouvées en utilisant les pas de discrétisation réels (Δx et Δt). Les données physiques d'un problème à simuler sont de même, introduites sous forme adimensionnée en utilisant les pas Δx et Δt . Le tableau 3.1 donne les relations de passage entre les variables physiques et leurs correspondantes en unités Lattice-Boltzmann.

3.11 Application à l'écoulement de Poiseuille

Comme application illustrative, nous présentons dans cette section la simulation de l'écoulement de Poiseuille plan dont la solution analytique est présentée en section 2.4. Nous considérons l'écoulement d'un fluide dans un canal plan (2D) formé par deux plaques planes parallèles, écartées d'une distance h et de longueur arbitrairement choisie $L = 5h$ (Fig. 3.8). L'écoulement est entraîné par une différence de pression dans

Tableau 3.1 – Tableau de passage entre variables physiques et leurs correspondantes en unités Lattice-Boltzmann

Variable	Physique	Lattice-Boltzmann	Relation
Pas de temps	Δt	1	--
Pas spatial	Δx	1	--
Vitesse du modèle	$c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$	$\bar{c} = 1$	--
Vecteur vitesse discret	\vec{e}_i	\vec{e}_i	$\vec{e}_i = c.\vec{e}_i$
Temps	t	$\bar{t} = \frac{t}{\Delta t} = 0, 1, 2, \dots$	$t = \bar{t}.\Delta t$
Position	\vec{x}	$\vec{\bar{x}} = \frac{\vec{x}}{\Delta x}$	$\vec{x} = \vec{\bar{x}}.\Delta x$
Bras de levier	\vec{r}	$\vec{\bar{r}} = \frac{\vec{r}}{\Delta x}$	$\vec{r} = \vec{\bar{r}}.\Delta x$
Vitesse macroscopique	\vec{u}	\vec{u}	$\vec{u} = \vec{u}.c$
Force volumique	$\rho\vec{a}$	$\rho\vec{a}, \left(\vec{a} = \vec{a}\frac{\Delta t^2}{\Delta x}\right)$	$\vec{a} = \vec{a}\frac{\Delta x}{\Delta t^2}$
Viscosité cinématique	$\nu = \frac{1}{3}\left(\tau - \frac{1}{2}\right)\frac{\Delta x^2}{\Delta t}$	$\bar{\nu} = \frac{1}{3}\left(\tau - \frac{1}{2}\right)$	$\nu = \bar{\nu}.\frac{\Delta x^2}{\Delta t}$
Pression	$p = \frac{1}{3}\rho c^2$	$\bar{p} = \frac{1}{3}\rho$	$p = \bar{p}c^2$
Force hydrodynamique	\vec{F}_h	$\vec{\bar{F}}_h$ (voir en bas)	$\vec{F}_h = \vec{\bar{F}}_h \frac{\Delta x^4}{\Delta t^2}$ (cas 3D) $\vec{F}_h = \vec{\bar{F}}_h \frac{\Delta x^3}{\Delta t^2}$ (cas 2D)
Moment hydrodynamique	\vec{M}_h	$\vec{\bar{M}}_h$ (voir en bas)	$\vec{M}_h = \vec{\bar{M}}_h \frac{\Delta x^5}{\Delta t^2}$ (cas 3D) $\vec{M}_h = \vec{\bar{M}}_h \frac{\Delta x^4}{\Delta t^2}$ (cas 2D)

A partir des équations 3.35, 3.36 et 3.38, $\vec{F}_h = -\sum_{\ell} \left[f_i^{out}(\vec{x}_s, t).\vec{e}_i - f_i^{out}(\vec{x}_f, t).\vec{e}_i \right]_{\ell}$ et $\vec{M}_h = -\sum_{\ell} \vec{r}_{\ell} \times \left[f_i^{out}(\vec{x}_s, t).\vec{e}_i - f_i^{out}(\vec{x}_f, t).\vec{e}_i \right]_{\ell}$, \sum_{ℓ} indique que la sommation se fait sur l'ensemble des liens coupés par la frontière.

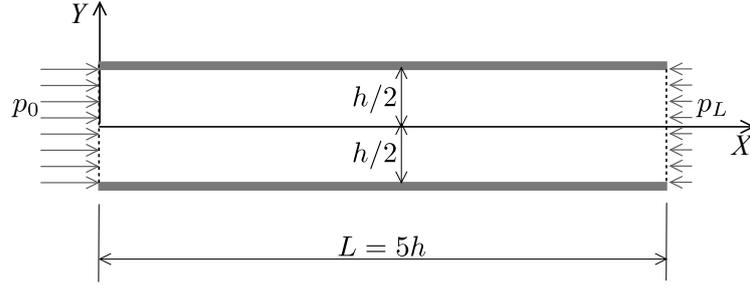


FIGURE 3.8 – Caractéristiques géométriques de l'écoulement de Poiseuille simulé

la direction \vec{x} soit $\Delta p = p(L) - p(0)$. Le nombre de Reynolds caractéristique est fixé à $R_e = 1$. L'expression du nombre de Reynolds ($R_e = \frac{h \cdot u_{xmax}}{\nu}$) est alors utilisée avec la solution analytique donnant la vitesse maximale (Eqs. 2.14) pour calculer la différence de pression correspondante, soit :

$$\Delta p = -\frac{8\nu^2 \rho L}{h^3} R_e \quad (3.40)$$

Le fluide à simuler étant l'eau, les valeurs numériques de ses propriétés physiques, des propriétés géométriques du canal ainsi que la différence de pression à appliquer pour un nombre de Reynolds $R_e = 1$, sont données dans le tableau 3.2.

Tableau 3.2 – Paramètres de l'écoulement de Poiseuille simulé

Masse volumique moyenne (ρ_m)	1000 kg/m^3
Viscosité cinématique (ν)	$10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Largeur du canal (h)	$9 \times 10^{-3} \text{ m}$
Longueur du canal (L)	$45 \times 10^{-3} \text{ m}$
Différence de pression imposée (Δp)	$-\frac{40}{81} \times 10^{-3} \text{ Pa}$

Avec ces données, la vitesse théorique d'écoulement $u_x(y)$ est connue (Eq. 2.13). La vitesse maximale résultante est $u_{xmax} = u(y = 0) = \frac{1}{9} \times 10^{-3}$.

Du fait du caractère 2D du problème, l'écoulement est simulé en utilisant le modèle D2Q9. En suivant les indications données à la section 3.7, le temps de relaxation adi-

mensionnel est d'abord fixé ensuite le nombre de pas de discrétisation dans la direction de la largeur du canal (\bar{h}) est choisi, le pas de discrétisation spatial est alors $\Delta x = h/\bar{h}$. Le nombre de pas dans la direction de la longueur s'obtient ainsi automatiquement $\bar{L} = L/\Delta x$, pour le cas spécial du présent problème $\bar{L} = 5\bar{h}$ |⁸.

La vitesse caractéristique du modèle (c) est calculée à partir de l'expression de la viscosité (Eq. 3.24). La différence de pression Δp est imposée sur les frontières d'entrée et sortie ($x = 0$ et $x = L$) selon la procédure présentée dans la section 3.8.3, étant déjà donnée la masse volumique moyenne du fluide ρ_m , à l'entrée du canal la masse volumique est posée $\rho_{entree} = \rho_m + \frac{|\Delta p|}{c_s^2}$ et à la sortie $\rho_{sortie} = \rho_m$, Δp étant connue et $c_s = c/\sqrt{3}$.

Sur les frontières latérales la procédure du Bounce-Back (Sect. 3.8.2) est utilisée pour imposer la condition de non-glissement du fluide sur les plaques solides.

Les distributions initiales pour tous les noeuds du domaine discrétisé sont posées égales aux distributions d'équilibre (Eq. 3.16), elles sont calculées en prenant comme masse volumique initiale ρ_m et vitesse initiale $\vec{u} = \vec{0}$.

Etant donné que l'objectif est de comparer les résultats de la simulation avec la solution analytique d'un écoulement stationnaire, le pas de temps n'est pas important, il faut cependant, effectuer suffisamment de pas de calcul jusqu'à l'atteinte du régime stationnaire. Du côté pratique, ce régime est supposé atteint lorsque la variation de la vitesse d'un pas de temps au suivant devient négligeable.

Il convient de signaler enfin que, du fait que les frontières latérales sont modélisées par des noeuds solides et que les frontières de pressions imposées passent par les noeuds d'entrée et sortie, les dimensions correctes du problème à simuler (\bar{h} et \bar{L}) s'obtiennent en augmentant les nombres de noeuds de simulation de la façon : $\bar{h}_{simu} = \bar{h} + 2$ et $\bar{L}_{simu} = \bar{L} + 1$.

La simulation est réalisée pour deux différentes discrétisations de l'espace, le temps de relaxation adimensionnel est fixé à $\tau = 0,53$. Le tableau 3.3 présente les différents paramètres relatifs aux deux discrétisations. Sachant que la vitesse maximale d'écoulement est donnée, la vérification de la condition sur le nombre de Mach (Eq. 3.25),

8. Le nombre de pas dans la direction de largeur est choisi en priorité puisque c'est la direction suivant laquelle la vitesse d'écoulement est variable.

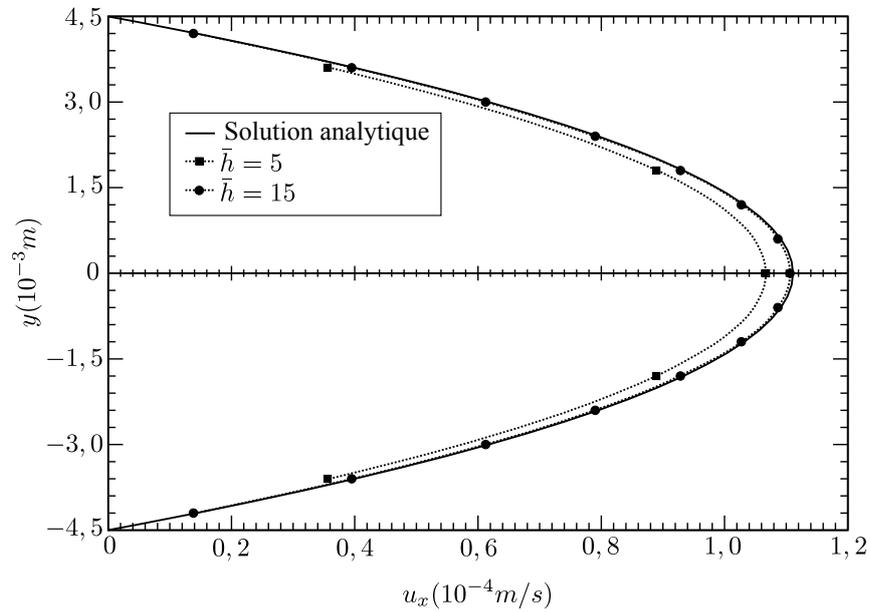
peut être effectuée. La dernière colonne du tableau montre que le nombre de Mach est maintenu faible pour les deux simulations.

Tableau 3.3 – Paramètres de discrétisation utilisés pour la simulation de l'écoulement de Poiseuille

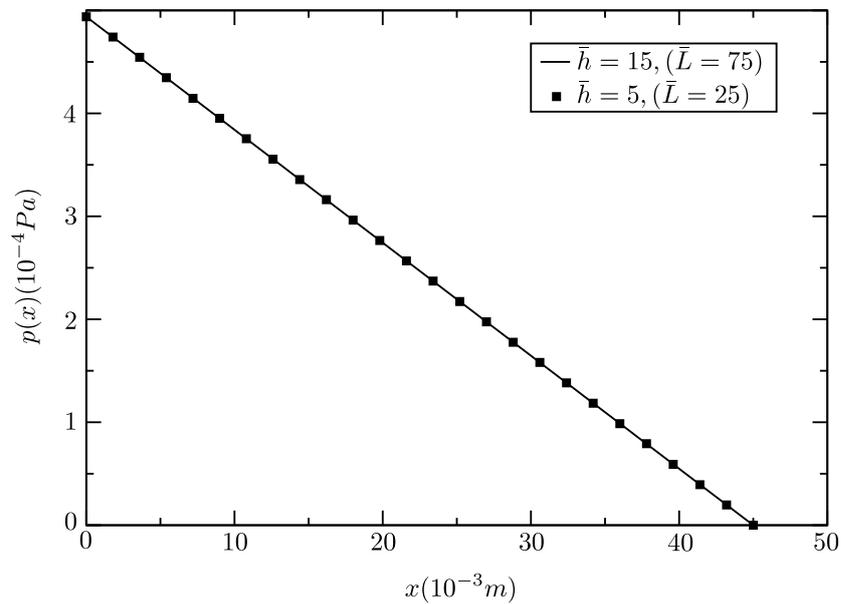
$\bar{h}(h_{simu})$	$\bar{L}(L_{simu})$	$\Delta x = \frac{h}{h}$	$c = \frac{3\nu}{\Delta x(\tau-0.5)}$	$\frac{\Delta\rho}{\rho_m} = \frac{3 \Delta p }{\rho_m c^2}$	$\frac{u_{xmax}}{c} = Ma$
5(7)	25(26)	$1,80 \times 10^{-3}$	0,0555	$4,8 \times 10^{-4}$	0,002000
15(17)	75(76)	$0,60 \times 10^{-3}$	0,1667	$5,33 \times 10^{-5}$	0,000667

La figure 3.9a présente les profils de vitesse ($u_x(y)$) obtenus à travers les deux discrétisations ainsi que celui de la solution analytique. Ces vitesses sont calculées à mi-longueur du canal ($x = L/2$). Il peut être constaté que les profils obtenus numériquement sont semblables à celui de la solution analytique et que la précision des calculs augmente avec la résolution de la discrétisation.

La figure 3.9b montre la variation de la pression le long du canal. Cette pression est calculée pour les deux discrétisations aux noeuds situés à mi-hauteur du canal ($y = 0$). Il est clair que cette variation est linéaire en fonction de l'abscisse x , ce qui est en accord avec la solution analytique.



(a)



(b)

FIGURE 3.9 – (a) Profils de la vitesse $u_x(y)$ à mi-longueur du canal pour les deux discrétisations, (b) Variation de la pression calculée le long du canal par les deux discrétisations.

Simulations d'écoulements à travers des solides granulaires

Sommaire

4.1	Introduction	61
4.2	Effets des paramètres de discrétisation sur la précision de la simulation de l'écoulement de Poiseuille	61
4.2.1	Écoulement par différence de pression	62
4.2.2	Écoulement par force de volume	65
4.2.3	Remarques et conclusions	66
4.3	Simulation de l'essai perméabilité sur un solide granulaire	68
4.3.1	Perméabilité d'un dépôt granulaire non-cimenté	69
4.3.1.1	Construction de l'éprouvette du dépôt	69
4.3.1.2	Mesure de la perméabilité	71
4.3.1.3	Données numériques fixées dans les simulations	72
4.3.1.4	Exemple de simulation	73
4.3.1.5	Comparaison des résultats avec la corrélation de Karman-Kozeny	76
4.3.2	Perméabilité d'un dépôt granulaire cimenté	79
4.3.2.1	Modèles de cimentation utilisés	79
4.3.2.2	Evolution de la perméabilité avec la cimentation	80
4.3.3	Conclusions	82
4.4	Estimation du gradient hydraulique critique de boulangerie	83
4.4.1	Phénomène de boulangerie et gradient hydraulique critique	83
4.4.2	Estimation du gradient hydraulique critique par analyse de l'évolution des contraintes intergranulaires	84

4.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter des simulations d'écoulements à travers des solides formés d'assemblages de grains, ce sont en d'autres termes les écoulements dans des solides poreux. Afin d'avoir une idée préliminaire sur la précision de ces simulations une étude des effets des paramètres de discrétisation sur la précision de la simulation de l'écoulement de Poiseuille est d'abord effectuée. En effet, cette étude pourrait conduire à des recommandations fructueuses, puisqu'un réseau d'écoulement dans un milieu poreux peut être assimilé à une multitude de canaux de Poiseuille.

Comme suite à cette étude paramétrique, des écoulements ascendants à travers des dépôts granulaires construits en utilisant la méthode aux éléments discrets "dynamique moléculaire" sont simulés. La perméabilité de dépôts ayant différentes porosités est d'abord étudiée, puis une procédure simple de calcul de la perméabilité de dépôts granulaires cimentés est présentée. En dernière partie de ce chapitre, le gradient hydraulique critique correspondant au début de boullance est estimé en analysant l'évolution des contraintes intergranulaires en fonction du gradient hydraulique appliqué.

4.2 Effets des paramètres de discrétisation sur la précision de la simulation de l'écoulement de Poiseuille

En se plaçant dans le contexte des écoulements dans les solides granulaires, le paramètre naturellement variable est la résolution de discrétisation spatiale. En effet puisque les canaux d'écoulement dans un solide granulaire sont de dimensions variables, une discrétisation spatiale uniforme conduit à une résolution de discrétisation des canaux forcément variable. Ainsi, nous nous intéressons particulièrement dans cette section, à l'effet de la résolution de discrétisation spatiale sur la précision de la simulation de l'écoulement de Poiseuille. L'effet du temps de relaxation adimensionnel est aussi examiné pour les différentes résolutions.

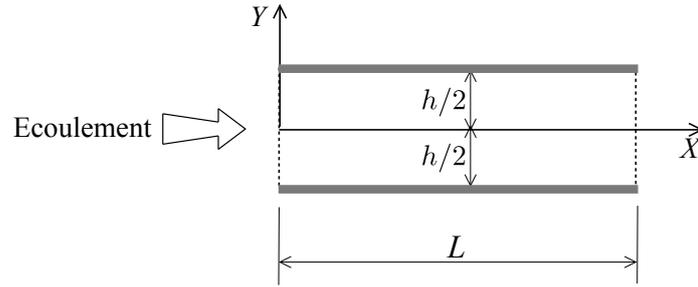


FIGURE 4.1 – Caractéristiques géométriques de l'écoulement de Poiseuille étudié

Les phénomènes ciblés dans cette étude sont liés aux écoulements d'eau dans les sables. Ces écoulements sont caractérisés par des faibles nombres de Reynolds ($Re < 1$) à cause des petites dimensions des interstices sièges d'écoulements et de la viscosité de l'eau. Ainsi le nombre de Reynolds sera fixé dans la suite à $Re = 0,1$.

Soit un écoulement de Poiseuille plan dans un canal de largeur h et de longueur L (Fig. 4.1). La résolution de discrétisation spatiale est définie par le nombre de noeuds utilisés suivant la largeur du canal $\bar{h} = \frac{h}{\Delta x}$.

Etant déjà montré que la forme du profil de vitesse est bien reproduite par la simulation (Sect. 3.11), la précision de la simulation est quantifiée à travers l'erreur résultante sur la vitesse maximale u_{max} (i.e. vitesse correspondante à $y = 0$). Cette erreur est calculée en comparant la vitesse maximale adimensionnée ($\bar{u}_{max} = \frac{u_{max}}{c}$) résultante de la simulation à sa correspondante théorique.

Les valeurs de la résolution (\bar{h}) considérées sont : 1, 3, 5, 9, 15 et 25. Il peut être remarqué que \bar{h} est choisi impaire pour toutes les simulations, et ce afin d'avoir des noeuds à mi-hauteur du canal ($y = 0$) où la vitesse maximale est calculée.

Cette étude est menée en utilisant seulement des paramètres adimensionnels et pour deux types d'écoulements; les écoulements entraînés par différence de pression et les écoulements entraînés par force de volume.

4.2.1 Ecoulement par différence de pression

La longueur du canal considéré est $L = 3h$. Une différence de pression est imposée selon la procédure décrite en section 3.8.3, par imposition d'une variation de la masse volumique $\Delta\rho$ entre l'entrée et la sortie du canal. La résolution dans la direction de

la longueur est notée \bar{L} . Les valeurs des résolutions \bar{h} et \bar{L} sont augmentées dans la simulation de la façon : $\bar{h}_{simu} = \bar{h} + 2$ et $\bar{L}_{simu} = \bar{L} + 1$ et ce afin de tenir compte des noeuds utilisés pour introduire les conditions aux frontières¹.

En tenant compte des expressions de la vitesse maximale, de la pression et de la viscosité (Eqs. 2.14, 3.22, 3.24 respectivement), le nombre de Reynolds ($R_e = \frac{h \cdot u_{xmax}}{\nu}$) peut être exprimé en termes des grandeurs adimensionnelles \bar{h} , \bar{L} , τ et $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ comme :

$$R_e = \frac{3}{8(\tau - 0,5)^2} \frac{\Delta\rho \bar{h}^3}{\rho \bar{L}} \quad (4.1)$$

Pour cette étude le nombre de Reynolds étant fixé ($R_e = 0,1$), il reste alors de se donner les paramètres de discrétisation \bar{h} , \bar{L} et τ , et déterminer la différence de masse volumique qu'il faut appliquer entre les bouts du canal qui s'exprime en conséquence :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{8}{3} \frac{\bar{L}}{\bar{h}^3} (\tau - 0,5)^2 R_e \quad (4.2)$$

Comme pour le nombre de Reynolds, la vitesse maximale théorique adimensionnée, peut aussi être exprimé en terme des grandeurs adimensionnelles comme :

$$\bar{u}_{max_theorique} = \frac{u_{xmax_theorique}}{c} = \frac{1}{3} \frac{R_e}{\bar{h}} (\tau - 0,5) \quad (4.3)$$

Pour chaque discrétisation la vitesse maximale adimensionnée est calculée ($\bar{u}_{max_simu} = \frac{u_{xmax_simu}}{c}$), l'erreur relative résultante de la simulation s'obtient alors par :

$$Err(\%) = \frac{\bar{u}_{max_simu} - \bar{u}_{max_theorique}}{\bar{u}_{max_theorique}} \times 100 \quad (4.4)$$

Il est à remarquer que l'expression de la vitesse maximale adimensionnée n'est autre que celle du nombre de Mach, par conséquent la condition sur le nombre de Mach (Eq. 3.25) peut être vérifiée directement pour chaque simulation en s'assurant que ($\frac{u_{xmax}}{c} < 0.25$)

Le tableau 4.1 présente les paramètres ainsi que les résultats des simulations pour différentes valeurs du temps de relaxation et différentes résolutions. Les valeurs du temps de relaxation considérées sont $\tau = 0,55$; $0,75$; $0,9$; $0,92$ et $1,0$.

1. voir le détail en section 3.11

Tableau 4.1 – Paramètres et résultats des simulations pour un écoulement par différence de pression

τ	$\bar{h}(\bar{h}_{simu})$	$\bar{L}(\bar{L}_{simu})$	$\frac{\Delta\rho}{\rho}$	$\bar{u}_{max_theorique}$	\bar{u}_{max_simu}	$Err(\%)$
0,55	1(3)	3(4)	$2,000 \times 10^{-3}$	$1,667 \times 10^{-3}$	$3,318 \times 10^{-5}$	-98,00
	3(5)	9(10)	$2,222 \times 10^{-4}$	$5,556 \times 10^{-4}$	$4,955 \times 10^{-4}$	-10,80
	5(7)	15(16)	$8,000 \times 10^{-5}$	$3,333 \times 10^{-4}$	$3,203 \times 10^{-4}$	-3,90
	9(11)	27(28)	$2,469 \times 10^{-5}$	$1,852 \times 10^{-4}$	$1,829 \times 10^{-4}$	-1,21
	15(17)	45(46)	$8,889 \times 10^{-6}$	$1,111 \times 10^{-4}$	$1,106 \times 10^{-4}$	-0,43
	25(27)	75(76)	$9,876 \times 10^{-7}$	$6,667 \times 10^{-5}$	$6,656 \times 10^{-5}$	-0,16
0,75	1(3)	3(4)	$5,000 \times 10^{-2}$	$8,333 \times 10^{-3}$	$3,745 \times 10^{-3}$	-55,06
	3(5)	9(10)	$5,556 \times 10^{-3}$	$2,778 \times 10^{-3}$	$2,596 \times 10^{-3}$	-6,54
	5(7)	15(16)	$2,000 \times 10^{-3}$	$1,667 \times 10^{-3}$	$1,626 \times 10^{-3}$	-2,47
	9(11)	27(28)	$6,173 \times 10^{-4}$	$9,259 \times 10^{-4}$	$9,186 \times 10^{-4}$	-0,79
	15(17)	45(46)	$2,222 \times 10^{-4}$	$5,556 \times 10^{-4}$	$5,539 \times 10^{-4}$	-0,29
	25(27)	75(76)	$8,000 \times 10^{-5}$	$3,333 \times 10^{-4}$	$3,333 \times 10^{-4}$	-0,10
0,9	1(3)	3(4)	$1,280 \times 10^{-1}$	$1,333 \times 10^{-2}$	$1,324 \times 10^{-2}$	-0,67
	3(5)	9(10)	$1,422 \times 10^{-2}$	$4,444 \times 10^{-3}$	$4,405 \times 10^{-3}$	-0,88
	5(7)	15(16)	$5,120 \times 10^{-3}$	$2,667 \times 10^{-3}$	$2,655 \times 10^{-3}$	-0,42
	9(11)	27(28)	$1,580 \times 10^{-3}$	$1,481 \times 10^{-3}$	$1,479 \times 10^{-3}$	-0,15
	15(17)	45(46)	$5,689 \times 10^{-4}$	$8,889 \times 10^{-4}$	$8,884 \times 10^{-4}$	-0,06
	25(27)	75(76)	$2,048 \times 10^{-4}$	$5,333 \times 10^{-4}$	$5,332 \times 10^{-4}$	-0,02
0,92	1(3)	3(4)	$1,411 \times 10^{-1}$	$1,400 \times 10^{-2}$	$1,499 \times 10^{-2}$	7,04
	3(5)	9(10)	$1,568 \times 10^{-2}$	$4,667 \times 10^{-3}$	$4,666 \times 10^{-3}$	0,00
	5(7)	15(16)	$5,645 \times 10^{-3}$	$2,800 \times 10^{-3}$	$2,797 \times 10^{-3}$	-0,09
	9(11)	27(28)	$1,742 \times 10^{-3}$	$1,556 \times 10^{-3}$	$1,555 \times 10^{-3}$	-0,05
	15(17)	45(46)	$6,272 \times 10^{-4}$	$9,333 \times 10^{-4}$	$9,331 \times 10^{-4}$	-0,02
	25(27)	75(76)	$2,258 \times 10^{-4}$	$5,600 \times 10^{-4}$	$5,600 \times 10^{-4}$	-0,01
1,0	1(3)	3(4)	$2,000 \times 10^{-1}$	$1,667 \times 10^{-2}$	$2,295 \times 10^{-2}$	37,7
	3(5)	9(10)	$2,222 \times 10^{-2}$	$5,556 \times 10^{-3}$	$5,768 \times 10^{-3}$	3,83
	5(7)	15(16)	$8,000 \times 10^{-3}$	$3,333 \times 10^{-3}$	$3,379 \times 10^{-3}$	1,36
	9(11)	27(28)	$2,469 \times 10^{-3}$	$1,852 \times 10^{-3}$	$1,859 \times 10^{-3}$	0,41
	15(17)	45(46)	$8,889 \times 10^{-4}$	$1,111 \times 10^{-3}$	$1,113 \times 10^{-3}$	0,15
	25(27)	75(76)	$3,200 \times 10^{-4}$	$6,667 \times 10^{-4}$	$6,670 \times 10^{-4}$	0,05

En dernière colonne du tableau est présentée l'erreur sur la vitesse maximale obtenue par simulation, cette erreur est calculée à partir de l'équation 4.4. L'observation des valeurs de l'erreur permet de ressortir les remarques suivantes :

- Pour toutes les valeurs du temps de relaxation (τ), la finesse de la discrétisation entraîne une diminution de l'erreur.
- Le signe de l'erreur montre que la vitesse obtenue par simulation est sous-estimée pour des temps de relaxation inférieurs à 0,9 ($Err < 0$) et sur-estimée pour $\tau = 1,0$. Pour $\tau = 0,92$ l'erreur est par excès pour des faibles résolutions ($\bar{h} < 3$) et par défaut pour des résolutions supérieures.
- Pour les faibles résolutions ($\bar{h} \leq 3$), les erreurs les plus faibles s'obtiennent pour des valeurs du temps de relaxation au voisinage de 0,9. Pour les autres temps de relaxation les erreurs peuvent être très grandes.

4.2.2 Ecoulement par force de volume

L'écoulement est entraîné par une accélération \vec{a} agissant dans la direction \vec{x} c'est à dire $a_x \neq 0$ et $a_y = a_z = 0$. Une telle accélération est prise en compte dans le calcul selon la procédure présentée en section 3.6, en introduisant une accélération adimensionnelle $\bar{a}_x = a_x \frac{\Delta t^2}{\Delta x}$ dans le calcul des distributions de post-collision. Il importe de mentionner que la longueur du canal dans ce cas peut être quelconque puisqu'elle n'a pas d'effet sur les propriétés de l'écoulement.

D'une façon similaire à la section précédente, en partant de l'expression de la vitesse maximale (Eq. 2.15) et des expressions de la pression et de la viscosité, le nombre de Reynolds est exprimé en termes des grandeurs adimensionnelles \bar{h} , \bar{L} , τ et \bar{a}_x comme :

$$Re = \frac{9}{8(\tau - 0,5)^2} \bar{h}^3 \bar{a}_x \quad (4.5)$$

Etant donné que le nombre de Reynolds est déjà fixé ($Re = 0,1$), l'accélération adimensionnelle qu'il faut appliquer s'exprime aussi comme :

$$\bar{a}_x = \frac{8(\tau - 0,5)^2}{9 \bar{h}^3} Re \quad (4.6)$$

et la vitesse maximale théorique adimensionnée résultante est :

$$\bar{u}_{max_theorique} = \frac{u_{xmax_theorique}}{c} = \frac{1}{3} \frac{(\tau - 0,5)}{\bar{h}} Re \quad (4.7)$$

Les paramètres ainsi que les résultats des simulations pour les différentes valeurs du temps de relaxation et les différentes résolutions sont présentés dans le tableau 4.2. Les valeurs du temps de relaxation considérées sont $\tau = 0,55$; $0,8$; $1,05$; $1,075$ et $1,1$. L'erreur sur la vitesse maximale obtenue par simulation est donnée en dernière colonne du tableau.

L'observation des résultats permet de ressortir les remarques suivantes :

- La finesse de la discrétisation augmente la précision pour toutes les valeurs du temps de relaxation.
- La vitesse obtenue par simulation est sous-estimée pour des temps de relaxation inférieurs à $1,075$ et sur-estimée pour $\tau = 1,1$.
- Les erreurs les plus faibles s'obtiennent pour des valeurs du temps de relaxation au voisinage de $1,075$. Pour les autres temps de relaxation les erreurs peuvent être très grandes et en particulier pour les faibles résolutions ($\bar{h} \leq 3$).

4.2.3 Remarques et conclusions

Les remarques et conclusions essentielles relevées de cette étude paramétrique peuvent être résumées comme suit :

- L'étude paramétrique est effectuée par les deux modèles ; le modèle plan D2Q9 est le modèle tridimensionnel D3Q19. Pour ce dernier l'écoulement est considéré tridimensionnel mais périodique dans la troisième direction (z). Les résultats obtenus sont similaires pour les deux modèles.
- Dans le cas d'écoulement entraîné par différence de pression, la vitesse d'écoulement étant dépendante de la longueur du canal, une tentative d'étudier l'effet de la résolution de la discrétisation longitudinale \bar{L} sur la vitesse calculée est effectuée. Les résultats obtenus montrent que pour de faibles résolutions transversales ($\bar{h} \leq 3$), la résolution longitudinales peut conduire à des erreurs importantes quelle que soit la valeur du temps de relaxation τ . Pour des résolutions transver-

Tableau 4.2 – Paramètres et résultats des simulations pour un écoulement par force de volume

τ	$\bar{h}(\bar{h}_{simu})$	\bar{a}_x	$\bar{u}_{max_theorique}$	\bar{u}_{max_simu}	$Err(\%)$
0,55	1(3)	$2,222 \times 10^{-4}$	$1,667 \times 10^{-3}$	$-0,089 \times 10^{-3}$	-105,34
	3(5)	$8,230 \times 10^{-6}$	$5,556 \times 10^{-4}$	$4,905 \times 10^{-4}$	-11,72
	5(7)	$1,778 \times 10^{-6}$	$3,333 \times 10^{-4}$	$3,193 \times 10^{-4}$	-4,20
	9(11)	$3,048 \times 10^{-7}$	$1,852 \times 10^{-4}$	$1,828 \times 10^{-4}$	-1,30
	15(17)	$6,584 \times 10^{-8}$	$1,111 \times 10^{-4}$	$1,106 \times 10^{-4}$	-0,47
	25(27)	$1,422 \times 10^{-8}$	$6,667 \times 10^{-5}$	$6,655 \times 10^{-5}$	-0,17
0,8	1(3)	$8,000 \times 10^{-3}$	$1,000 \times 10^{-2}$	$0,08 \times 10^{-2}$	-92,0
	3(5)	$2,963 \times 10^{-3}$	$3,333 \times 10^{-3}$	$2,993 \times 10^{-3}$	-10,22
	5(7)	$6,400 \times 10^{-5}$	$2,000 \times 10^{-3}$	$1,926 \times 10^{-3}$	-3,68
	9(11)	$1,097 \times 10^{-5}$	$1,111 \times 10^{-3}$	$1,098 \times 10^{-3}$	-1,14
	15(17)	$2,370 \times 10^{-6}$	$6,667 \times 10^{-4}$	$6,639 \times 10^{-4}$	-0,41
	25(27)	$5,120 \times 10^{-7}$	$4,000 \times 10^{-4}$	$3,994 \times 10^{-4}$	-0,15
1,05	1(3)	$2,689 \times 10^{-2}$	$1,833 \times 10^{-2}$	$1,613 \times 10^{-2}$	-12,00
	3(5)	$9,959 \times 10^{-4}$	$6,111 \times 10^{-3}$	$6,030 \times 10^{-3}$	-1,33
	5(7)	$2,151 \times 10^{-4}$	$3,667 \times 10^{-3}$	$3,649 \times 10^{-3}$	-0,48
	9(11)	$3,688 \times 10^{-5}$	$2,037 \times 10^{-3}$	$2,034 \times 10^{-3}$	-0,15
	15(17)	$7,967 \times 10^{-6}$	$1,222 \times 10^{-3}$	$1,222 \times 10^{-4}$	-0,05
	25(27)	$1,721 \times 10^{-6}$	$7,333 \times 10^{-4}$	$7,332 \times 10^{-4}$	-0,02
1,075	1(3)	$2,939 \times 10^{-2}$	$1,917 \times 10^{-2}$	$1,910 \times 10^{-2}$	-0,33
	3(5)	$1,088 \times 10^{-3}$	$6,389 \times 10^{-3}$	$6,387 \times 10^{-3}$	-0,04
	5(7)	$2,351 \times 10^{-4}$	$3,833 \times 10^{-3}$	$3,833 \times 10^{-3}$	-0,01
	9(11)	$4,031 \times 10^{-5}$	$2,130 \times 10^{-3}$	$2,130 \times 10^{-3}$	-0,0
	15(17)	$8,708 \times 10^{-6}$	$1,278 \times 10^{-3}$	$1,278 \times 10^{-4}$	-0,0
	25(27)	$1,881 \times 10^{-6}$	$7,667 \times 10^{-4}$	$7,667 \times 10^{-4}$	-0,0
1,1	1(3)	$2,32 \times 10^{-2}$	$2,000 \times 10^{-2}$	$2,240 \times 10^{-2}$	12,00
	3(5)	$1,185 \times 10^{-3}$	$6,667 \times 10^{-3}$	$6,756 \times 10^{-3}$	1,33
	5(7)	$2,560 \times 10^{-4}$	$4,000 \times 10^{-3}$	$4,019 \times 10^{-3}$	0,48
	9(11)	$4,390 \times 10^{-5}$	$2,222 \times 10^{-3}$	$2,226 \times 10^{-3}$	0,15
	15(17)	$9,481 \times 10^{-6}$	$1,333 \times 10^{-3}$	$1,334 \times 10^{-4}$	0,05
	25(27)	$2,048 \times 10^{-6}$	$8,000 \times 10^{-4}$	$8,002 \times 10^{-4}$	0,02

sales supérieures ($\bar{h} > 3$), l'erreur est perturbée mais reste faible ($Err \leq 5\%$). La variation de cette erreur en fonction de la résolution longitudinale (\bar{L}) n'a un caractère monotone mais il semble qu'elle dépend de la parité de \bar{L} . A notre avis cette perturbation est liée aux conditions de pression utilisées (conditions de Zou et He [Zou 1997]).

- Bien que cette étude n'est pas exhaustive², elle permet de conclure que :
 - dans le cas d'écoulement entraîné par différence de pression, la valeur du temps de relaxation conduisant à la meilleure précision sur la vitesse est au voisinage de $\tau = 0,9$,
 - dans le cas d'écoulement entraîné par force de volume, la valeur du temps de relaxation donnant la meilleure précision sur la vitesse est au voisinage de $\tau = 1,075$,
 - l'utilisation des conditions de pression de Zou et He [Zou 1997] peut conduire à des erreurs considérables pour les faibles résolutions. Ainsi, quand les conditions du problème le permettent, les conditions de forces de volume sont préférables par rapport aux conditions de pressions imposées.

4.3 Simulation de l'essai perméabilité sur un solide granulaire

La prédiction numérique de la perméabilité des dépôts granulaires a été l'objet de plusieurs recherches [Guodong 2004], [Øren 2002], [Vidal 2009]. Les méthodes numériques développées dans ce contexte font intervenir habituellement deux étapes essentielles à savoir :

- la description quantitative de la géométrie microscopique du dépôt
- et la résolution des équations gouvernant les écoulements dans les interstices du milieu.

La géométrie microscopique peut être définie à partir d'images tomographiques d'un dépôt naturel ou bien à partir de modèles numériques de reconstruction [Øren 2002],

². Il pourrait être intéressant d'analyser l'écoulement de Poiseuille dans un tube 3D en considérant la variation de la taille du tube par exemple.

[Guodong 2003].

Selon une stratégie similaire nous présentons dans la suite une procédure de simulation numérique de l'essai de perméabilité sur des dépôts granulaires [Mansouri 2011]. L'éprouvette du dépôt sur laquelle la perméabilité est mesurée est reconstituée numériquement suivant un processus semblable au processus naturel de diagenèse qui englobe les étapes essentielles suivantes :

1. la construction du dépôt granulaire
2. la cimentation du dépôt granulaire par précipitation du ciment sur les grains.

Cette reconstitution permet de contrôler et de décrire numériquement la géométrie microscopique.

Cette éprouvette est ensuite soumise à un écoulement vertical ascendant, sa perméabilité s'obtient après avoir mesuré le débit du fluide traversant.

4.3.1 Perméabilité d'un dépôt granulaire non-cimenté

4.3.1.1 Construction de l'éprouvette du dépôt

L'éprouvette du dépôt est une colonne verticale de section carrée construite au moyen de la méthode des éléments discrets, par pluviation. Les grains sont initialement disposés sur une grille régulière sous forme d'un échantillon dilué puis déposés sous l'effet de la gravité. Des frontières périodiques sont introduites dans les deux directions horizontales afin de s'affranchir des effets de bords et de tenter de simuler une éprouvette illimitée horizontalement (Fig. 4.2).

L'éprouvette est constituée de grains sphériques monodisperses (c'est à dire de mêmes diamètres) ou bien polydisperses. Dans ce dernier cas les diamètres des grains sont obtenus à travers le modèle statistique de Voivret et al. [Voivret 2007] comme suit :

$$d = d_r \times (d_{max} - d_{min}) + d_{min} \quad (4.8)$$

où d_{max} et d_{min} sont les diamètres maximal et minimal de l'échantillon et d_r est le diamètre relatif de valeur comprise dans l'intervalle $[0, 1]$. Le nombre de grains de

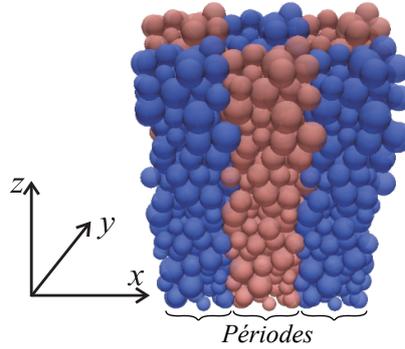


FIGURE 4.2 – Eprouvette périodique (les périodes sont montrées par des couleurs alternées).

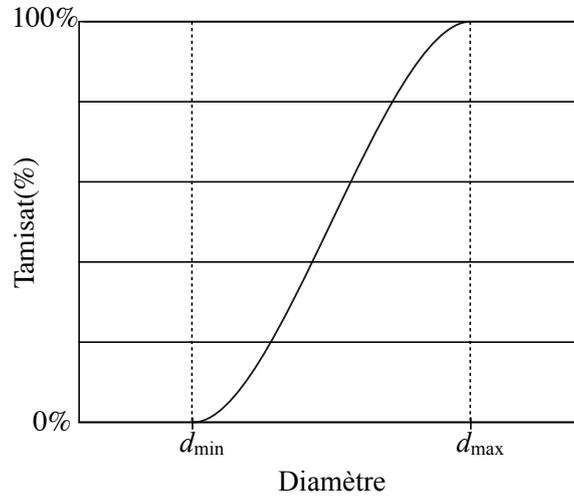


FIGURE 4.3 – Courbe granulométrique d'un échantillon polydisperse pour des coefficients $a = b = 2$.

diamètres relatif d_r est donné par la distribution $\beta(d_r)$ telle que :

$$\beta(d_r) = \frac{1}{B(a, b)} \int_0^{d_r} t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \quad (4.9)$$

avec $a > 0$, $b > 0$ et $B(a, b) = \Gamma(a)\Gamma(b)/\Gamma(a+b)$ où Γ est la fonction classique Gamma.

Ce modèle a la capacité de générer des courbe granulométriques bornées sur les deux cotés et ayant des courbures simples ou doubles en fonction des paramètres a et b . Il permet ainsi d'obtenir des courbes granulométriques semblables aux courbes expérimentales. Dans ce travail les coefficients sont pris $a = 2$ et $b = 2$, la forme de la courbe granulométrique résultante en conséquence est montrée sur la figure 4.3.

4.3.1.2 Mesure de la perméabilité

Une fois l'éprouvette est construite, elle est soumise à un écoulement ascendant pour mesurer sa perméabilité. La modélisation de l'écoulement est réalisée par la Méthode Lattice Boltzmann en utilisant le modèle D3Q19 présenté en section 3.4.2. Le volume de l'éprouvette est entièrement discrétisé en voxels³ dont les centres correspondent aux noeuds du réseau Lattice Boltzmann. Ces voxels sont dits fluide ou solide en fonction des positions de leurs centres (dans l'espace occupé par le fluide ou dans l'espace par les grains solides). L'écoulement est entraîné par deux conditions différentes :

- Par application d'une différence de pression constante entre les surface d'entrée et de sortie (bas et haut de l'éprouvette) en utilisant les conditions de Zou et He (voir Annexe A). Dans ce cas des couches de fluide sont additionnées en bas et en haut de l'éprouvette afin de permettre au fluide de se répartir librement sur les différents canaux interstitiels pendant l'écoulement.
- Par application d'une force de volume équivalente à la différence de pression souhaitée dans la direction de l'écoulement. Dans ce cas les couches de fluide additives en bas et en haut de l'éprouvette ne sont pas utilisées.

Afin de suivre la périodicité du dépôt granulaire, les conditions périodiques sont utilisée sur les quatre frontières latérales verticales. A l'intérieur du volume discrétisé la condition de non-glissement du fluide sur le solide est imposée.

Le fluide est considéré initialement au repos, les distributions initiales sont alors prises égales aux distributions d'équilibre à vitesse initiale nulle.

La perméabilité est définie pour un écoulement permanent à faible nombre de Reynolds ($Re < 1$) à travers la loi de Darcy par :

$$k_a = \frac{Q}{S} \frac{L}{\Delta p} \rho \nu \quad (4.10)$$

où Q est le débit du fluide à travers une section S de l'éprouvette, Δp est la chute de pression sur une longueur L du milieu traversé par l'écoulement, ν est la viscosité cinématique du fluide et ρ est la masse volumique du fluide⁴.

3. voxels : élément cubique de base dans la numérisation d'image 3D

4. Notons qu'avec cette définition, la perméabilité k_a est exprimée en (m^2), elle est appelée dans certains ouvrages *perméabilité absolue*. En mécanique des sols, il est plus courant de définir le *coefficient*

En considérant les nombres de pas de discrétiation dans les deux directions horizontales N_x et N_y , une section horizontale de l'éprouvette s'écrit :

$$S = N_x \times N_y \times \Delta x^2$$

et le débit à travers la section S peut être estimé par :

$$Q \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} u_z(i, j) \times \Delta x^2 \quad (4.11)$$

$u_z(i, j)$ étant la vitesse du fluide dans la direction verticale au noeud (i, j) ⁵.

En tenant compte des expressions de la pression et de la viscosité (Eqs. 3.22 et 3.24 respectivement), la perméabilité peut alors être écrite en terme des paramètres de discrétisation :

$$k_a = \frac{N_z}{N_x \times N_y} \Delta x^2 \frac{\rho}{\Delta \rho} (\tau - 0.5) \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \bar{u}_z(i, j) \quad (4.12)$$

avec \bar{u}_z est la vitesse adimensionnée ($\bar{u}_z = \frac{u_z}{c}$), $\Delta \rho$ est différence de masse volumique imposée entre la surface d'entrée et de sortie du fluide et N_z est le nombre de noeuds de discrétisation verticale de l'éprouvette hors les couches d'eau additives en bas et en haut.

Il convient enfin de rappeler que cette expression est valable pour le cas d'écoulement permanent, ainsi pour calculer la perméabilité il est nécessaire d'effectuer un nombre suffisant de pas de temps jusqu'à ce que le régime d'écoulement permanent s'établisse.

4.3.1.3 Données numériques fixées dans les simulations

Dans toutes les simulations qui suivent, les éprouvettes utilisées sont composées de 200 grains. Pour les échantillons polydisperses les diamètres des grains sont choisis selon la distribution présentée plus haut (section 4.3.1.1) avec $d_{max} = 2d_{min}$.

de perméabilité k tel que $\frac{Q}{S} = k \times i$ où i est le gradient hydraulique ($i = \frac{\Delta p}{\rho g \Delta L}$) qui est sans unité, le coefficient de perméabilité k a alors l'unité d'une vitesse. La relation entre les deux grandeurs est : $k_a = k \frac{\nu}{g}$

5. Il est évident que la précision de cette expression augmente avec la finesse de la discrétisation.

La raideur élastique k_n intervenant dans le calcul des forces normales aux contacts des grains est fixée à $120000 N/m$, les autres coefficients notamment le coefficient de restitution ε_n , le coefficient de frottement dynamique μ_d et les coefficients intervenant dans la résistance au roulement sont choisis de façon à varier la porosité du dépôt à construire.

La section horizontale de l'éprouvette étant carrée, la période dans les deux directions horizontales est prise égale 6 fois le diamètre minimal ($periode = 6 \times d_{min}$). L'épaisseur de l'éprouvette dépend du nombre de grains considéré et de son état de compacité. Pour une éprouvette de 200 grains, cette épaisseur est d'environ 2,5 fois le côté de la section⁶.

La section horizontale est discrétisée en 100×100 noeuds Lattice-Boltzmann, le nombre de noeuds dans la direction verticale étant fonction de l'épaisseur. Sous les conditions déjà avancées, le diamètre minimal équivaut à environ 17 pas de discrétisation ($d_{min} \approx 17\Delta x$).

4.3.1.4 Exemple de simulation

Dans cet exemple un écoulement permanent à travers un dépôt granulaire préalablement construit est simulé. L'écoulement est généré par une différence de pression, les paramètres utilisés dans la simulation sont récapitulés dans le tableau 4.3.

Tableau 4.3 – Paramètres utilisés dans la simulation d'écoulement à travers l'éprouvette granulaire

$N_x = N_y$	$d_{min}(mm)$	$periode(mm)$	$\Delta\rho/\rho$	τ
100	0,4	2,4	0,004	0,9

$\Delta x = periode/N_x$. La hauteur résultante du dépôt est approximativement $5,64mm$, soit par conséquence $N_z = 235$.

Les figures 4.4 et 4.5 montrent quelques aspects de l'écoulement obtenus par simulation. Il peut être remarqué que la variation de la pression débute et se termine par des paliers horizontaux, ces paliers correspondent en effet aux couches de fluide addition-

6. Cette situation est choisie volontairement pour avoir un nombre plus grand de grains dans la direction verticale où la périodicité n'est pas considérée.

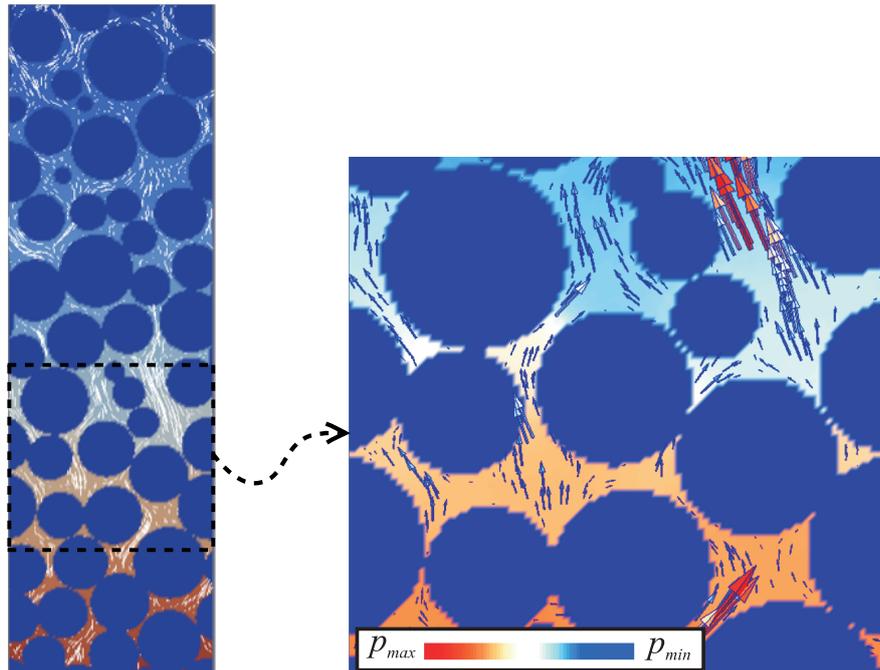


FIGURE 4.4 – Zooms dans une coupe verticale de l'éprouvette sous écoulement
 Les vitesses d'écoulement à l'intérieur des pores sont montrées par des flèches de longueurs variables indiquant leurs directions et valeurs. La variation de la pression est aussi montrée par des couleurs variables.

nées en bas et en haut de l'éprouvette dans lesquelles il n'y a pas de chute de pression. A l'intérieur du dépôt granulaire la variation de la pression a une allure moyenne linéaire. Cette linéarité révèle que la perméabilité ne varie pas le long de l'échantillon et indique par conséquent que l'échantillon est globalement homogène.

Afin de mieux évaluer l'homogénéité de l'échantillon, la porosité surfacique aux différentes sections horizontales est calculée. Cette porosité qui est le rapport de la surface des vides à la surface totale dans une section, est évaluée après discrétisation comme le rapport du nombre de noeuds fluides au nombre total de noeuds dans une section horizontale. La variation de cette porosité est montrée en figure 4.6.

Il est clair que cette porosité oscille autour d'une ligne moyenne horizontale, ce qui veut dire que l'arrangement produit des sections plus poreuses que d'autres mais l'échantillon est globalement homogène.

Le débit moyen à travers différentes sections horizontales, calculé sous la forme adimensionnée comme $\bar{Q} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \bar{u}_z(i, j)$ est de 0,2289. En conséquence, la per-

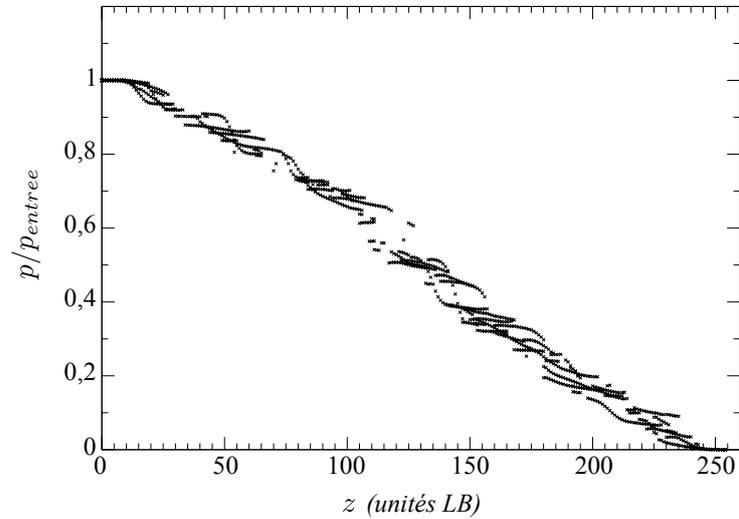


FIGURE 4.5 – Pression adimensionnée en fonction de l'ordonnée z . p_{entree} est la pression à l'entrée (base de l'échantillon), la pression à la sortie de l'échantillon étant prise nulle. Il peut être remarqué que la hauteur de l'échantillon hors couches d'eau additionnées en bas et en haut est de 235 unités LB. Ce graphique est un nuage de points obtenus en calculant la pression le long de plusieurs verticales dans l'éprouvette. En effet pour une seule verticale peu de points s'obtiennent puisque la pression ne peut être calculée dans les noeuds solides des grains traversés.

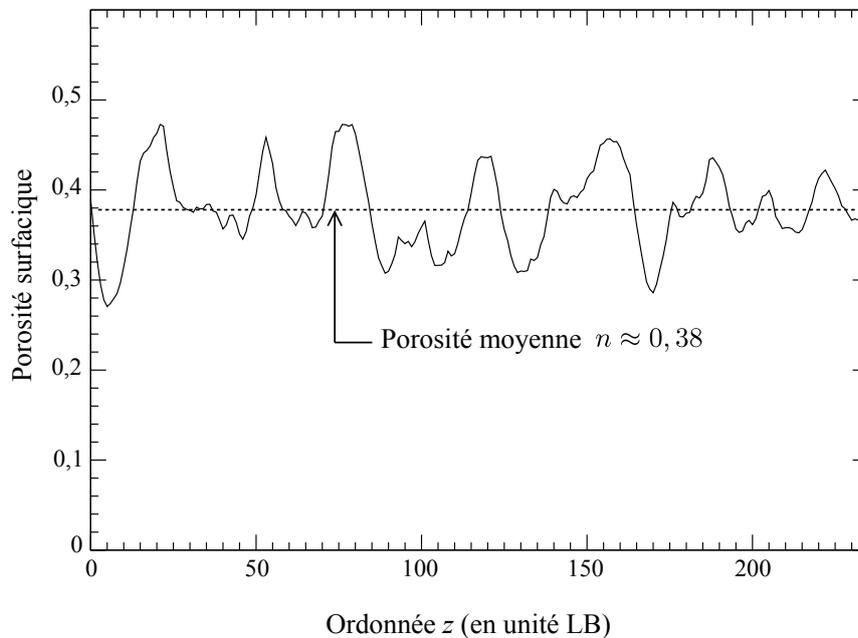


FIGURE 4.6 – Variation de porosité surfacique le long de l'échantillon

méabilité résultante calculée à partir de l'équation 4.3 vaut $k_a = 3,098 \times 10^{-10} m^2$.

4.3.1.5 Comparaison des résultats avec la corrélation de Karman-Kozeny

Plusieurs formules empiriques et semi-analytiques ont été proposées pour le calcul de la perméabilité. Parmi ces formules, la corrélation semi-analytique de Carman-Kozeny est bien connu par sa robustesse dans le cas de milieu granulaire à grains arrondis. Cette corrélation est obtenue en partant de l'hypothèse que les vides interstitiels forment un réseaux de canaux de poiseuille et exprime la perméabilité comme :

$$k_a = \frac{1}{c_k S_0^2} \frac{n^3}{(1-n)^2} \quad (4.13)$$

où n est la porosité, c_k est la constante de Kozeny ($c_k \approx 5$) et S_0 est la surface spécifique moyenne des grains, dans le présent cas les grains sont sphériques donc $S_0 = 6/\langle d \rangle$, avec $\langle d \rangle$ est le diamètre moyen des grains.

Afin de comparer la perméabilité calculée par la méthode numérique présentée plus haut (Eq. 4.12) avec celle donnée par la formule Carman-Kozeny des simulations sont réalisées pour des éprouvettes ayant différentes porosités⁷.

L'écoulement est généré par différence de pression ou bien par force de volume ascendante, dans ce dernier cas la variation de la pression est supposée linéaire le long de l'éprouvette⁸. Le régime d'écoulement permanent est supposé atteint lorsque l'erreur relative sur les vitesses d'écoulement devient négligeable, cette erreur est calculée au sens de la norme $L1$, la condition de convergence s'exprime alors :

$$\frac{\sum (|u_x(t) - u_x(t - \Delta t)| + |u_y(t) - u_y(t - \Delta t)| + |u_z(t) - u_z(t - \Delta t)|)}{\sum (|u_x(t)| + |u_y(t)| + |u_z(t)|)} < Tol \quad (4.14)$$

où Tol est l'erreur tolérée, elle est prise dans toutes les simulations au moins 10^{-6} .

Les paramètres utilisés dans les simulations sont similaires à ceux de l'exemple traité plus haut pour l'écoulement généré par différence de pression. Dans le cas d'écoulement

7. Les éprouvettes à différentes porosités sont obtenues en variant les paramètres physiques intervenants dans la DEM, notamment la constante de rigidité k_n , le coefficient de restitution ε_n et le coefficient de frottement μ_d .

8. Avec cette hypothèse l'accélération verticale ascendante équivalente à une différence de pression Δp est $a_z = -\frac{1}{\rho} \frac{\Delta p}{N_z \Delta x}$.

généralisé par force de volume le temps de relaxation est pris $\tau = 1,075$ en se conformant à la recommandation faite à la fin de l'étude paramétrique sur l'écoulement de Poiseuille. Le diamètre des grains des dépôts monodisperse est pris $d = 0,6\text{mm}$.

Les porosités des échantillons soumis à la simulation ainsi que les perméabilités calculées sont présentées sur le tableau 4.4.

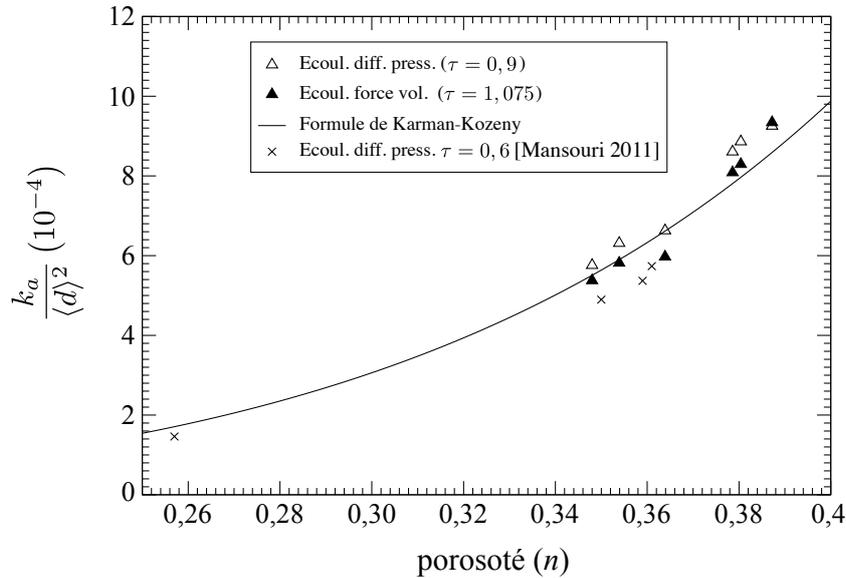
Tableau 4.4 – Porosités et perméabilités obtenues des échantillons soumis à la simulation

Echantillon	Monodisperse			Polydisperse		
	1	2	3	4	5	6
Porosité	0,3639	0,3804	0,3872	0,3480	0,3539	0,3786
Perméabilité ⁽¹⁾ ($10^{-10}m^2$)	2,386	3,190	3,331	2,074	2,273	3,099
Perméabilité ⁽²⁾ ($10^{-10}m^2$)	2,150	2,985	3,363	1,936	2,094	2,911

⁽¹⁾écoulement par différence de pression, ⁽²⁾écoulement par force de volume

Sur le graphe 4.7 est représentée la perméabilité calculée par simulation ainsi que celle obtenue par la formule Carman-Kozeny en fonction de la porosité. La perméabilité calculée par la même procédure pour d'autres échantillons en imposant l'écoulement par différence de pression et en prenant $\tau = 0,6$ [Mansouri 2011] est donnée aussi sur le graphique juste pour montrer l'influence du temps relaxation τ . L'analyse des résultats obtenus à travers ce graphe permet de ressortir les remarques suivantes :

- Pour les mêmes dépôts (tableau 4.4), il y a une différence qui atteint jusqu'à 10% entre les perméabilités calculées à travers les deux conditions de génération de l'écoulement, (i.e. par différence de pression ou par force de volume).
- Pour la même condition de génération de l'écoulement (i.e. par différence de pression), la comparaison des perméabilités obtenues pour $\tau = 0,9$ et $\tau = 0,6$, montre la dépendance des résultats du temps de relaxation utilisé. Comparativement à la corrélation de Karman-Kozeny, il semble que la valeur de $\tau = 0,9$ donne des résultats plus précis. En effet le maximum d'écart avec la corrélation de Karman-



La perméabilité représentée est rendue sans dimensions en la divisant par le carré du diamètre moyen des grains de l'échantillon $\langle d \rangle$.

FIGURE 4.7 – Perméabilité en fonction de la porosité

Kozeny est de 11% pour $\tau = 0,9$ de 15% pour $\tau = 0,6$. Ce résultat est en accord avec la recommandation faite pour l'écoulement de Poiseuille (sect. 4.2.3).

- En se basant sur l'étude paramétrique faite sur l'écoulement Poiseuille, la dépendance de la perméabilité du temps de relaxation et de la condition génération de l'écoulement, peut être attribuée à la faible résolution de discrétisation des canaux d'écoulement à l'intérieur du dépôt granulaire qui peuvent être très fins dans certaines zones.
- Du fait du caractère approché de la corrélation de Carman-Kozeny, il est difficile de se prononcer sur la précision des calculs à travers cette comparaison. Néanmoins à titre comparatif, il est clair que l'évolution de la perméabilité calculée numériquement en fonction de la porosité a une allure très semblable à celle de la corrélation de Carman-Kozeny. De plus, l'écart maximal obtenu entre la perméabilité calculée et celle de la corrélation de Carman-Kozeny est au voisinage de 12% pour des écoulements par différence de pression avec $\tau = 0,9$ et des écoulements par force de volume avec $\tau = 1,075$.
- L'écart de la perméabilité calculée numériquement par rapport à celle calculée par la corrélation de Carman-Kozeny est variable et n'évolue pas d'une façon

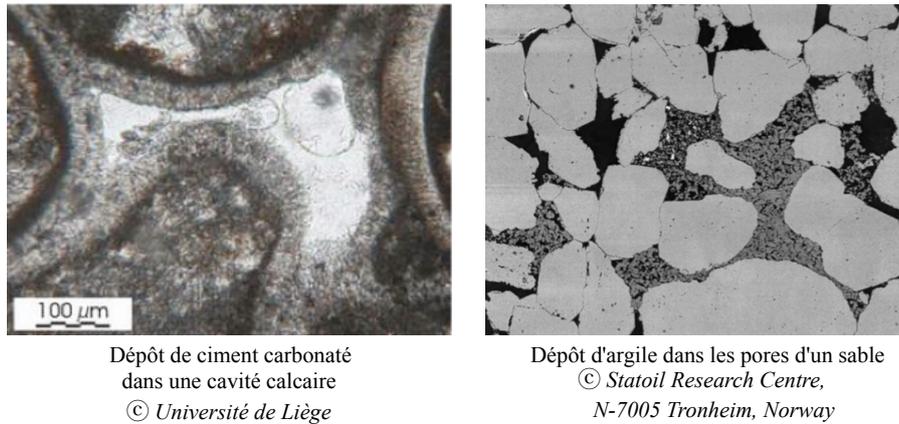


FIGURE 4.8 – Quelques formes des dépôts de ciment existants en pratique.

régulière. Ce résultat peut être attribué en partie au fait que la perméabilité ne dépend pas seulement de la porosité, mais aussi de l'arrangement des grains qui a un effet sur la totuosité des canaux d'écoulement.

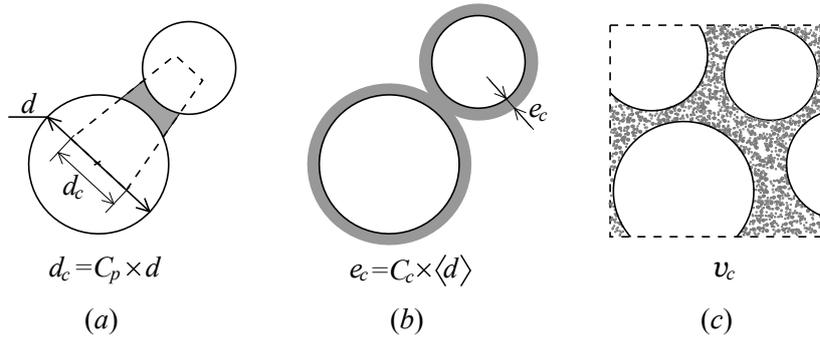
4.3.2 Perméabilité d'un dépôt granulaire cimenté

La cimentation est le processus de nucléation minérale et de précipitation qui a lieu entre les grains d'un matériau granulaire. La distribution des ciments précipités à l'intérieur des pores du matériau dépend des processus chimiques et cristallographiques impliqués et peut avoir des formes multiples (Fig. 4.8).

Selon la forme et le volume des couches déposées, ces précipitations peuvent avoir d'importantes influences sur la perméabilité du matériau.

4.3.2.1 Modèles de cimentation utilisés

Même si les formes réelles des dépôts de ciment peuvent être complexes, nous utilisons dans ce travail trois modèles simples de cimentation dans le but de montrer l'effet du degré de cimentation sur la perméabilité. Dans le premier modèle il est supposé que le ciment déposé a la forme de ponts coniques connectant les grains voisins suffisamment proches (Fig. 4.9a). La distance maximale entre les grains qui peuvent être connectés est choisie égale à une fraction des diamètres des grains. La variation du rayon du pont étant linéaire, à chacune des extrémités, le diamètre du pont (d_c) est



C_p , C_c et v_c sont les paramètres de contrôle de la taille du dépôt de ciment

FIGURE 4.9 – Modèles de cimentation ; (a) dépôt sous forme de pont conique, (b) dépôt à épaisseur uniforme autour des grains, (c) dépôt aléatoire.

proportionnel au diamètre du grain lié (d). La taille du pont est contrôlée à travers le coefficient de proportionnalité (C_p).

Pour le deuxième modèle (Fig. 4.9b), il est supposé que le dépôt de ciment forme une couche d'épaisseur uniforme (e_c) autour des grains, cette épaisseur est choisie proportionnelle au rayon moyen des grains de l'échantillon et est contrôlée par le coefficient de proportionnalité (C_c).

Dans le troisième modèle, un volume contrôlé (v_c) de ciment est déposé graduellement de façon aléatoire dans les pores du matériau, avec la condition que le ciment doit être déposé sur un solide (grain ou ciment déjà déposé) (Fig. 4.9c). Il résulte en conséquence un dépôt de ciment poreux.

4.3.2.2 Evolution de la perméabilité avec la cimentation

Pour montrer l'effet de la cimentation sur la perméabilité, un échantillon granulaire à différents degrés de cimentation est soumis au test numérique de perméabilité. L'échantillon initialement non-cimenté est similaire à ceux des tests précédents, sa porosité initiale est $n_0 = 0,3495$. L'écoulement est imposé par force de volume avec une valeur du temps de relaxation $\tau = 1,075$. La perméabilité obtenue après calcul est $k_{a0} = 1,977 \times 10^{-10} m^2$. Le ciment est ensuite déposé graduellement selon les modèles de cimentation décrits plus haut, du point de vue numérique, les voxels initialement fluides qui seront couverts par le dépôt de ciment sont convertis en voxels solides. La

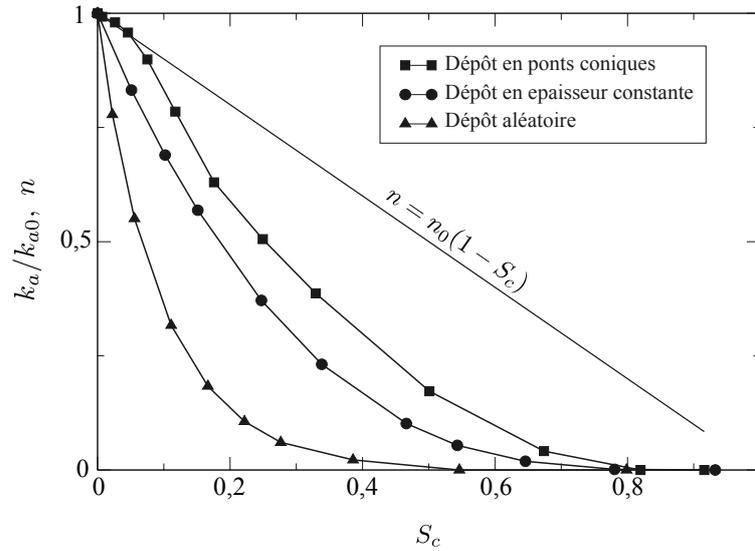


FIGURE 4.10 – Evolution de la perméabilité avec le degré de saturation en ciment

quantité de ciment déposé étant contrôlée pour les trois modèles par les coefficients relatifs C_p , C_c et v_s , le degré de saturation en ciment est défini comme le rapport du volume du ciment déposé au volume total des pores interstitiels de l'échantillon non-cimenté. La porosité d'un échantillon cimenté de degré de saturation en ciment S_c s'exprime alors $n = n_0(1 - S_c)$.

La figure 4.10 montre l'évolution de la perméabilité avec le degré de saturation en ciment pour les trois modèles de cimentation présentés plus haut. La perméabilité est normalisée dans ce graphe par la valeur initiale k_{a0} correspondant à l'échantillon non-cimenté. L'évolution de la porosité avec le degré de saturation en ciment est aussi représentée sur le même graphe afin de comparer la variation des grandeurs porosité et perméabilité.

Ce graphique montre que la perméabilité diminue plus rapidement comparativement à la porosité avec l'augmentation du degré de saturation en ciment. Ceci est due au fait que le remplissage de l'espace poral par le ciment a un effet simple sur la porosité, mais un effet double sur la perméabilité en rétrécissant les canaux d'écoulement et en réduisant en conséquence la vitesse d'écoulement. L'évolution de la perméabilité pour les trois modèles montre que le mode de précipitation du ciment peut avoir différents effets sur le taux de changement de la perméabilité, il est clair que le dépôt sous forme

de pont a le plus faible effet et en particulier pour les faibles degrés de cimentation. En effet, pour ce modèle le dépôt débute au niveau des gorges qui sont peu utiles à l'écoulement. Au contraire, le dépôt en couche autour des grains agit dès le début sur l'espace utile pour l'écoulement ce qui fait que la cimentation selon ce mode a plus d'effet sur la perméabilité. Le dépôt aléatoire crée rapidement des canaux d'écoulement étroits, des bras morts et pores isolés, c'est pourquoi la perméabilité diminue très rapidement.

4.3.3 Conclusions

Le modèle numérique présenté dans cette section permet le calcul de la perméabilité d'un matériau granulaire cimenté, il utilise la Méthode des Eléments Discrets et des modèles de cimentation pour construire l'échantillon granulaire et la Méthode Lattice Boltzmann pour la mesure de la perméabilité.

Les applications réalisées en utilisant ce modèle ont montré que la perméabilité calculée dépend légèrement du temps de relaxation introduit et de la condition utilisée pour générer l'écoulement (i.e. par différence de pression ou bien par force de volume). Cette dépendance peut être attribuée essentiellement à la faible résolution de discrétisation des canaux d'écoulement qui peuvent être très fins dans certaines zones.

L'analyse rigoureuse de la précision du modèle n'a pas eu lieu, néanmoins pour des échantillons granulaires non cimentés, la comparaison avec la corrélation de Karman-Kozeny a montré que le modèle prédit une variation de la perméabilité en fonction de la porosité très semblable à celle donnée par cette corrélation semi-analytique. De plus, il est constaté que pour les valeurs du temps de relaxation recommandées dans l'étude paramétrique sur l'écoulement de Poiseuille (i.e. $\tau = 0,9$ en écoulements par différence de pression et $\tau = 1,075$ en écoulements par force de volume), l'écart maximal par rapport à la corrélation de Karman-Kozeny est de 12%.

Pour les matériaux granulaires cimentés, l'étude de l'effet du degré de saturation en ciment sur la perméabilité, a montré que comparativement à la porosité qui en dépend de façon linéaire, la perméabilité diminue de façon non linéaire beaucoup plus rapide avec l'augmentation du degré de saturation en ciment. De plus, le mode de précipitation du ciment dans les pores du matériau est d'un effet déterminant sur la perméabilité.

Il convient de noter enfin que la méthodologie proposée peut être utilisée avec d'autres modèles de cimentation plus élaborés qui permettent une meilleure approximation des géométries microscopiques des matériaux réels.

4.4 Estimation du gradient hydraulique critique de bou- lance

4.4.1 Phénomène de bou- lance et gradient hydraulique critique

Lorsqu'un sol granulaire est soumis à un écoulement vertical ascendant (sens contraire à la gravité), ses grains subissent des forces hydrodynamiques agissantes dans la direction de l'écoulement. Le sol peut garder sa stabilité tant que le gradient hydraulique appliqué est faible, mais lorsque ce dernier atteint ou dépasse une certaine valeur dite *critique*, le sol devient instable et entre en état de *bou-
lance*, c'est un état où les grains du sol se trouvent entraînés par les forces hydrodynamiques et les contraintes intergranulaires (ou effectives) deviennent nulles dans toute la masse du sol [Holtz 1991]. Le gradient hydraulique critique correspond à l'état où la résultante des pressions appliquées sous le sol équilibre son poids propre. Ainsi en se référant à la figure 4.11, la valeur du gradient hydraulique critique s'obtient en écrivant l'équation d'équilibre :

$$\gamma_f (h + h' + L) = \gamma_{sat} L + \gamma_f h' \quad (4.15)$$

où γ_f et γ_{sat} sont les poids volumiques de l'eau (fluide) et du sol saturé respectivement. γ_{sat} peut être exprimé en termes de la porosité du sol n et des poids volumiques de l'eau γ_w et des grains solides γ_s comme :

$$\gamma_{sat} = \gamma_s(1 - n) + \gamma_f \times n \quad (4.16)$$

En posant $h\gamma_f = \Delta p$ et tenant compte de l'expression du poids volumique saturé, le gradient hydraulique critique i_c s'écrit alors :

$$i_c = \frac{\Delta p}{\gamma_f L} = \frac{(\gamma_s - \gamma_f)(1 - n)}{\gamma_f} \quad (4.17)$$

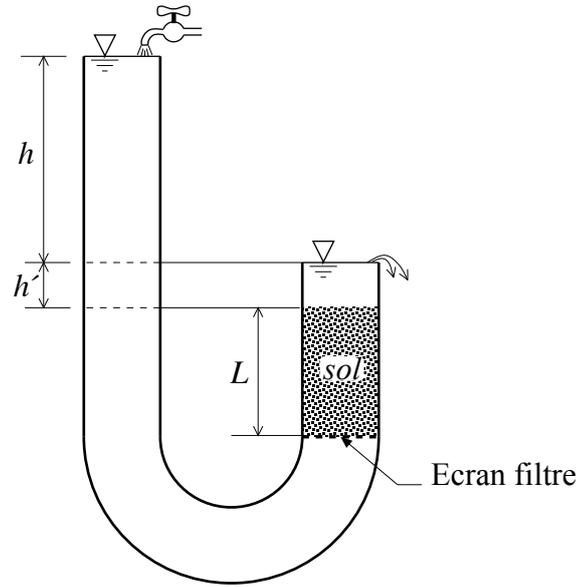


FIGURE 4.11 – Schéma du dispositif de mise d'un échantillon de sol sous écoulement ascendant à gradient hydraulique constant

ou bien en termes des masses volumiques de l'eau (ρ_f) et des grains solides (ρ_s) :

$$i_c = \frac{(\rho_s - \rho_f)(1 - n)}{\rho_f} \quad (4.18)$$

En pratique, la valeur du gradient hydraulique critique pour les sables est approximativement égale à 1.

Remarquons enfin que l'équation d'équilibre 4.15 s'explique aussi de la façon : l'état critique est atteint lorsque la résultante de la pression nette atteint le poids déjaugé des grains solides, c'est à dire pour un échantillon de section A , $\Delta p \times A = ((\gamma_s - \gamma_f) \times L \times A)$.

4.4.2 Estimation du gradient hydraulique critique par analyse de l'évolution des contraintes intergranulaires

La modélisation par la méthode Lattice-Boltzmann d'écoulements de fluide à travers un sol granulaire permet le calcul des forces hydrodynamiques subies par les grains. La prise en compte de ces forces dans une modélisation par éléments discrets permet alors d'évaluer la contrainte intergranulaire moyenne aux différents points de l'échantillon

granulaire siège d'un écoulement de fluide (voir en sect. 1.2.6). L'analyse de l'évolution de ces contraintes avec l'augmentation du gradient hydraulique appliqué permet l'estimation du gradient hydraulique critique [Mansouri 2009].

En application de cette procédure, un échantillon granulaire polydisperse similaire à ceux utilisés dans la mesure de la perméabilité (voir en section 4.3.1.3) est construit puis soumis à différents gradients hydrauliques. Pour chaque gradient les forces hydrodynamiques résultantes sur les grains sont calculées par la méthode des échanges de quantités de mouvement (Sect. 3.9). Il est supposé que les grains gardent leurs positions initiales (à l'état sans écoulement) quelque soit le gradient appliqué. Les forces hydrodynamiques sont calculées après l'établissement du régime d'écoulement permanent⁹.

Les gradients hydrauliques sont imposés par la condition de différence de pression, ils sont variés du zéro jusqu'à ce que la résultante des forces hydrodynamiques atteinte ou dépasse légèrement le poids déjaugé du squelette solide. Les propriétés physiques et géométriques du système étudié sont données sur le tableau 4.5. L'épaisseur de l'échantillon L est obtenue après une courbe de la pression en fonction de l'ordonnée z ($p = f(z)$) similaire à la courbe 4.5, c'est la distance entre les paliers d'entrée et de sortie de la courbe, c'est à dire la longueur de l'échantillon sur laquelle il y a chute de pression. Les valeurs des différences de pression imposées ainsi que les gradients hydrauliques correspondants sont donnés sur le tableau 4.6. Les forces résultantes des pressions appliquées en sont aussi présentées pour donner une indication sur le début de boulangerie en les comparant au poids déjaugé de l'échantillon (W').

La figure 4.12 montre l'évolution des forces hydrodynamiques agissantes sur les grains avec l'augmentation du gradient hydraulique. Ces forces sont normalisées par les poids déjaugés correspondants. La ligne du milieu représente la résultante verticale des forces hydrodynamiques normalisée par le poids déjaugé du dépôt. Cette figure montre que les forces hydrodynamiques sont proportionnelles au gradient hydraulique appliqué. Bien que pas toutes les forces sont montrées sur le graphique, cette proportionnalité a été confirmée pour tous les grains et pour toutes les composantes des forces hydrodynamiques. Ce résultat indique que l'écoulement reste laminaire jusqu'à l'état

9. La boulangerie peut se produire sous un régime d'écoulement transitoire, dans ce cas la distribution des forces hydrodynamiques dans l'échantillon reste perturbée ce qui complique l'analyse des contraintes intergranulaires.

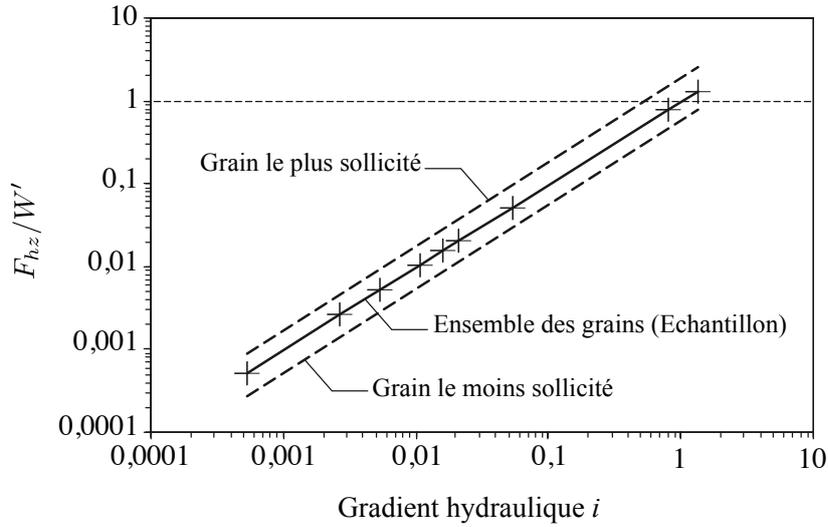
Tableau 4.5 – Propriétés physiques et géométriques du système étudié

Masse volumique du fluide (eau)	$1000\text{kg}/\text{m}^3$
Viscosité cinématique du fluide (eau)	$10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$
Masse volumique déjaugée des grains solides ($\rho_s - \rho_f$)	$1600\text{kg}/\text{m}^3$
Nombre de grains du dépôt granulaire	200
Intervalle de variation du diamètre des grains	0,4 – 0,8 mm
Poids total déjaugé des grains solides (W')	$3,503 \times 10^{-4}\text{N}$
Section du dépôt granulaire (période×période)	$2,4 \times 2,4 \text{ mm}^2$
Epaisseur du dépôt granulaire (L)	5,88 mm
Porosité moyenne du dépôt granulaire (n)	0,341

La porosité est calculée dans ce cas à partir de l'expression $W' = (\gamma_s - \gamma_f)(1 - n)V$, V étant le volume du dépôt.

Tableau 4.6 – Valeurs des différences de pression imposées, des résultantes des pressions et des gradients hydrauliques correspondants

Pression (N/m^2)	Gradient hydraulique i	Résultante de la pression (N)
5,208	0,092	$0,3 \times 10^{-4}$
15,625	0,277	$0,9 \times 10^{-4}$
26,042	0,461	$1,5 \times 10^{-4}$
36,458	0,645	$2,1 \times 10^{-4}$
46,875	0,830	$2,7 \times 10^{-4}$
52,083	0,922	$3,0 \times 10^{-4}$
57,292	1,014	$3,3 \times 10^{-4}$
62,500	1,106	$3,6 \times 10^{-4}$
67,708	1,198	$3,9 \times 10^{-4}$
72,917	1,290	$4,2 \times 10^{-4}$
78,125	1,383	$4,5 \times 10^{-4}$
83,333	1,475	$4,8 \times 10^{-4}$



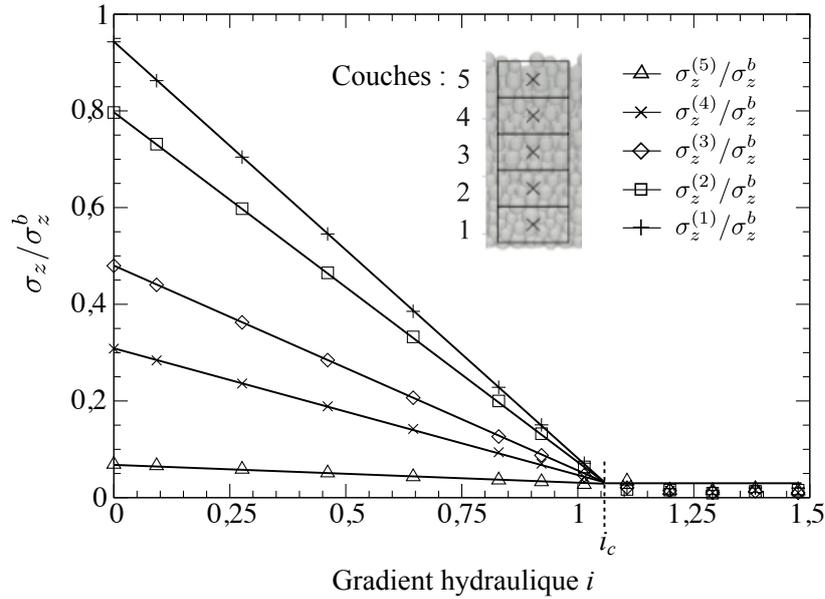
F_{hz} force hydrodynamique verticale, W' poids propre déjaugé.

FIGURE 4.12 – Evolution des forces hydrodynamiques verticales avec le gradient hydraulique appliqué.

critique de boulangerie pour l'échantillon en question. En conséquence pour étudier l'évolution des contraintes intergranulaires avec l'augmentation du gradient hydraulique, il est suffisant d'introduire dans la modélisation par éléments discrets les forces hydrodynamiques résultantes d'un faible gradient hydraulique, puis les augmentées d'une façon proportionnelle au gradient souhaité sans recourir à les recalculer pour chaque gradient.

Il est à noter qu'il est vérifié que la résultante des forces hydrodynamiques calculées est égale à la résultante des pressions appliquées (pression \times section).

En étape suivante, les grains de l'échantillon sont libérés et modélisés par éléments discrets, les forces hydrodynamiques correspondantes à un gradient hydraulique $i = 0,092$ sont introduites comme des forces extérieures aux grains, puis augmentées proportionnellement au gradient appliqué. L'échantillon est divisé en cinq tranches horizontales de contrôle où les contraintes sont calculées. La figure 4.13 montre les contraintes intergranulaires verticales moyennes dans ces tranches pour différents gradients hydrauliques appliqués. Ces contraintes sont normalisées par la contrainte effective à la base de l'échantillon qui s'obtient en divisant le poids propre déjaugé par la section de l'échantillon. Des lignes droites en sont représentées pour montrer l'évolution moyenne approchée des contraintes en fonction du gradient hydraulique.



σ_z contrainte intergranulaire verticale, σ_z^b contrainte intergranulaire verticale à la base de l'échantillon.

FIGURE 4.13 – Evolution des contraintes intergranulaires verticales avec le gradient hydraulique appliqué.

Ce graphique montre que l'augmentation du gradient hydraulique provoque une décompression de l'échantillon granulaire traduite par la diminution des contraintes intergranulaires moyennes dans les différentes tranches. Il est clair que ces contraintes convergent suivant une allure linéaire vers une faible valeur non nulle indépendante de la position dans l'échantillon. Cette contrainte donnée par le point d'intersection des droites représentées sur le graphique, subsiste même pour les gradients hydrauliques élevés, elle peut être expliquée par les collisions continues entre les grains qui se trouvent en suspension à cause de la bouillonnante. En conséquence, le gradient hydraulique correspondant au début de bouillonnante peut être vu comme le point d'intersection des droites représentant la variation moyenne des contraintes intergranulaires dans les différentes tranches. Le gradient hydraulique critique qui s'obtient alors à partir du graphique est approximativement $i_c \approx 1,055$.

D'autre part, en tenant compte des valeurs de la porosité et des masses volumiques des grains solides et de l'eau données au tableau 4.5, l'expression classique (Eq.4.18) donne la valeur du gradient hydraulique critique $i_c = 1,054$. Il est ainsi clair que le gradient hydraulique critique obtenu par l'analyse micromécanique de l'évolution des

contraintes intergranulaires avec l'augmentation du gradient appliqué est le même que celui donné par l'analyse globale de mécanique des sols classique. Un résultat similaire est obtenu pour un autre dépôt [Mansouri 2009].

4.4.3 Conclusion

La procédure simplifiée présentée pour l'estimation du gradient hydraulique critique de boulangerie est basée sur l'analyse de l'évolution des contraintes intergranulaires avec l'augmentation du gradient hydraulique. Les contraintes intergranulaires sont calculées au moyen de la méthode des éléments discrets et en utilisant la méthode Lattice–Boltzmann pour évaluer les forces hydrodynamiques agissant sur les grains. Ces forces sont supposées proportionnelles au gradient appliqué. Cette analyse micromécanique peut alors être utilisée dans le cas d'échantillons de grains de faibles dimensions où l'écoulement reste laminaire jusqu'au début de la boulangerie. L'application à un échantillon de grains de diamètres variant dans l'intervalle $[0,4 ; 0,8 \text{ mm}]$ a permis de noter les remarques suivantes :

- il est vérifié que la résultante des forces hydrodynamiques agissant sur les grains est égale à la résultante de la pression appliquée (pression \times section),
- les contraintes intergranulaires sont inversement proportionnelles au gradient hydraulique ascendant appliqué,
- le gradient hydraulique critique de boulangerie estimé à partir de cette analyse est le même que celui donné par la théorie classique basée sur l'analyse globale.

Ces remarques permettent de conclure que les forces hydrodynamiques sont correctement évaluées par la procédure des échanges de quantités de mouvement dans la méthode Lattice–Boltzmann. L'utilisation conjointe des deux méthodes éléments discrets et Lattice–Boltzmann pourrait donc permettre l'analyse micromécanique de problèmes plus complexes tels que les cas de dépôts non-homogènes qui sont difficiles à traiter par les méthodes globales classiques¹⁰.

10. A titre d'exemple, l'évaluation des contraintes effectives dans un sol soumis un écoulement ascendant se base sur l'hypothèse de distribution uniforme des forces d'infiltration, cette hypothèse peut ne pas être valide dans le cas où la géométrie microscopique du sol est variable.

Couplage Eléments Discrets Lattice-Boltzmann, modélisation des milieux granulaire saturés

Sommaire

5.1 Introduction	90
5.2 Solide en mouvement dans un fluide modélisé par la méthode Lattice-Boltzmann	91
5.2.1 Condition de rebondissement interpolée	93
5.2.2 Application de la condition de rebondissement interpolée aux grains solides en mouvement	95
5.2.3 Distributions inconnues des noeuds réintégrant le domaine fluide suite au mouvement des grains	96
5.3 Couplage Eléments Discrets – Lattice-Boltzmann	97
5.3.1 Résolution de la discrétisation spatiale	98
5.3.2 Procédure d'incrémentation du temps	98
5.3.3 Prise en compte de la poussée d'Archimède	99

5.1 Introduction

La mécanique des milieux granulaires saturés fait intervenir deux types d'interactions à savoir les interactions grain-grain et les interactions fluide-grains. En effet, le mouvement de chacun des grains est influencé par les forces de contact avec les grains

voisins ainsi que la force hydrodynamique résultante des écoulements du fluide saturant. Ces écoulements ne sont évidemment pas indépendants du mouvement des grains. Par conséquent, la simulation de la mécanique de ces milieux, nécessite un modèle qui peut prendre en compte ces deux types d'interaction. Une approche directe du problème consiste à modéliser chacune des deux phases du milieu par la méthode qui lui est adéquate tout en prenant en compte leur interaction à travers une procédure bien construite. C'est dans ce contexte que s'inscrit la présente partie de cette thèse. Il s'agit de réaliser un couplage des deux méthodes Elément Discrets et Lattice-Boltzmann dans le but de modéliser l'hydromécanique des milieux granulaires saturés.

En s'intéressant à ce couplage, le premier problème qui surgit vite est la façon de traiter le mouvement d'un solide dans un fluide modélisé par la méthode Lattice-Boltzmann, ce problème sera discuté dans la section 5.2. Une fois, les choix du traitement de ce problème faits, les aspects relatifs au couplage proprement dit seront présentés en section 5.3.

5.2 Solide en mouvement dans un fluide modélisé par la méthode Lattice-Boltzmann

Comme avancé aux chapitres précédents, la modélisation d'un fluide par la méthode Lattice-Boltzmann consiste substituer le volume à étudier par une grille régulière dont les noeuds représentent les points discrets où se calculent les vitesses et les pressions. Ces noeuds sont liés par des liens définissant les chemins de déplacement des particules fluides entre les noeuds à chaque pas de temps. Le nombre de liens attachés à chaque noeud dépend du modèle Lattice-Boltzmann utilisé. La présence d'un obstacle solide dans le fluide tel qu'un grain par exemple ne modifie pas la discrétisation, mais elle change le statut des noeuds couverts par le grain solide, ils sont appelés alors "noeuds solides". Les noeuds solides qui ont des liens avec des noeuds fluides sont des noeuds solides de frontières, c'est à travers ces noeuds que l'interaction fluide-solide est prise en compte. Les noeuds solides intérieurs ne sont pas considérés dans les calculs. L'interaction fluide-solide implique la prise en compte instantanée de deux paramètres à savoir ; (1) les conditions aux frontières du domaine fluide (dont les frontières des grains font

partie) et (2) les forces hydrodynamiques appliquées par le fluide sur le solide. Cette interaction peut être prise en compte à travers la condition du rebondissement parfait "Bounce Back" discutée en section 3.8.2. Il convient de rappeler que l'application de cette condition conduit à situer la frontière aux milieux des liens entre les noeuds fluides et les noeuds solides de frontière, et de représenter en conséquence les frontières courbes par des frontières en escalier. Cette représentation conduit évidemment à des erreurs qui peuvent être minimiser en augmentant la résolution de discrétisation au prix d'élever la quantité de calculs. Un autre inconvénient apparaît lorsque la condition de rebondissement parfait est appliquée aux solides en mouvement, en effet le déplacement du solide induit des changements brusques de statuts des noeuds qui se trouvent à sa frontière (du solide au fluide ou inversement). Il s'ensuit alors que la géométrie du domaine d'écoulement se trouve en modification de façon non-régulière (à la manière de sauts) et le calcul des forces hydrodynamiques est soumis à des fluctuations qui peuvent être importantes [Ladd 1994, Ladd 2001].

Les problèmes qui viennent d'être signalés qui sont inhérents à la condition de rebondissement parfait, ont incité la recherche d'autres conditions permettant d'approcher la courbure réelle des frontières et d'éviter les fluctuations dans le calcul des forces hydrodynamiques. Noble et al. [Noble 1998] ont proposé la condition de la "frontière immergée", pour laquelle la condition de non-glissement fluide-solide est imposée à travers une condition de rebondissement modifiée. Cette modification fait intervenir le taux de remplissage en matière solide du voxel entourant le noeud solide de frontière. La condition de frontière immergée a été utilisée par la suite, par plusieurs chercheurs pour la modélisation de solides en mouvement dans un fluide [Cook 2004, Feng 2004, Strack 2007]. Elle a été aussi employée dans le modèle couplé DEM-LBM proposé par Feng et al. [Feng 2007] pour la simulation des milieux granulaires saturés.

Suivant une approche différente, d'autres chercheurs ont proposé, des conditions de rebondissement interpolées [Filippova 1998, Mei 1999, Bouzidi 2001, D.Yu 2002, Kao 2008]. Ces conditions font intervenir les parties des liens "noeud solide" – "noeud fluide" de frontière, qui sont couvertes par le solide. Comparativement à la condition de frontière immergée, ces conditions sont plus simples à mettre en oeuvre, puisque elles font appel à un calcul de longueurs. Par contre la condition de frontière immergée

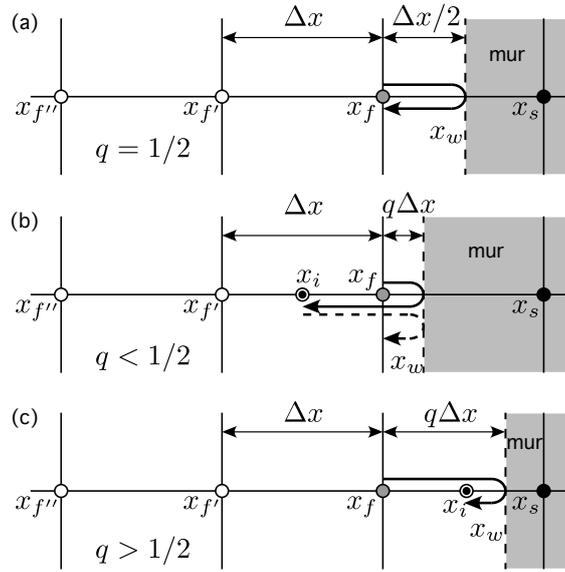
fait intervenir un calcul de volume plus compliqué et plus coûteux (calcul de surface en 2D).

Parmi les conditions de rebondissement interpolées, la condition de Bouzidi et al. [Bouzidi 2001] semble être très acceptée par les chercheurs travaillant sur la LBM. Lallemand et al. [Lallemand 2003] l'ont utilisé pour la simulation d'une sphère solide en mouvement par rapport à la grille Lattice-Boltzmann, de très bons résultats sont obtenus. Cette condition est choisie alors pour le modèle couplé DEM-LBM présenté dans ce travail, elle sera présentée en détail dans la section 5.2.1.

Un autre problème apparaît dans le cas de mouvement d'un solide par rapport à la grille Lattice-Boltzmann. En effet, les noeuds solides qui deviennent fluides au cours du mouvement, nécessitent une définition de leurs distributions. La façon de définir ces distributions a une influence importante sur le calcul de la force hydrodynamique, elle sera discutée en section 5.2.3. Ce problème ne se pose pas pour les noeuds fluides qui deviennent solides puisqu'ils sont de suite exclus des calculs.

5.2.1 Condition de rebondissement interpolée

Cette section présente le schéma de rebondissement interpolé proposé par Bouzidi et al. [Bouzidi 2001]. Le scénario typique du rebondissement est illustré sur la figure 5.1 pour une configuration simple unidimensionnelle. La distance entre le noeud fluide de frontière et la frontière solide est notée $q\Delta x$, où $q = |x_w - x_f|/\Delta x$ est la fraction située dans le fluide du lien intersecté par la frontière. En tenant compte du fait que dans la discrétisation Lattice-Boltzmann toute particule fluide parcourt un lien complet pendant le pas de temps Δt et en supposant que la collision de la particule fluide avec la frontière est instantanée, la distance parcourue par une particule propagée du noeud fluide vers la frontière est alors de même égale à Δx pendant le pas de temps Δt . Ainsi lorsque la frontière est située au milieu du lien, c'est à dire $q = 1/2$ (Fig. 5.1a), la particule retourne au noeud d'où elle est propagée après un pas de temps, ceci est en accord avec la condition de rebondissement parfait. Rappelons que cette dernière condition est réalisée en affectant avant l'étape de propagation au noeud solide de frontière une distribution dirigée vers le noeud fluide égale à la distribution du noeud fluide dirigée vers le noeud solide (Eq. 3.26). Donc après propagation tout ce passe



○ Noeud fluide, ● Noeud fluide de frontière, ● Noeud solide de frontière,
 ⊙ Noeud hors-réseau impliqué dans les interpolations

FIGURE 5.1 – Rebondissement d’une particule fluide sur un mur de position quelconque par rapport à la grille Lattice-Boltzmann.

comme si la particule propagée du noeud fluide est réfléchié à mi-chemin du lien entre les deux noeuds.

Pour les cas où la frontière n’est pas située au milieu du lien, les distributions à affecter aux noeuds solides de frontière sont construites à travers des interpolations spéciales. Lorsque $q < 1/2$ (Fig. 5.1b), une particule propagée du noeud fluide x_f , doit terminer son parcours en une position intermédiaire x_i . Cependant si le point de départ de la particule est supposé en x_i , son point d’arrivée après l’étape de propagation sera en x_f comme montré par la flèche en trait discontinu. La distribution f à la position x_i peut être construite à partir d’une interpolation avant l’étape de propagation. En pratique cette interpolation peut être linéaire en utilisant les distributions $f(x_f)$ et $f(x_f')$ ou bien quadratique en considérant en plus la distribution $f(x_f'')$. Lorsque $q > 1/2$ (Fig. 5.1c), la distribution arrivante au noeud fluide x_f peut être construite par une interpolation après propagation en utilisant les distributions résultantes aux positions x_i , x_f' et éventuellement x_f'' pour une interpolation quadratique. Cette interpolation peut être exprimée en termes des distributions de post-collision avant la propagation.

De cette façon, elle est calculée à la même étape que le cas où $q \leq 1/2$ dans le processus de calcul.

Il convient de rappeler la remarque que l'interpolation quadratique nécessite l'existence de trois noeuds fluides au droit du noeud solide de frontière tandis que l'interpolation linéaire ne nécessite que deux. Du côté précision, l'interpolation quadratique est meilleure mais du point de vue quantité de calculs l'interpolation linéaire est plus économique. D'autres part, du fait que l'interpolation linéaire nécessite un noeud en moins, elle est mieux adaptée dans le cas de milieux granulaires. En effet dans ce cas le domaine fluide voisin à un grain est souvent rétrécie à cause de la présence de grains voisins et l'existence d'un nombre suffisant de noeuds fluides pour effectuer l'interpolation n'est pas toujours sure. Donc l'utilisation de l'interpolation quadratique est plus contrainte.

Ainsi dans le présent travail les interpolations linéaires sont utilisées dans tous les cas où il existe au moins deux noeuds au droit du noeud solide de frontière, dans le cas où il n'en existe qu'un seul noeud la condition de rebondissement standard est appliquée, l'interpolation est ainsi abandonnée.

Les expressions des distributions à affecter aux noeuds solides de frontière pour être propagées vers les noeuds fluides voisins qui s'obtiennent partir d'interpolations linéaires sont [Bouzidi 2001] :

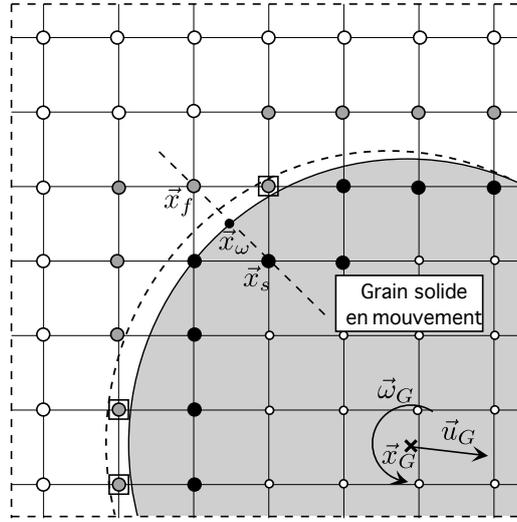
$$\begin{cases} f_i^{out}(x_s, t) = 2qf_i^{out}(x_f, t) + (1 - 2q)f_i^{out}(x_{f'}, t) + 6w_i\rho_w \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}_w}{c^2}, & q \leq \frac{1}{2} \\ f_i^{out}(x_s, t) = \frac{1}{2q}f_i^{out}(x_f, t) + \frac{2q-1}{2q}f_i^{out}(x_{f'}, t) + \frac{3}{q}w_i\rho_w \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}_w}{c^2}, & q \geq \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.1)$$

Dans ces expressions \vec{u}_w étant la vitesse de déplacement de la frontière.

5.2.2 Application de la condition de rebondissement interpolée aux grains solides en mouvement

Etant donné qu'il supposé dans ce travail que les grains sont de formes sphériques, pour tenir compte de la frontière réelle d'un grain il est procédé à chaque pas de temps par les étapes suivantes :

- définir les noeuds couverts par le grain c'est à dire les noeuds solides,



○Noeud fluide , ●Noeud fluide de frontière, ●Noeud solide de frontière,
 ◻Noeud initialement solide rentrant dans le domaine fluide au bout un pas de temps

FIGURE 5.2 – Grain solide en mouvement par rapport à une grille Lattice-Boltzmann

- calculer pour chaque lien coupé par la frontière sa fraction tombant dans le domaine fluide $q = \frac{\|\vec{x}_f - \vec{x}_w\|}{\|\vec{x}_f - \vec{x}_s\|}$ (voir Fig. 5.2),
- appliquer pour les noeuds solides de frontière la condition de rebondissement interpolée exprimée par les équations 5.1.

La vitesse de la frontière \vec{u}_w impliquée dans ces équations est calculée à partir de l'expression $\vec{u}_w = \vec{u}_G + \vec{r} \times \vec{\omega}_G$, où \vec{u}_G et $\vec{\omega}_G$ sont les vitesses de translation et de rotation du grain respectivement et $\vec{r} = \vec{x}_w - \vec{x}_G$ avec \vec{x}_G et \vec{x}_w sont respectivement les vecteurs positions du centre du grain et du point d'intersection de la frontière avec le lien considéré¹ (voir Fig. 5.2).

5.2.3 Distributions inconnues des noeuds réintégrant le domaine fluide suite au mouvement des grains

Lorsqu'un grain se déplace par rapport à la grille Lattice-Boltzmann, certains noeuds de statut solide à l'instant t réintègrent le domaine fluide au pas de temps suivant $t + \Delta t$ (ils sont indiqués en figure 5.2 par des ◻). Les distributions en ces noeuds ne sont alors pas définies et doivent être spécifiées au moment où ces noeuds

1. Dans la pratique \vec{x}_w est calculé à partir de l'expression $\vec{x}_w = \vec{x}_s + (1 - q) \times (\vec{x}_f - \vec{x}_s)$ en tenant compte que $\vec{x}_f - \vec{x}_s = \vec{e}/c$.

deviennent fluides. Il existe plusieurs méthodes pour définir ces distributions, certaines utilisent des extrapolations à partir des noeuds fluides voisins et d'autres adoptent les distributions d'équilibre en choisissant convenablement les valeurs des vitesses et des masses volumiques à introduire. Toutes ces méthodes produisent pratiquement les mêmes résultats [Lallemand 2003]. Dans ce travail la procédure adoptée consiste à utiliser les distributions d'équilibre calculées à partir de la masse volumique moyenne du fluide dans tout le système et de la vitesse de la frontière au droit du noeud considéré. Cette vitesse est supposée égale à la vitesse du grain au niveau du noeud juste avant de le quitter.

Il peut être intéressant de rappeler qu'en vertu de la condition 3.25 sur le nombre de Mach, la vitesse de la frontière (\vec{u}_w) est beaucoup plus faible devant la vitesse caractéristique du modèle², par conséquent, une frontière en mouvement traverse un lien de la grille Lattice-Boltzmann en plusieurs pas de temps.

5.3 Couplage Éléments Discrets – Lattice-Boltzmann

Le couplage Éléments Discrets – Lattice-Boltzmann consiste en la mise en oeuvre simultanée des deux méthodes, les principes de discrétisation attachés à ces méthodes sont donc maintenus. Le domaine spatial est alors entièrement discrétisé par une grille régulière fixe définissant les noeuds Lattice-Boltzmann, le mouvement éventuel des grains solides entraîne des déplacements par rapport à ces noeuds et peut modifier leurs statuts. Ce mouvement de grains qui sont modélisés par Éléments Discrets, est gouverné non seulement par les forces de contacts intergranulaires, mais aussi par les forces hydrodynamiques appliquées par le fluide saturant. Ces forces sont évidemment variables, par conséquent, elles doivent être réévaluées en permanence.

2. Pour une simulation précise, la condition sur le nombre de Mach impose que la vitesse du fluide simulé soit faible devant la vitesse caractéristique du modèle (c), et la vitesse maximale de la frontière d'un grain est au plus égale à la vitesse du fluide du fait qu'il est supposé qu'il n'y a pas de glissement entre le fluide et le solide.

5.3.1 Résolution de la discrétisation spatiale

La résolution de la discrétisation spatiale est conditionnée dans ce cas par les diamètres des grains, en effet le pas de discrétisation spatial doit être suffisamment faible devant le diamètre du grain pour que la géométrie de celui-ci soit correctement représentée par rapport au fluide et l'évaluation des forces hydrodynamiques soit faite avec une précision suffisante. Yu et al. [Yu 2003], en utilisant une condition de rebondissement interpolée, ont étudié l'effet de la résolution de discrétisation sur l'évaluation des forces hydrodynamiques pour des disques (2D) et des sphères (3D) dans un écoulement. Ils ont conclu que pour des nombres de Reynolds modérés, une précision satisfaisante est acquise au delà de résolutions d'environ dix pas ($10 \times \Delta x$) / diamètre pour un grain circulaire (2D) et sept pas ($7 \times \Delta x$) / diamètre pour un grain sphérique (3D).

5.3.2 Procédure d'incrémentation du temps

Etant donnée que chacune des deux méthodes couplées a un pas de temps approprié, le processus d'incrémentation pendant le calcul doit être détaillé. Comme mentionné précédemment (Sect. 3.7), le pas de temps dans la méthode Lattice-Boltzmann noté dans la suite (Δt_{LB}) dépend des autres paramètres de discrétisation, notamment le temps de relaxation addimensionné (τ) et le pas de discrétisation spatiale (Δx), si ces deux paramètres sont spécifiés et la viscosité du fluide est donnée le pas de temps se trouve alors imposé et il est calculé à partir de l'équation 3.24.

Quant au pas de temps relatif à la Méthode des Eléments Discrets³ noté dans la suite (Δt_{DE}), il doit être suffisamment faible devant la durée de contact minimale entre les grains, sa valeur maximale s'obtient à partir de la condition (Eq. 1.10), elle est notée (Δt_{DEmax}).

La valeur de (Δt_{LB}) est en général plus grande que (Δt_{DEmax}), l'idée est alors d'effectuer un certain nombre de pas de calcul pour la Méthode des Eléments Discrets contre un seul pas de calcul Lattice-Boltzmann.

Du fait que le pas de temps relatif à la Méthode des Eléments Discrets (Δt_{DE}) peut prendre toute valeur sous la condition ($\Delta t_{DE} \leq \Delta t_{DEmax}$), il est alors choisi

3. La dynamique moléculaire étant la Méthode aux Eléments discrets utilisée dans ce travail.

de sorte à effectuer un nombre entier de pas Δt_{DE} contre un pas Δt_{LB} , c'est à dire $\Delta t_{DE} \times n_d = \Delta t_{LB}$, avec n_d est un entier dont la valeur minimale est :

$$n_d = \text{Int} \left(\frac{\Delta t_{LB}}{\Delta t_{DEmax}} \right) + 1 \quad (5.2)$$

où $\text{Int}()$ indique la partie entière.

Le pas de temps Δt_{DE} peut alors être pris :

$$\Delta t_{DE} = \frac{\Delta t_{LB}}{n_d} \quad (5.3)$$

De cette façon, les forces hydrodynamiques sur les grains ne sont actualisées dans la Méthode des Eléments Discrets qu'au bout de chaque pas de temps Δt_{LB} , elles sont supposées constantes pendant Δt_{LB} . De même, l'actualisation des positions des grains dans la Méthode Lattice-Boltzmann ne se fait qu'au bout de chaque pas de temps Δt_{LB} .

5.3.3 Prise en compte de la poussée d'Archimède

La poussée d'Archimède sur les grains est prise en compte dans les calculs en multipliant l'accélération de gravité par le coefficient réducteur $(1 - \rho_f/\rho_s)$, où ρ_f et ρ_s sont les masses volumiques du fluide et des grains solides respectivement. Cette procédure permet de conserver les vraies valeurs des forces d'inertie des grains. En effet la procédure courante qui consiste à substituer la masse volumique des grains solides par sa correspondante déjaugée, provoque une réduction des forces d'inertie et par conséquence une modification du comportement dynamique, cette procédure reste néanmoins correcte dans le cas statique.

Validation du modèle couplé et simulations de dynamique des milieux granulaires saturés

Sommaire

6.1	Introduction	101
6.2	Simulations de validation	101
6.2.1	Force et moment sur une sphère dans un écoulement de Poiseuille	101
6.2.1.1	Description du problème à simuler	101
6.2.1.2	Résultats et discussions	104
6.2.1.3	Conclusion	106
6.2.2	Force hydrodynamique sur un grain en mouvement	107
6.2.2.1	Description du problème à simuler	107
6.2.2.2	Résultats et discussions	108
6.2.3	Sédimentation de deux grains, phénomène du “drafting, kissing and tumbling”	109
6.2.3.1	Description du problème à simuler	110
6.2.3.2	Résultats et discussions	111
6.2.3.3	Conclusion	113
6.3	Simulation de la boulangée du sable	113
6.3.1	Simulation 3D de la boulangée	114
6.3.2	Simulation 2D de la boulangée	116
6.3.3	Conclusion	120

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, on présente des applications de validation du modèle couplé et des simulations numériques de certains phénomènes de dynamique des milieux granulaires saturés. Les premières validations ont porté essentiellement sur le calcul des forces hydrodynamiques sur un grain fixe ou mouvant par rapport à la grille de discrétisation Lattice-Boltzmann. Le modèle est ensuite utilisé pour la simulation du phénomène "Drafting-Kissing-Tumbling" qui se produit en sédimentation de deux grains dans un fluide. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux obtenus par d'autres méthodes numériques.

Comme application du modèle couplé à des problèmes liés aux sables saturés, des simulations du phénomène de la boullance de dépôts granulaires sont réalisées. Les résultats obtenus sont présentés sous forme de visualisations graphiques permettant une meilleure compréhension du processus de boullance sous les différents gradients hydrauliques provoquants.

6.2 Simulations de validation

6.2.1 Force et moment sur une sphère dans un écoulement de Poiseuille

En première étape dans la validation, il serait intéressant de vérifier que les force et moment hydrodynamiques sur un grain fixe sont correctement calculés par le modèle. Pour cela les solutions analytiques établies par Wakiya (1957) sont utilisées pour la comparaison, ces solutions donnent la force de traînée et le moment sur une sphère fixe dans un écoulement de Poiseuille rampant ; c'est un écoulement entre deux plaques parallèles infinies à très bas nombre de Reynolds.

6.2.1.1 Description du problème à simuler

La configuration du problème en question est schématisée en figure (Fig. 6.1) et les expressions analytiques de la force hydrodynamique F_h et du moment M_h résultants sur la sphère sont [Clague 2001] :

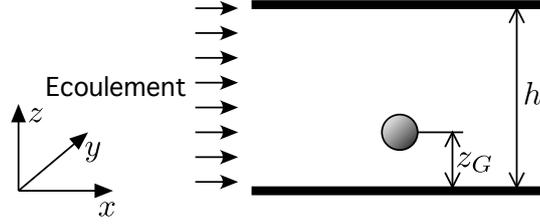


FIGURE 6.1 – Grain sphérique fixe dans un écoulement de Poiseuille entre deux plaques parallèles

$$F_h = 6\pi\mu r U_{z_G} \left[\frac{1 - \frac{1}{9} \left(\frac{r}{z_G}\right)^2}{1 - 0.6526 \left(\frac{r}{z_G}\right) + 0.3160 \left(\frac{r}{z_G}\right)^3 - 0.2420 \left(\frac{r}{z_G}\right)^4} \right] \quad (6.1)$$

$$M_h = \frac{8}{3}\pi\mu r^2 U_{z_G} \left(\frac{r}{z_G}\right) \left[1 + 0.0758 \left(\frac{r}{z_G}\right) + 0.0490 \left(\frac{r}{z_G}\right)^2 \right] \quad (6.2)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide, r le rayon de la sphère, U_{z_G} est la vitesse du fluide à la position z_G pour un écoulement de Poiseuille (en l'absence de la sphère), elle a pour expression :

$$U_{z_G} = \frac{1}{2\mu} (z_G h - z_G^2) \left(-\frac{dp}{dx}\right) \quad (6.3)$$

où $\frac{dp}{dx}$ est le gradient de pression dans la direction x .

L'expression 6.2 donne la valeur absolue du moment hydrodynamique autour de l'axe y , le sens de ce moment est donné par la vitesse la plus élevée dans les espaces en bas et en haut du grain, celle-ci est évidemment plus grande du côté le plus large. Le moment hydrodynamique est alors positif (dans le sens des aiguilles d'une montre) si $z_G \leq \frac{h}{2}$ et négatif si $z_G \geq \frac{h}{2}$.

Dans nos simulations l'écoulement est généré par une force de volume équivalente $\rho a_x = -\frac{dp}{dx}$ et la condition de non glissement sur les plaques horizontales est introduite. Du fait qu'il est impossible de simuler le problème sous sa forme infinie, des frontières périodiques sont utilisées dans les deux directions x et y . Le problème simulé alors est une cellule périodique dont les dimensions sont les périodes dans les deux directions D_x et D_y (Fig. 6.2). Ces périodes sont augmentées graduellement afin de montrer la convergence vers le cas infini. Les paramètres géométriques du problème simulé sont pris $r/h = 0.11$, $z_G/h = 0.25$ et des périodes égales dans les deux directions soit

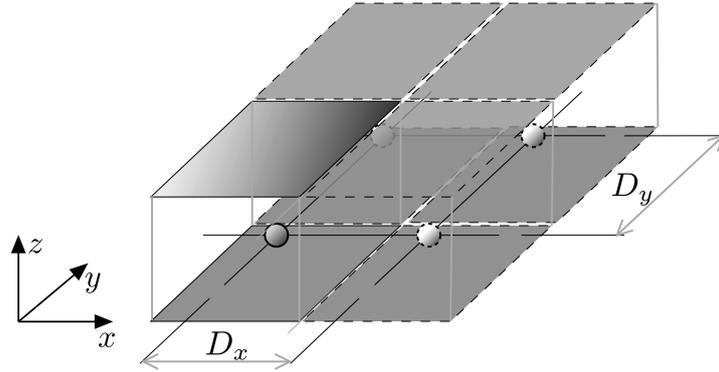


FIGURE 6.2 – Cellule périodique simulée

$$D_x = D_y = D.$$

Le calcul des forces hydrodynamiques avec une résolution minimale de discrétisation (voir Sect. 5.3) est aussi testé dans ces simulations, la résolution étant caractérisée dans ce cas par le rayon de la sphère en unités Lattice-Boltzmann $\bar{r} = r/\Delta x$. Trois séries de simulations sont alors réalisées à savoir ; pour des résolutions $\bar{r} \approx 3$, $\bar{r} \approx 3,5$ et $\bar{r} \approx 5,5$. Les valeurs précises des rayons \bar{r} sont calculées à partir de la condition $r/h = 0.11$ tout en tenant compte que $\bar{h} = h/\Delta x$ doit être un entier du fait que les conditions de rebondissement parfait sont utilisées sur les plaques horizontales.

Le Nombre de Reynolds particulière ($Re = \frac{U_{zG} \times d}{\nu}$) calculé sur la base du diamètre du grain ($d = 2r$), de la viscosité du fluide (ν) et de la vitesse du fluide à la position z_G en l'absence du grain (Eq. 6.3), est fixé dans ces simulations à $Re = 0,0006$. Par conséquence, la valeur adimensionnelle de l'accélération à introduire dans une simulation peut être calculée à partir de l'expression :

$$\bar{a}_x = \frac{16}{27} \frac{(\tau - 0,5)^2}{\bar{r}\bar{h}^2} Re \quad (6.4)$$

Les valeurs des paramètres adimensionnels utilisés sont récapitulés dans le tableau 6.1, deux valeurs du temps de relaxation adimensionnel sont utilisées à savoir $\tau = 1,0$ et $\tau = 0,7$, le rapport de la période de la cellule simulée au rayon du grain D/r est varié entre les valeurs 3 à 32 environ.

Tableau 6.1 – Paramètres addimensionnels utilisés dans les simulations

\bar{h}	28	32	50
\bar{r}	3,08	3,52	5,50
$\bar{a}_x (\tau = 1, 0)$	$3,681 \times 10^{-8}$	$2,466 \times 10^{-8}$	$6,465 \times 10^{-9}$
$\bar{a}_x (\tau = 0, 7)$	$5,890 \times 10^{-9}$	$3,946 \times 10^{-9}$	$1,034 \times 10^{-9}$

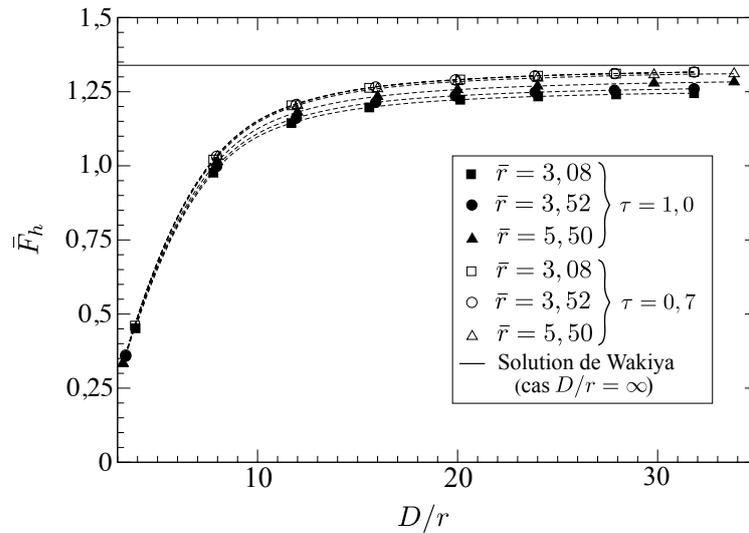


FIGURE 6.3 – Evolution de la force de traînée subie par le grain avec l’augmentation de la période de la cellule simulée.

6.2.1.2 Résultats et discussions

Les figures 6.3 et 6.4 montrent l’évolution de la force de traînée et du moment subis par le grain sous l’écoulement avec l’augmentation du rapport D/r . Sur ces deux graphiques sont représentés la force et le moment addimensionnés $\bar{F}_h = F_h / (6\pi\mu r U_{z_G})$ et $\bar{M}_h = M_h / ((8/3)\pi\mu r^2 U_{z_G} r / z_G)$ respectivement. Les lignes discontinues passant par les points des résultats du calcul sont représentées juste pour guider l’œil. Afin de permettre la comparaison avec la solution de Wakiya (cas $D/r = \infty$), des lignes droites obtenues des équations 6.1 et 6.2 sont aussi représentées.

Ces graphiques montrent clairement que la force de traînée et le moment hydrodynamiques augmentent avec l’augmentation de la distance entre les grains (période de la cellule). Ce résultat s’explique par le fait que l’éloignement des grains ou autrement

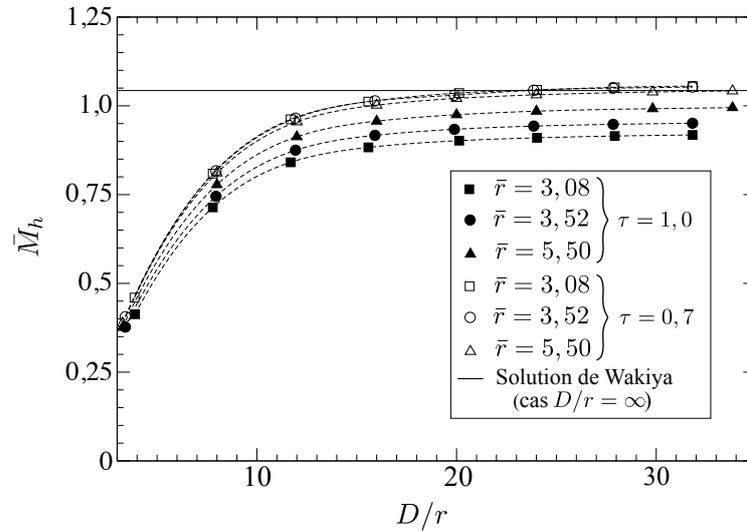


FIGURE 6.4 – Evolution du moment subi par le grain avec l'augmentation de la période de la cellule simulée.

dit la diminution du nombre d'obstacles dans l'écoulement entraîne une augmentation de la vitesse du fluide au voisinage du grain et par conséquent une augmentation des forces hydrodynamiques, au contraire le rapprochement des grains réduit les forces hydrodynamiques selon un raisonnement inverse. Pour de grandes valeurs de la période, il est clair que la force et le moment calculés tendent vers la solution de Wakiya qui correspond au cas du domaine infini ($D/r = \infty$).

Ces graphiques montrent aussi que la valeur du temps de relaxation $\tau = 0,7$ donne des résultats plus précis relativement à la solution de référence (solution de Wakiya), il a été vérifié par ailleurs que l'augmentation du temps de relaxation (i.e. $\tau > 0,1$) provoque une légère diminution des forces hydrodynamiques, au contraire sa diminution provoque une légère augmentation de ces forces.

Il peut être constaté aussi pour les deux graphiques que la résolution la plus élevée ($\bar{r} = 5,50$) produit les résultats plus proches à la solution référence. Néanmoins il est clair qu'à $\tau = 1,0$, la diminution de la résolution conduit à une augmentation de l'erreur par défaut sur les forces hydrodynamiques, par contre à $\tau = 0,7$ la diminution de la résolution s'accompagne d'une légère augmentation des forces hydrodynamiques. Cette augmentation est plus marquée pour le moment hydrodynamique, ceci est probablement due à l'augmentation de la différence de vitesse entre le haut et le bas du

grain où la vitesse du fluide se trouve sous-estimée du fait que la résolution devient faible dans cet espace¹.

Si on ne s'intéresse qu'à la force hydrodynamique, il convient de noter que l'apport maximal ramené en passant de la résolution $\bar{r} = 3,08$ la résolution $\bar{r} = 5,50$ reste faible (2,7% pour $\tau = 1,0$ et 0,44% pour $\tau = 0,7$), ceci permet de conclure qu'une résolution $\bar{r} \approx 3$ est suffisante dans la pratique. Ce résultats est en accord avec les conclusions de Yu et al. [Yu 2003] qui recommandent une résolution $\bar{r} \approx 3,5$ pour des nombres de Reynolds faibles à modérés.

Pour le moment hydrodynamique la différence maximal entre les résultats des résolutions $\bar{r} = 3,08$ et $\bar{r} = 5,50$ est de 7,35% pour $\tau = 1,0$ et 1,29% pour $\tau = 0,7$, il est claire que l'erreur est relativement importante pour $\tau = 1,0$, par conséquent il est recommandé d'utiliser un temps de relaxation au voisinage de 0,7 dans les simulations où les le moment hydrodynamique intervient.

6.2.1.3 Conclusion

A l'issue de cette étude, il est convenable de noter les remarques essentielles suivantes :

- La procédure mise en oeuvre pour le calcul des forces hydrodynamiques notamment l'utilisation de la méthode des échanges de quantités de mouvement avec une condition de rebondissement interpolée, donne des résultats qualitativement satisfaisants.
- La précision du calcul dépend de la valeur du temps de relaxation adimensionnel τ , il semble que la valeur $\tau = 0,7$ donne des résultats précis.
- En recoupant les résultats obtenus avec ceux de la référence [Yu 2003], il est possible de conclure que la résolution minimale nécessaire pour un calcul satisfaisant des forces hydrodynamiques pour des nombres de Reynolds faibles à modérés correspond à la condition que le pas de discrétisation soit inférieur au septième ($1/7$) du diamètre de la sphère approximativement, c'est à dire $r \approx 3,5\Delta x$. De

1. En effet la résolution dans cet espace est de 4 noeuds pour $\bar{r} = 3,08$ et $\bar{r} = 3,52$ et il est montré lors de l'étude paramétrique sur l'écoulement de poiseuille généré par force de volume que l'erreur par défaut sur la vitesse maximale est bien marquée pour les faibles résolutions lorsque la valeur du temps de relaxation τ est petite.

plus, il est recommandé d'utiliser un temps de relaxation au voisinage de 0,7 pour un calcul précis du moment hydrodynamique.

6.2.2 Force hydrodynamique sur un grain en mouvement

Il est montré dans la section précédente que les forces hydrodynamiques sur un grain fixe sont correctement calculées par le modèle, cependant cette validation n'implique pas le mouvement du grain par rapport à la grille de discrétisation. L'objectif de cette section est alors de montrer la robustesse du calcul des forces hydrodynamiques dans le cas où le grain effectue un mouvement par rapport à la grille de discrétisation Lattice-Boltzmann. Le test de validation utilisé pour cette fin, consiste en la vérification de l'invariance Galiléenne, stipulant que la force hydrodynamique sur un grain en mouvement uniforme dans un fluide, est la même que celle du cas inverse, où le grain est fixe est le système se déplace à la même vitesse dans le sens inverse

6.2.2.1 Description du problème à simuler

La configuration géométrique du problème à simuler est similaire à celle de la section précédente (Figs. 6.1 et 6.2) avec les spécifications $r/h = 0.11$, $z_G/h = 0.5$, $D_y/r = 6$ et $D_x/r = 45$. Des conditions périodiques sont utilisées dans les deux directions x et y et la condition de non-glissement du fluide sur les plaques est imposée.

A l'instant $t = 0$, le fluide dans le canal est au repos et le grain entame de façon instantanée un mouvement de vitesse constante $u_G = U_0$ dans la direction x . La position initiale du grain étant $(x_{G_0}, y_{G_0}, z_{G_0}) = (D_x/10, D_y/2, h/2)$. Ce problème doit théoriquement être équivalent au problème suivant : le canal avec le fluide sont en mouvement dans la direction x à une vitesse constante $-U_0$, à l'instant $t = 0$, le grain est placé à sa position et est maintenu fixe. La vitesse des plaques de haut et de bas est maintenue $u_W = -U_0$.

Dans le premier cas le grain est en mouvement par rapport à la grille de discrétisation Lattice-Boltzmann. Par contre dans le second, le grain est fixe mais le fluide est en écoulement imposé par le mouvement des plaques supérieure et inférieure, le grain se trouve alors fixe par rapport à la grille de discrétisation.

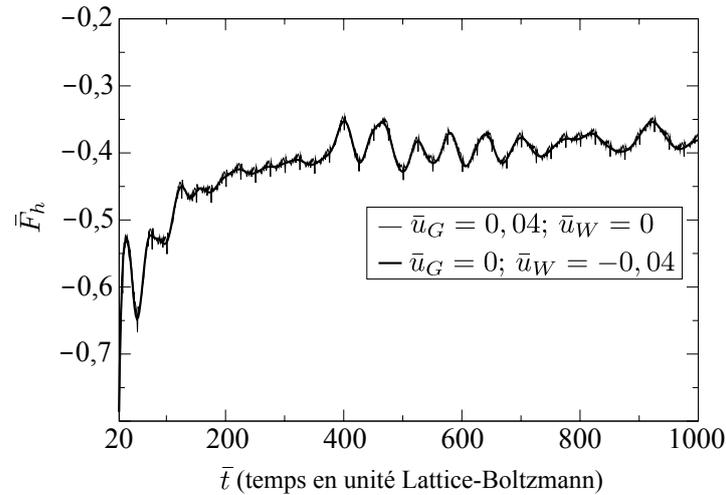


FIGURE 6.5 – Force de traînée en fonction du temps, le temps est en unité Lattice-Boltzmann ($\bar{t} = t/\Delta t$)

Les paramètres adimensionnels des simulations sont : le rayon du grain en unités Lattice-Boltzmann $\bar{r} = 5,5$, la vitesse adimensionnelle imposée $\bar{U}_0 = 0,04$ et le nombre de Reynolds $R_e = 10$. En tenant compte de l'expression $R_e = (2\bar{r}\bar{U}_0)/\bar{\nu}$, le temps de relaxation nécessaire pour produire un tel nombre de Reynolds est alors $\tau = 0,632$.

6.2.2.2 Résultats et discussions

La figure 6.5 montre la force de traînée appliquée sur le grain en fonction du temps. La force représentée est en unités Lattice-Boltzmann (sans dimensions) qui a pour expression $\bar{F}_h = F_h/(\Delta x^2 c^2 \rho_f)$.

Deux courbes sont montrées, la première est fluctuante (en trait fin), elle correspond au cas du grain en mouvement par rapport à la grille de discrétisation à une vitesse $\bar{u}_G = 0,04$ et la deuxième est lisse (sans fluctuations, en trait épais), elle correspond au cas du grain fixe subissant une force hydrodynamique suite au mouvement des plaques supérieure et inférieure à une vitesse $\bar{u}_W = -0,04$.

Ces courbes montrent que la force de traînée suit une même allure de variation pour les deux cas. Les fluctuations constatées pour le cas où le grain effectue un mouvement par rapport à la grille de discrétisation sont globalement faibles comparativement à la valeur moyenne de la force. Ces fluctuations peuvent être attribuées à la manière d'estimer les distributions pour les noeuds quittant le domaine solide pour rejoindre le

domaine fluide pendant le mouvement du grain² (voir discussion en sect. 5.2.3).

6.2.3 Sédimentation de deux grains, phénomène du “drafting, kissing and tumbling”

Les deux validations réalisées plus haut ne font pas intervenir le mouvement libre du grain et le couplage effectif des deux méthodes Eléments Discrets - Lattice-Boltzmann puisque les contacts intergranulaires ne sont pas impliqués. Dans cette application les collisions intergranulaires sont considérées simultanément avec les réactions hydrodynamiques en simulant la sédimentation de deux grains dans une colonne de fluide. Il est connu que la chute de deux particules situées approximativement sur une même verticale dans un fluide Newtonien reproduit le phénomène “drafting, kissing and tumbling”. En effet, une fois les grains sont en mouvement (Fig. 6.6), le premier grain (grain inférieur ou frontal) subit plus de résistance du fluide que le second, par conséquent sa vitesse se trouve relativement réduite, donc il se produit un rapprochement des deux grains où autrement un entraînement du deuxième grain par le grain frontal. Cet entraînement fini par le contact des deux grains, qui poursuivent le mouvement de chute l’un derrière l’autre à la même vitesse. Cet état n’est pas stable, en effet après un certain moment, le deuxième grain empêché d’avancer par le grain frontal dépasse celui-ci en le contournant, ce contournement se produit comme si les deux grains effectue une acrobatie.

Ce phénomène a été montré expérimentalement par Fortes et al. [Fortes 1987] et capté par des simulations numériques à travers différentes méthodes [Patankar 2000, Patankar 2001, Feng 2004, Qi 1999, Strack 2007].

Bien que le phénomène peut être capté par une simulation 3D comme par une simulation 2D, cette dernière est plus attrayante du fait qu’elle permet une visualisation plus facile, en effet, dans le cas 3D, un grain peut passer derrière l’autre et devenir invisible.

2. Il est vérifié par ailleurs que les chutes la plus élevées sur la force calculée se produisent lorsque les noeuds qui se trouvent sur la droite horizontale orientée suivant x , passant par le centre de gravité du grain changent de statut (solide à fluide).

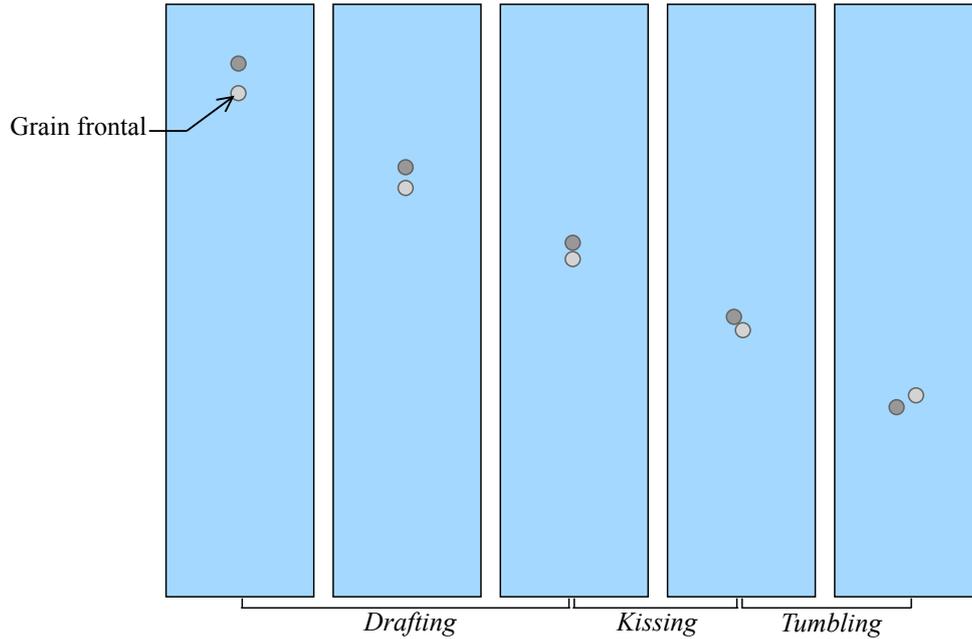


FIGURE 6.6 – Illustration du phénomène “drafting, kissing and tumbling”

6.2.3.1 Description du problème à simuler

Afin de comparer le couplage présenté avec les méthodes numériques précédentes, une simulation 2D du phénomène est réalisée. Les conditions de l’expérience simulée sont similaires à celles de simulations numériques présentées par Patankar et al. [Patankar 2001] en utilisant une méthode d’éléments finis et Feng et Michaelides [Feng 2004] en utilisant un modèle de frontières immergées avec la méthode Lattice-Boltzmann.

Les propriétés géométriques du système à simuler sont montrées sur la figure 6.7, la colonne du fluide est de largeur $L_x = 2 \text{ cm}$ (direction x), de hauteur $L_y = 8 \text{ cm}$ (direction y). Le fluide a les propriétés de l’eau, de viscosité dynamique $\mu = 0.01 \text{ g/cm.s}$ et de masse volumique $\rho_f = 1 \text{ g/cm}^3$. Les grains solides sont de formes circulaires de même rayon $r = 0.1 \text{ cm}$ et de masse volumique $\rho_s = 1.01 \text{ g/cm}^3$. Initialement les deux grains sont positionnés au centre de la colonne, le premier à la hauteur de $6,8 \text{ cm}$ et le second à la hauteur 7.2 cm . La sédimentation des deux grains commence à l’instant $t = 0$ sous l’effet de la gravité. Il convient de signaler que l’accélération de gravité agissante dans le sens négatif de l’axe y , prise $g = 980 \text{ m/s}^2$, est modifiée selon la

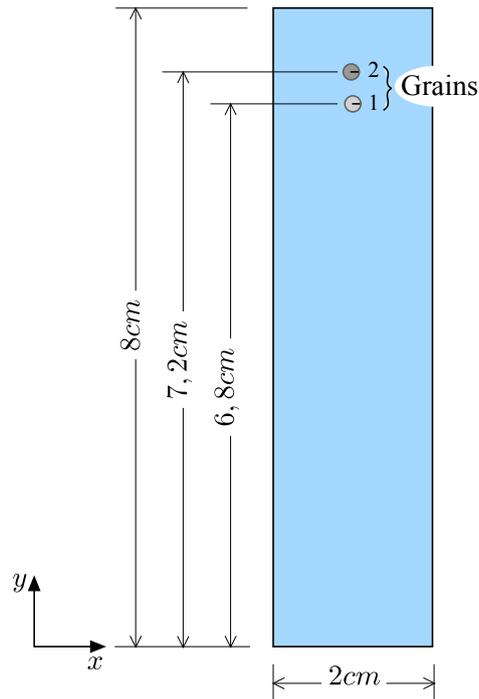


FIGURE 6.7 – Données géométriques initiales de l’expérience simulée du phénomène “drafting, kissing and tumbling”

procédure présentée en Sect. 5.3.3 afin de tenir compte de la poussée d’Archimède.

La colonne est discrétisée dans les deux directions x et y en 100×400 noeuds respectivement, de cette façon le rayon du grain en unités Lattice-Boltzmann est de $\bar{r} = 5,0$. La valeur du temps de relaxation utilisée est $\tau = 0,75$.

6.2.3.2 Résultats et discussions

La figure 6.8 montre les positions des grains à différents instants, des lignes droites (rayons) attachées aux grains sont représentées pour montrer leur rotation pendant la sédimentation. Il est clair que le phénomène "drafting, kissing and tumbling" est bien capté par le modèle couplé Lattice-Boltzmann–Éléments Discrets. Du point de vue qualitatif, le processus de sédimentation observé est semblable à celui obtenu par Feng and Michaelides [Feng 2004].

La figure 6.9 montre l’évolution en fonction du temps, des vitesses verticales des grains obtenues à partir de la simulation réalisée ainsi que celles obtenues par Patankar [Patankar 2001] et Feng et Michaelides [Feng 2004]. Il convient de remarquer que les

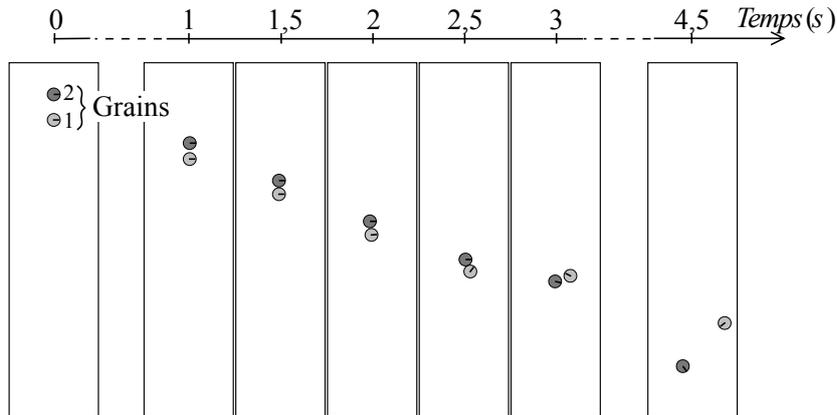


FIGURE 6.8 – Processus de sédimentation obtenu par la simulation numérique

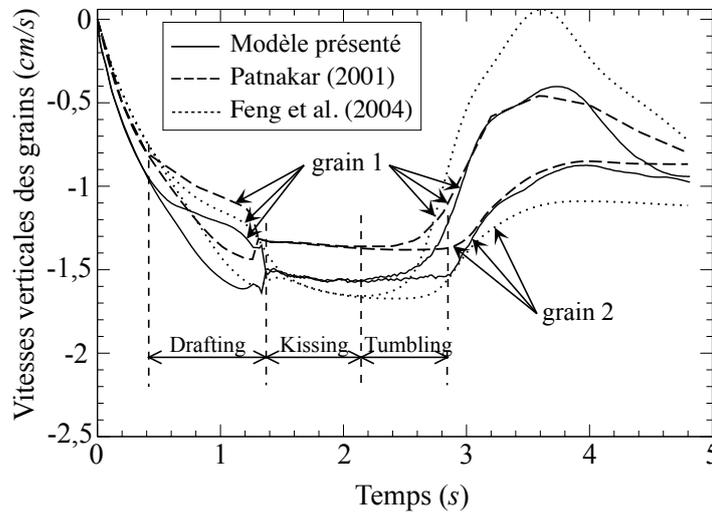


FIGURE 6.9 – Vitesses verticales des grains en fonction du temps

résultats de ces derniers auteurs, qui ont utilisé un modèle basé sur la méthode Lattice-Boltzmann, sont obtenus avec une résolution double par rapport à celle utilisée dans notre simulation (c'est-à-dire $\bar{L}_x \times \bar{L}_y = 200 \times 800$).

Ce graphique montre une claire similarité de l'évolution des vitesses obtenues par les trois méthodes, en effet les différentes phases du phénomène se produisent à des temps quasiment identiques pour les trois méthodes. Du point de vue quantitatif, des écarts plus ou moins importants entre les résultats des trois méthodes sont observés pendant les différentes phases. Cependant l'explication de ces écarts reste difficile du fait qu'il n'y a pas de solution exacte qui peut servir de référence³. Des simulations du

3. Dans un souci de faire une comparaison quantitative crédible, nous avons pensé à comparer la

problème en utilisant des discrétisations plus raffinées et différentes valeurs du temps de relaxation sont testées, les résultats obtenus sont les mêmes avant la phase d'entraînement "drafting", mais des perturbations sont remarquées pour les phases suivantes. Il convient de mentionner cependant que les écarts résultants après la phase du basculement "tumbling" sont naturellement irréguliers puisqu'ils se produisent après une phase d'instabilité.

6.2.3.3 Conclusion

La sédimentation de deux grains voisins situés approximativement sur une même verticale fait apparaître le phénomène "drafting, kissing and tumbling". Ce phénomène qui fait intervenir les deux interactions fluide-grain et grain-grain est simulé par le modèle couplé présenté Lattice-Boltzmann–Elément Discrets. Les résultats obtenus sont qualitativement similaires à ceux provenant d'autres méthodes numériques donnés dans la littérature. Par ailleurs, il est vérifié que l'augmentation de la résolution des grains au delà de celle recommandée par Yu et al. [Yu 2003] qui est de $\bar{r} = 5\Delta x$ dans le cas 2D, n'a pas d'apport considérable sur les résultats.

6.3 Simulation de la boullance du sable

Comme application du modèle couplé présenté à des problèmes liés aux sables saturés, des simulations du phénomène de la boullance des sables sont réalisées. Du fait de sa nature micromécanique, il est évident que ce modèle ne permet pas la simulation du phénomène dans sa taille réelle. Ces simulations représentent alors, une approche d'analyse permettant de mieux comprendre le phénomène qui se produit dans la nature.

Le phénomène de boullance doit théoriquement être approché par un modèle 3D, en effet la modélisation 2D n'est pas adaptée à un tel comportement hydromécanique puisqu'elle ne permet pas d'écoulements entre les grains qui sont en contacts. A titre indicatif, dans le cas de dépôt granulaire cette modélisation génère des pores intergranulaires non inter-connectés et le milieu simulé est alors imperméable.

vitesse de sédimentation d'un grain avec la vitesse de Stokes, néanmoins une telle comparaison est difficile puisqu'elle fait appel à un modèle de grande taille pour éliminer l'influence non négligeable des bords du domaine du fluide

Les dépôts granulaires soumis à la boullance dans la suite, sont polydisperses, composés de grains sphériques de diamètres minimum et maximum $0,4$ et $0,8\text{ mm}$ respectivement, ils sont construits d'une façon similaire à celle utilisée en section 4.3.1. Une fois le dépôt de grains est construit, il est mis dans une colonne d'eau de même section et de hauteur plus grande, puis soumis à un gradient hydraulique ascendant sous l'effet d'une différence de pression appliquée entre les surfaces inférieure et supérieure de cette colonne. La viscosité dynamique et la masse volumique de l'eau sont prise $\mu = 0.01\text{ g/cm.s}$ et $\rho_f = 1\text{ g/cm}^3$ et la masse volumique des grains solides est approximativement celle des grains de sable $\rho_s = 2.6\text{ g/cm}^3$.

6.3.1 Simulation 3D de la boullance

Plusieurs simulations 3D ont été réalisées, la simulation décrite dans la suite n'étant qu'un exemple. Le dépôt utilisé est composé de 100 grains et périodique dans les deux directions horizontales, de période $2,4\text{ mm}$. Les discrétisations dans les deux directions horizontales sont de $40\Delta x \times 40\Delta x$, de cette façon la résolution du plus petit grain est $\bar{d}_{min} = 6,67$. Le gradient hydraulique critique étant celui correspondant à une pression provoquant une force verticale égale au poids total déjaugé du dépôt, ainsi le gradient appliqué est calculé comme le rapport du produit de la pression appliquée par le carré de la période au poids déjaugé du dépôt.

Afin de voir son comportement en fonction du gradient hydraulique appliqué, ce dépôt est soumis à différents gradients hydrauliques i variant au voisinage du gradient hydraulique critique i_c , il est en général constaté que :

- Pour $i \ll i_c$ rien ne se produit, le dépôt reste à son état initial.
- Pour i légèrement inférieur à i_c , il se produit dans certains cas mais pas pour tous, une sorte de relâchement qui commence du bas du dépôt puis les grains commencent à subir un charriage vers le haut, la figure 6.10 montre ce comportement pour un gradient $i \approx 0,92i_c$.
- Pour $i = i_c$, le dépôt entame un mouvement vers le haut avec sa forme initiale conservée mais il se relâche à partir de la base, au fur et à mesure du mouvement.
- Pour $i > i_c$, le dépôt est transporté par le fluide vers le haut avec sa forme initiale conservée mais au fur et à mesure du mouvement il y a des grains qui se détachent

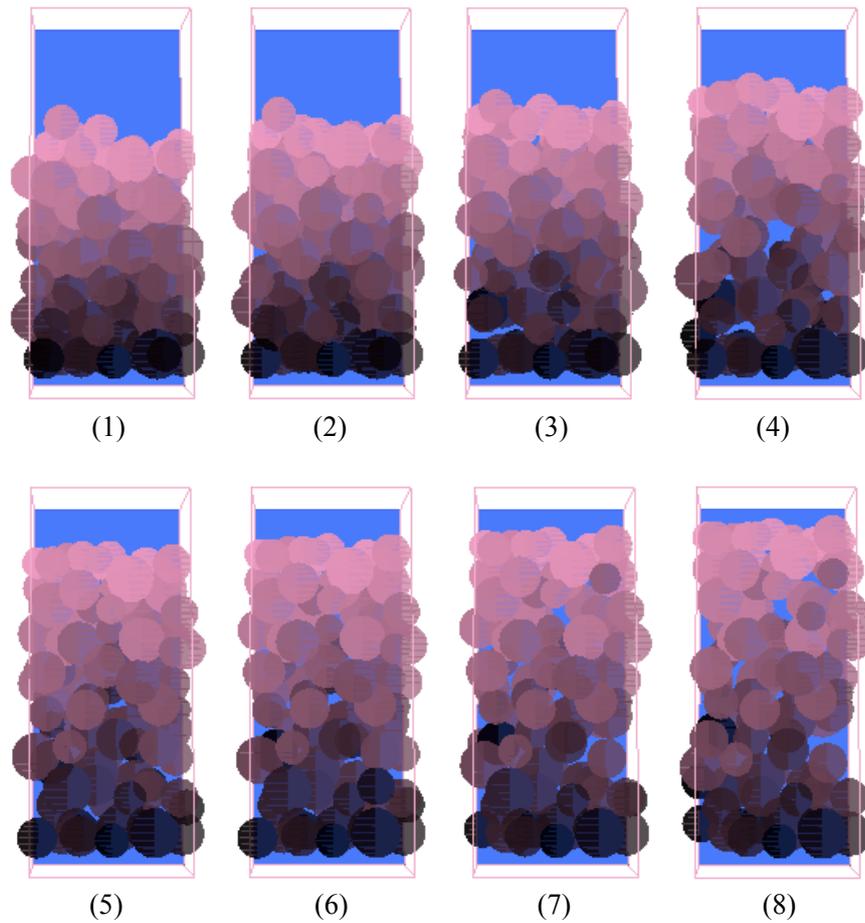


FIGURE 6.10 – Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 3D de la bouillie d’un dépôt de grains pour $i \approx 0,92i_c$. L’image (1) correspond à l’état initial du dépôt non soumis à l’écoulement.

du bas.

Ces constats indiquent à priori que la bouillie se produit pour tous les cas ou $i \geq i_c$, mais aussi pour certains cas avec $i < i_c$!. Des résultats semblables sont obtenus pour d’autres échantillons avec de plus grands nombres de grains, mais le gradient minimal au dessous du gradient critique qui provoque la bouillie est variable, il semble qu’il dépend de l’état de compacité du dépôt et de la vitesse d’application de la pression.

Du point de vue théorique la bouillie pour $i \geq i_c$ est justifiée mais pour $i < i_c$ elle n’est pas prévue, c’est pourquoi, il est intéressant d’en trouver une explication. Une façon directe pour comprendre ce qui se passe dans ce cas est de visualiser le mouvement des grains du dépôt, néanmoins pour une modélisation 3D cette visualisation est

difficile. Cette difficulté nous a conduit à chercher une façon de simuler la boullance en 2D qui permet une visualisation facile.

6.3.2 Simulation 2D de la boullance

L'idée qui pourrait permettre une modélisation 2D de la boullance consiste à laisser des espaces de liaison des pores intergranulaires. Ces espaces peuvent être créés en augmentant légèrement les rayons des grains dans la modélisation par éléments discrets et en maintenant les vrais rayons dans la discrétisation Lattice-Boltzmann. De cette façon les forces de contact entre les grains prennent effet avant que le contact se produit réellement, ce qui permet de laisser un espace pour l'écoulement entre les grains. Dans cette étude, la distance ajoutée au vrai rayon dans le calcul par éléments discrets est prise égale au pas de discrétisation spatiale Lattice-Boltzmann (Δx). Par conséquent, l'espace libre entre chaque deux grains doit contenir au moins un noeud de la grille Lattice-Boltzmann.

Le dépôt utilisé est composé de 300 grains et périodique dans la direction horizontale, de période $14,4\text{ mm}$. La hauteur moyenne résultante est d'environ $8,8\text{ mm}$ et le poids total déjaugé est de $1,265\text{ N}$. La discrétisation dans la direction horizontale est de $400\Delta x$, de cette façon la résolution du plus petit grain est $\bar{d}_{min} \approx 11$.

Tout au début, il est vérifié que pour le cas d'un dépôt stable soumis à un écoulement stationnaire la résultante des forces hydrodynamiques sur les grains est égale à la résultante de la pression appliquée. Une pression verticale de résultante $1,144000\text{ N}$ est lentement appliquée⁴ et la résultante des forces hydrodynamiques sur les grains est calculée à chaque pas de temps. Le dépôt est resté tous le temps stable et la force calculée a montré des perturbations qui se sont atténuées au fur et à mesure de l'avancement du temps. Ces perturbations résultent du régime transitoire provoqué par l'application de la pression. La valeur moyenne de la résultante des forces hydrodynamiques obtenue sur plusieurs pas temps est de $1,144026\text{ N}$.

Le dépôt est soumis ensuite à trois gradients hydrauliques différents notamment : $i = 1,1 \times i_c$, $i = i_c$ et $i = 0,968 \times i_c$. Les figures 6.11, 6.12 et 6.13 montrent des visualisations de l'évolution du dépôt en fonction du temps sous l'effet des trois gradient

4. Le gradient hydraulique correspondant est de $i \approx 0,90i_c$

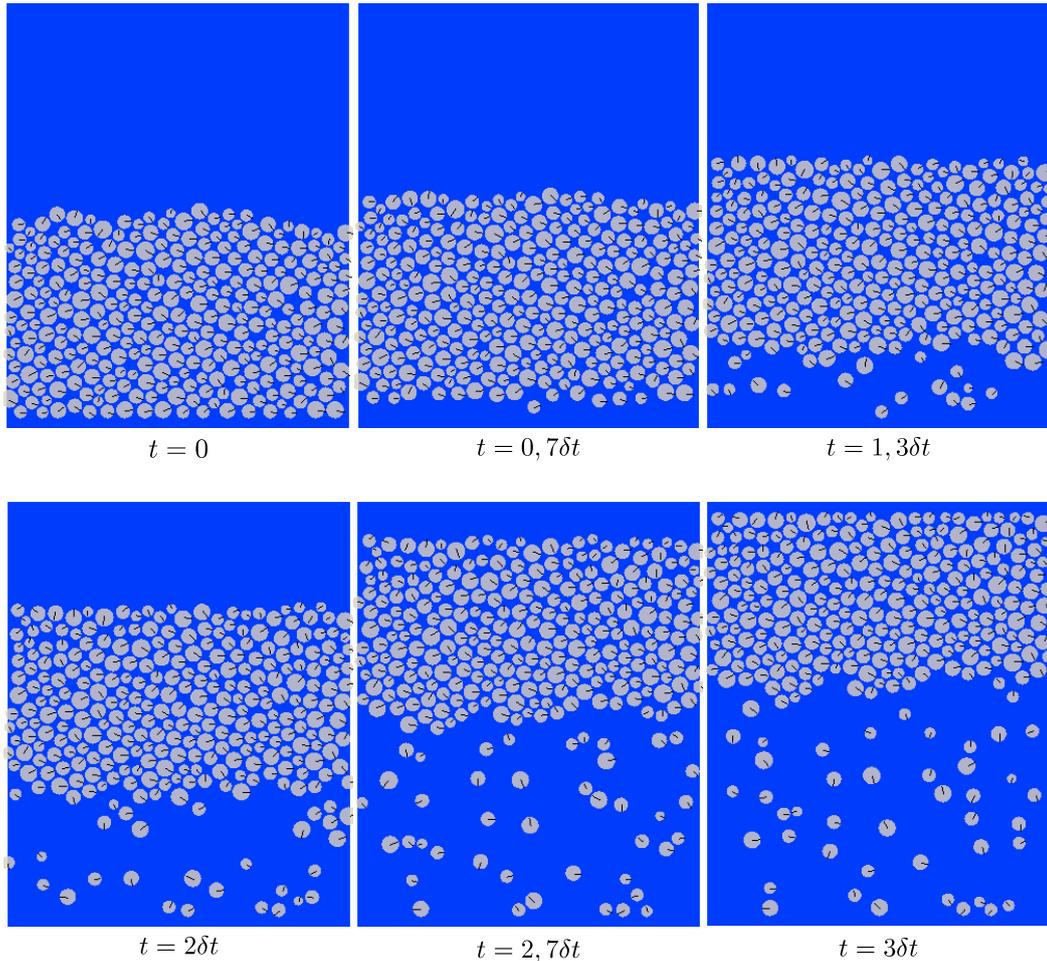


FIGURE 6.11 – Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangée d’un dépôt de grains pour $i = 1,1i_c$, $\delta t = 0,065 s$.

hydrauliques $i = 1,1 \times i_c$, $i = i_c$ et $i = 0,968 \times i_c$ respectivement. L’incrément de temps utilisé dans les figures ($\delta t = 0,065 s$) est choisi arbitrairement, il est utilisé juste pour simplifier la comparaison entre les trois cas. Ces figures montrent que la boulangée se produit pour les trois gradients appliqués.

Les figures 6.11 et 6.12 correspondantes aux gradients $i = 1,1 \times i_c$ et $i = i_c$ montrent que la boulangée se produit d’une façon semblable pour des gradients $i \geq i_c$, en effet le dépôt est totalement soulevé initialement, mais pour un faible gradient $i = i_c$, il se relâche rapidement par contre pour un gradient élevé, le dépôt peut être soulevé comme un bouchon, la cause peut être attribuée à la valeur élevée de la pression appliquée en bas du dépôt, qui ne permet pas le relâchement. D’autres parts, il peut être constaté

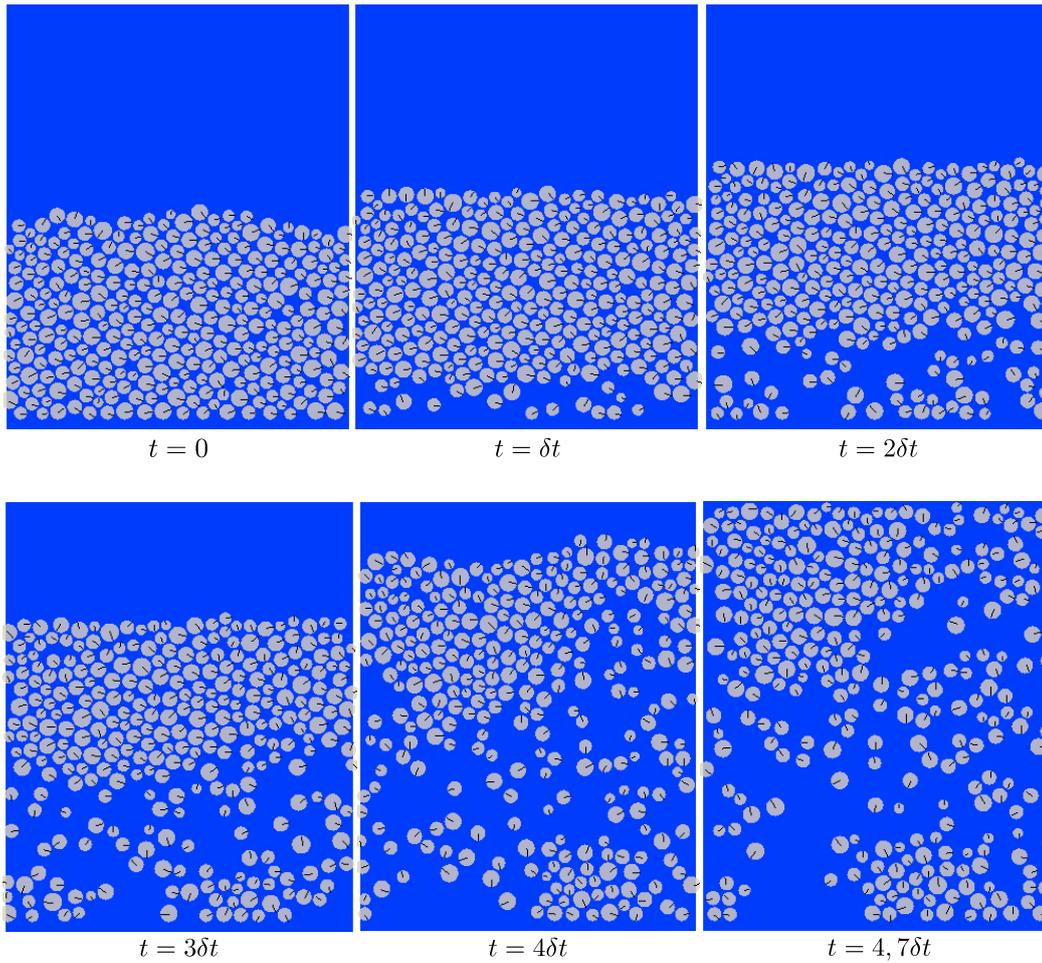


FIGURE 6.12 – Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangerie d'un dépôt de grains pour $i = i_c$, $\delta t = 0,065$ s.

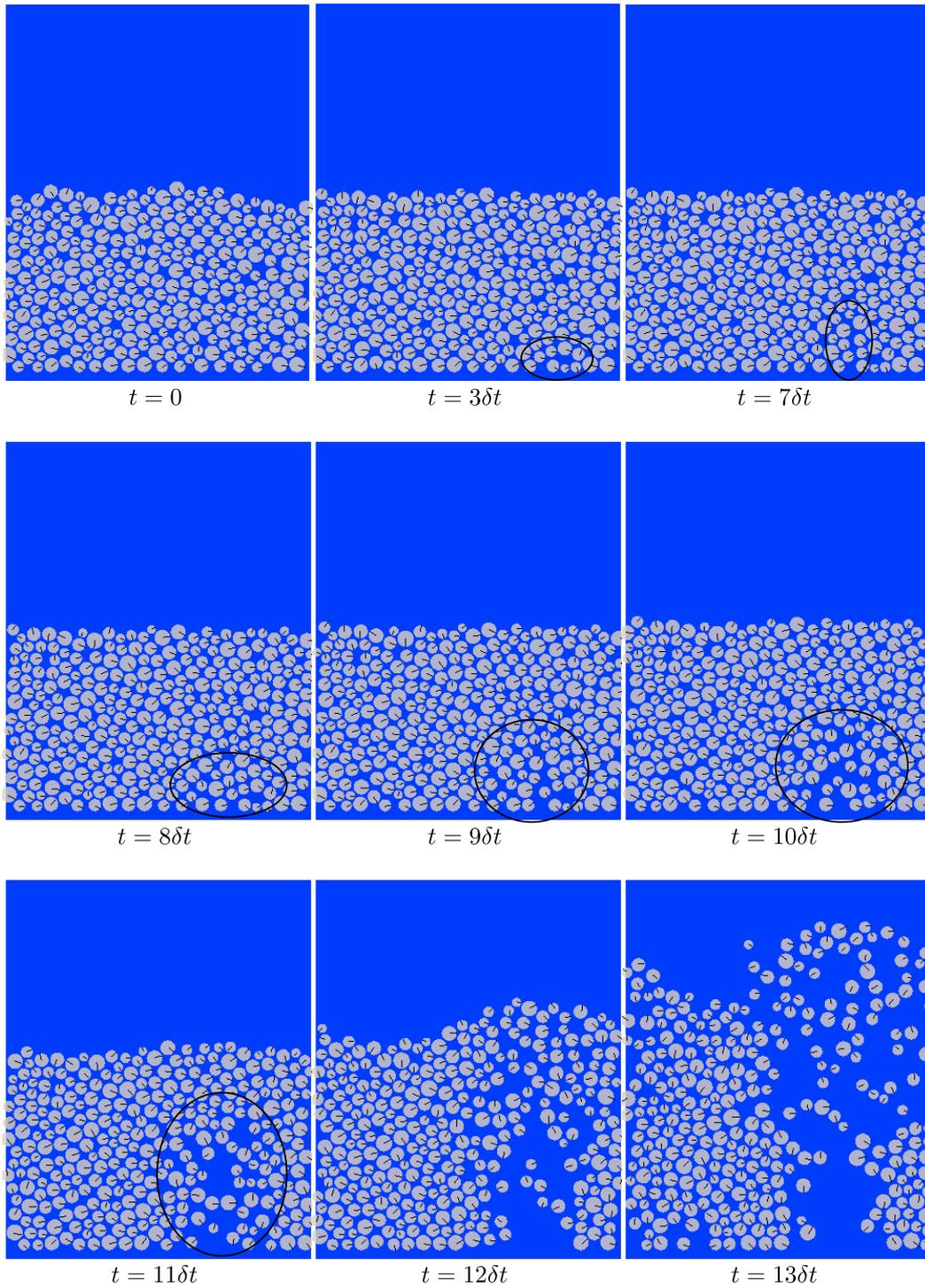


FIGURE 6.13 – Images prises dans un ordre chronologique pendant la simulation 2D de la boulangée d'un dépôt de grains pour $i = 0,968i_c$, $\delta t = 0,065 s$.

que la vitesse de soulèvement est plus importante pour le gradient élevé, puisque les grains arrivent à la fin de la colonne d'eau dans un temps plus faible ; $4,7\delta t$ pour $i = i_c$ et $3\delta t$ pour $i = 1,1 \times i_c$.

Pour le cas $i = 0,968 \times i_c$, la figure 6.13 montre que la boullance se produit sur plusieurs étapes ; d'abord il se produit un réarrangement des grains dans certaines zones en bas du dépôt qui permet la création de canaux localisés plus larges où il n'y a pas de chute de pression (zone entourée sur la figure). En conséquence, le gradient hydraulique dans la zone surmontant le canal devient plus important. Cette augmentation du gradient initie un soulèvement de cette zone qui conduit à la décompression de la zone inférieure qui grandit au fur et à mesure pour arriver en fin à la boullance. Il peut être remarqué par ailleurs, que dans ce cas (i.e. $i = 0,968 \times i_c$) le processus de développement de la boullance est beaucoup plus lent que les cas $i \geq i_c$, et l'étape initiale de réarrangement des grains est la plus consommatrice du temps.

Ce résultat a permis d'expliquer ainsi les remarques faites pour les simulations 3D, en effet pour les dépôts lâches, le réarrangement des grains en bas du dépôt qui se produit sous l'effet des écoulements conduit à l'augmentation du gradient hydraulique en haut, c'est ce qui conduit à la boullance.

6.3.3 Conclusion

Le modèle couplé Lattice-Boltzmann–Elément Discrets développé, a permis de simuler correctement le phénomène de boullance de dépôts granulaires soumis à des gradients hydrauliques ascendants. Les simulations réalisées ont permis d'obtenir des illustrations permettant une meilleure compréhension du phénomène. En particulier, il est montré à travers ces simulations, que ce phénomène ne se produit pas seulement pour des gradients hydrauliques supérieurs au gradient hydraulique critique, mais aussi pour des gradients plus faibles, lorsqu'il est possible de développer une zone plus perméable en bas du dépôt suite à un réarrangement des grains ou une érosion interne par exemple.

Conclusions et perspectives

Les travaux présentés dans cette thèse ont été orientés sur la modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires saturés. Pour cela, le choix était de privilégier le couplage de la méthode Lattice–Boltzmann du calcul dynamique des fluides avec une méthode de type éléments discrets; la dynamique moléculaire étant la méthode choisie à cette fin. L’objectif final était donc d’aboutir à un outil de simulation numérique qui permet de modéliser le comportement hydromécanique des matériaux granulaires saturés, soumis à des gradients hydrauliques ou à des excitations mécaniques.

Initialement, sur la base de la méthode aux éléments discrets "dynamique moléculaire", un code de simulation numérique des milieux granulaires secs est mis au point. Les éléments utilisés sont des disques dans le cas 2D et des sphères dans le cas 3D. Le code permet de prendre en compte des frontières périodiques dans les directions horizontales.

De façon indépendante, la méthode Lattice–Boltzmann est d’abord étudiée, puis mise en oeuvre dans un code de calcul qui permet la simulation d’écoulements de fluides. Pour cause de simplicité, la méthode adoptée étant celle basée sur le modèle BGK utilisant un terme de collisions à un seul temps de relaxation. Le code mis au point, permet la simulation d’écoulements en 2D et 3D, avec différentes conditions aux frontières, notamment les conditions périodiques, les conditions de non-glisement sur les obstacles solides et les conditions de pression et de vitesse imposées.

Les deux codes obtenus à ce stade, ont été utilisés pour la simulation d’écoulements ascendants à travers des dépôts granulaires modèles construits en utilisant la dynamique moléculaire. Notamment, la perméabilité a été calculée pour des dépôts granulaires ayant différentes porosités; les résultats obtenus sont en bon accord avec la formule semi-analytique de Karman-Kozeny. Une procédure de calcul de la perméabilité de dépôts granulaires cimentés moyennant de simples modèles de cimentation a été ensuite construite. L’étude de l’effet du degré de saturation des pores du matériau en ciment sur la perméabilité, a montré que comparativement à la porosité qui en dépend de

façon linéaire, la perméabilité diminue de façon non linéaire beaucoup plus rapide avec l'augmentation du degré de saturation en ciment. De plus, le mode de précipitation du ciment dans les pores du matériau est d'un effet déterminant sur la perméabilité.

D'autres part, sous l'hypothèse qu'un dépôt granulaire reste stable sous l'effet de l'écoulement imposé, la variation des contraintes intergranulaires en fonction de l'augmentation du gradient hydraulique est étudiée. Cette étude a montré que pour des dépôts composés de grains de petites tailles où les écoulements restent laminaires jusqu'à l'état critique de boullance, les contraintes intergranulaires sont inversement proportionnelles au gradient appliqué. Le gradient hydraulique critique correspondant au début de boullance estimé à partir de cette analyse est très proche de celui qui s'obtient de l'analyse globale de mécanique des sols classique.

Ces deux applications, notamment le calcul de la perméabilité et du gradient hydraulique critique de boullance, montrent que les vitesses d'écoulement à travers des dépôts granulaires fixes et les forces hydrodynamiques qui en résultent sont globalement bien calculées par la méthode Lattice–Boltzmann.

Le couplage des deux méthodes Eléments Discrets et Lattice–Boltzmann a nécessité le regroupement d'un ensemble d'éléments dans une procédure complète, qui permet de prendre en compte de façon correcte les interactions des deux phases fluide-grains. Le traitement de la frontière d'un grain en mouvement par rapport à la grille Lattice–Boltzmann, est fait dans le modèle proposé selon la condition de frontière de Bouzidi et al [Bouzidi 2001]. Après avoir établi cette procédure, des codes de simulation numérique 2D et 3D du comportement hydromécanique de matériaux granulaires saturés sont mis au point.

Le modèle couplé est soumis dans une première étape à certains tests de validation. Le premier test a porté sur le calcul de la force et du moment hydrodynamiques subis par un grain sphérique fixe dans un écoulement de Poiseuille, les résultats obtenus sont satisfaisants pour des résolutions de discrétisation suffisantes. En particulier il est vérifié que la résolution suffisante dans le cas 3D, correspond à la condition que le pas de discrétisation soit inférieur au septième ($1/7$) du diamètre du grain approximativement. Ce test est suivi de la vérification de l'invariance Galiléenne, stipulant que la force hydrodynamique sur un grain en mouvement uniforme dans un fluide, est la même que

celle du cas inverse, ou le grain est fixe et le système se déplace à la même vitesse dans le sens inverse. Ces deux tests indiquent que les forces hydrodynamiques sur des grains isolés sont bien calculées que se soit pour des grains fixes ou mouvants.

Le troisième test a consisté en la simulation du phénomène "drafting, kissing and tumbling" qui se produit en sédimentation de deux grains voisins situés approximativement sur une même verticale dans un fluide. Les résultats obtenus très proches de ceux donnés dans la littérature et obtenus par d'autres méthodes numériques.

Comme application à des milieux granulaires saturés, des simulations du phénomène de boullance de dépôts granulaires soumis à des gradients hydrauliques ascendants sont réalisées. Ces simulations sont qualitativement très satisfaisantes, de plus, elles ont montré que la boullance ne se produit pas seulement pour des gradients hydrauliques supérieurs au gradient hydraulique critique, mais aussi pour des gradients plus faibles, lorsqu'il est possible de développer une zone plus perméable en bas du dépôt par un réarrangement des grains ou une érosion interne par exemple.

Perspectives

Comme toute modélisation, l'outil numérique développé dans ce travail présente certaines faiblesses qui peuvent induire une réduction de la précision des calculs. Les effets de ces faiblesses peuvent être minimisés dans l'avenir moyennant quelques rectifications. Les travaux envisagés dans ce sens sont discutés ci-après :

- Les tests de validation réalisés ont montré une certaine dépendance des résultats obtenus du temps de relaxation introduit. De plus, la bonne précision sur le calcul des vitesses d'écoulement et sur le calcul des forces hydrodynamiques ne s'obtient pas pour la même valeur du temps de relaxation. Il semble que cette faiblesse est inhérente à la méthode Lattice-Boltzmann basée sur le modèle BGK. Des études récentes [Wang 2013], ont montré que ce problème ne se pose pas pour la formulation alternative Lattice-Boltzmann à temps de relaxations multiples (LB-MRT). Il serait ainsi intéressant d'introduire cette formulation dans l'outil numérique réalisé.

- Lorsque des grains solides deviennent très proches, des erreurs sur le calcul des forces hydrodynamiques peuvent surgir, en effet, il peut y avoir le cas où les deux frontières de grains voisins coupent le même lien de la grille de discrétisation, dans ce cas tout se produit comme si la petite zone découverte du lien coupé est dépourvue de fluide, et la force hydrodynamique se trouve sous-estimée. Afin de minimiser cet effet, il pourrait être intéressant d'introduire des termes correctifs à ces forces. Ces corrections peuvent être définies à partir de la théorie des forces de lubrification.

Enfin, les tests de validation et les simulations effectuées montrent que même avec les points faibles qui viennent d'être soulevés, les résultats obtenus sont très satisfaisants. Par conséquent l'outil de simulation numérique réalisé peut être utilisé dans de futurs travaux, pour apporter plus d'explications à beaucoup de phénomènes liés aux milieux granulaires saturés, tels que la liquéfaction des sables, les érosions dans les sols, etc.

Frontière de pression ou de vitesse imposée, modèle D3Q19

Soit la frontière de pression (ou de vitesse) imposée d'un domaine discrétisé par le modèle D3Q19 représentée sur la figure A.1.

Après l'étape de propagation, les distributions qui restent inconnues sont f_7 , f_9 , f_{12} , f_{15} et f_{17} . En supposant que leurs parties hors-équilibre sont égales à leurs correspondantes de directions inverses, ces distributions peuvent avoir les expressions :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{12} = f_3 + \frac{1}{3} \frac{\rho u_z}{c} \\ f_7 = f_{16} + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} - \frac{1}{6} \frac{\rho u_x}{c} \\ f_9 = f_{18} + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} - \frac{1}{6} \frac{\rho u_y}{c} \\ f_{15} = f_6 + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} + \frac{1}{6} \frac{\rho u_x}{c} \\ f_{17} = f_8 + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} + \frac{1}{6} \frac{\rho u_y}{c} \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

En utilisant ces expressions, les densités de quantité de mouvement dans les trois directions peuvent être calculées à partir de l'équation 3.13 :

$$\rho u_x = \sum_{i=1}^{Q-1} e_{ix} f_i = c(f_{10} + f_{13} + f_{14} - f_1 - f_4 - f_5) + \frac{1}{3} \rho u_x \quad (\text{A.2})$$

$$\rho u_y = \sum_{i=1}^{Q-1} e_{iy} f_i = c(f_5 + f_{11} + f_{13} - f_2 - f_4 - f_{14}) + \frac{1}{3} \rho u_y \quad (\text{A.3})$$

$$\rho u_z = \sum_{i=1}^{Q-1} e_{iz} f_i = \rho u_z \quad (\text{A.4})$$

e_{ix} , e_{iy} , e_{iz} étant les composantes des vecteurs vitesses discrètes \vec{e}_i .

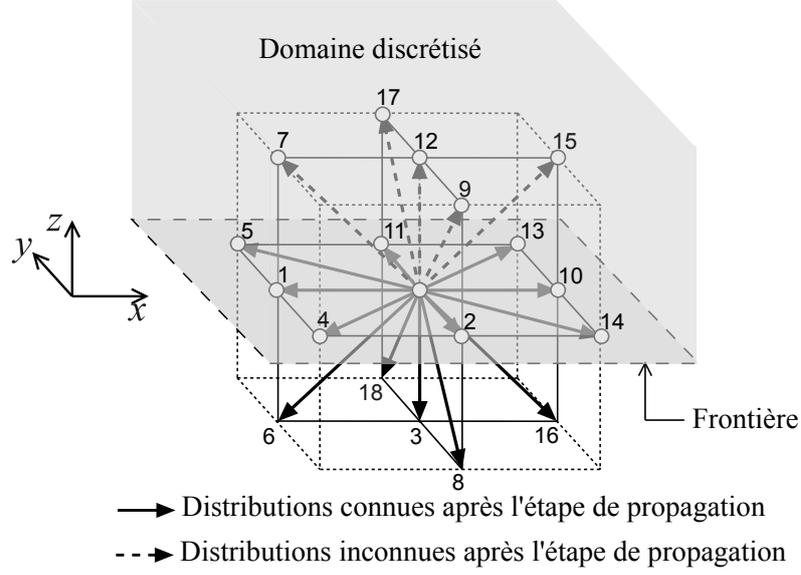


FIGURE A.1 – Frontière pour le modèle D3Q19

On peut remarquer que les expressions (A.1) des distributions inconnues conduisent à des densités de quantités de mouvement incorrectes dans les directions x et y , par conséquent, il est nécessaire d'en introduire des corrections.

Soit err_x et err_y les erreurs sur les quantités de mouvement dans les directions x et y , qui résultent des équations A.2 et A.3 :

$$err_x = \rho u_x - \left(c(f_{10} + f_{13} + f_{14} - f_1 - f_4 - f_5) + \frac{1}{3}\rho u_x \right) \quad (\text{A.5})$$

$$err_y = \rho u_y - \left(c(f_5 + f_{11} + f_{13} - f_2 - f_4 - f_{14}) + \frac{1}{3}\rho u_y \right) \quad (\text{A.6})$$

Ces erreurs peuvent être éliminées en introduisant des corrections sur les expressions des distributions (Eqs. A.1) de la façon suivante :

- ajouter et retrancher $\frac{err_x}{2c}$ à f_{15} et f_7 respectivement
- ajouter et retrancher $\frac{err_y}{2c}$ à f_{17} et f_9 respectivement

Les expressions corrigées des distributions inconnues sont finalement :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{12} = f_3 + \frac{1}{3} \frac{\rho u_z}{c} \\ f_7 = f_{16} + \frac{1}{2} (f_{10} + f_{13} + f_{14} - f_1 - f_4 - f_5) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} - \frac{1}{2} \frac{\rho u_x}{c} \\ f_9 = f_{18} + \frac{1}{2} (f_5 + f_{11} + f_{13} - f_2 - f_4 - f_{14}) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} - \frac{1}{2} \frac{\rho u_y}{c} \\ f_{15} = f_6 - \frac{1}{2} (f_{10} + f_{13} + f_{14} - f_1 - f_4 - f_5) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} + \frac{1}{2} \frac{\rho u_x}{c} \\ f_{17} = f_8 - \frac{1}{2} (f_5 + f_{11} + f_{13} - f_2 - f_4 - f_{14}) + \frac{1}{6} \frac{\rho u_z}{c} + \frac{1}{2} \frac{\rho u_y}{c} \end{array} \right. \quad (\text{A.7})$$

Il faut noter enfin, qu'il est courant de supposer que sur une frontière de pression imposée, les vitesses du fluide dans le plan de la frontière sont nulles, c'est à dire pour le cas de la figure A.1 $u_x = u_y = 0$.

Bibliographie

- [Allen 1987] M. P. Allen et D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford University Press, 1987. (Cité en pages 21 et 22.)
- [Andreotti 2011] B. Andreotti, Y. Forterre et O. Pouliquen. *Les milieux granulaires entre fluide et solide*. CNRS Editions, 2011. (Cité en page 26.)
- [Batchelor 1967] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, 1967. (Cité en page 30.)
- [Bouzidi 2001] M. Bouzidi, M. Firdaouss et P. Lallemand. *Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries*. *Physics of Fluids*, vol. 13, pages 3452–3459, 2001. (Cité en pages 92, 93, 95 et 122.)
- [Clague 2001] D.S. Clague et P.J. Cornelius. *The hydrodynamic force and torque on a bounded sphere in Poiseuille flow*. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 35, pages 55–70, 2001. (Cité en page 101.)
- [Cook 2004] B.K. Cook, D.R. Noble et J.R. Williams. *A direct simulation method for particle-fluid systems*. *Engineering computations*, vol. 21(2), pages 151–168, 2004. (Cité en page 92.)
- [Cundall 1979] P.A. Cundall et O.D.L Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*. *Geotechnique*, vol. 29, no. 1, pages 47–65, 1979. (Cité en pages 10 et 15.)
- [D.Yu 2002] D.Yu. Phd dissertation : Viscous flow computations with the lattice boltzmann equation method. University of Florida, 2002. (Cité en page 92.)
- [Feng 2004] Z.-G. Feng et E.E. Michaelides. *The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems*. *Journal of Computational Physics*, vol. 195, pages 103–125, 2004. (Cité en pages 92, 109, 110 et 111.)
- [Feng 2007] Y.T. Feng, K. Han et D.R.J. Owen. *Coupled Lattice Boltzmann and Discrete Element modelling of fluid-particle interaction problems*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 72, pages 1111–1134, 2007. (Cité en page 92.)

- [Filippova 1998] O. Filippova et D. Hänel. *Grid refinement for lattice-BGK models*. Journal of Computational Physics, vol. 147, pages 219–228, 1998. (Cité en page 92.)
- [Fortes 1987] A.F. Fortes, D.D. Joseph et T.S. Lundgren. *Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 177, pages 467–483, 1987. (Cité en page 109.)
- [Glowinski 2000] R. Glowinski, T.W. Pan, T.I. Hesla, D.D. Joseph et J. Periaux. *multiplicier/fictitious domain method for the simulation of flow around moving rigid bodies : application to particulate flow*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 184, pages 241–267, 2000. (Cité en page 6.)
- [Guodong 2003] J. Guodong, T. W. Patzek et D. B. Silin. *Physics-based Reconstruction of Sedimentary Rocks*. In SPE Western Regional/ AAPG Pacific Section Joint Meeting, Long Beach, California, USA, 2003. (Cité en page 69.)
- [Guodong 2004] J. Guodong, T. W. Patzek et D. B. Silin. *Direct prediction of the absolute permeability of unconsolidated and consolidated reservoir rock*. Proceedings SPE Annual Technical Conference and Exhibition (SPE 90084) Society of Petroleum Engineers, Inc., Richardson, TX, USA, 2004. (Cité en page 68.)
- [He 1997a] X. He et L.-S. Luo. *Lattice Boltzmann Model for the Incompressible Navier-Stokes Equation*. Journal of Statistical Physics, vol. 88, no. 3/4, pages 927–944, 1997. (Cité en page 46.)
- [He 1997b] X. He et L.-S. Luo. *A priori derivation of lattice Boltzmann equation*. Physical Review E, vol. 55, no. 6, pages 6333–6336, 1997. (Cité en page 39.)
- [Holtz 1991] R.D. Holtz et W.D. Kovacs. *Introduction à la géotechnique*. Editions de l’Ecole Polytechnique de Montréal, 1991. (Cité en page 83.)
- [Jean 1999] M. Jean. *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 177, pages 235–257, 1999. (Cité en page 11.)
- [Jekins 1989] J. T. Jekins, P.A. Cundall et I. Ishibashi. *Micromechanical modeling of granular materials with the assistance of experiments and numerical simulations*.

- In *Powders and Grains*, pages 257–264. A. A. Balkema, Rotterdam, 1989. (Cité en page 10.)
- [Johnson 1985] K. L. Johnson. *Contact mechanics*. Cambridge University Press, 1985. (Cité en page 15.)
- [Kao 2008] P.-H. Kao et R.-J. Yang. *An investigation into curved and moving boundary treatments in the lattice Boltzmann method*. *Journal of Computational Physics*, vol. 227, pages 5671–5690, 2008. (Cité en page 92.)
- [Kruggel-Emden 2007] H. Kruggel-Emden, E. Simsek, S. Rickelt, S. Wirtz et V. Scherer. *Review and extension of normal force models for the discrete element method*. *Powder Technology*, vol. 130, no. 3, pages 157–173, 2007. (Cité en page 15.)
- [Kruggel-Emden 2008] H. Kruggel-Emden, S. Wirtz et V. Scherer. *A study on tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior*. *Chemical Engineering Science*, vol. 63, pages 1523–1541, 2008. (Cité en page 17.)
- [Ladd 1994] A.J.C. Ladd. *Numerical simulation of particular suspensions via a discretized Boltzmann equation, Part 2, Numerical results*. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 271, pages 311–339, 1994. (Cité en pages 49, 52 et 92.)
- [Ladd 2001] A.J.C. Ladd et R. Verberg. *Lattice Boltzmann simulations of particle fluid suspensions*. *Journal of Statistical Physics*, vol. 104, pages 1191–1251, 2001. (Cité en page 92.)
- [Lallemand 2003] P. Lallemand et L.-S. Luo. *Lattice Boltzmann method for moving boundaries*. *Journal of Computational Physics*, vol. 184, pages 406–421, 2003. (Cité en pages 93 et 97.)
- [LeQuéré 2010] P. LeQuéré et B. Podvin. *Méthodes numériques pour les écoulements incompressibles*. Notes de cours, université de Paris-Sud 91403 ORSAY (France), 2010. (Cité en page 29.)
- [Luo 2000] Li-Shi Luo. *Theory of the lattice Boltzmann method : Lattice Boltzmann models for nonideal gases*. *Physical Review E*, vol. 62, no. 4, pages 4982–4996, 2000. (Cité en page 45.)

- [Mansouri 2009] M. Mansouri, J.-Y. Delenne, M.S. El Youssoufi et A. Seridi. *A 3D DEM-LBM approach for the assessment of the quick condition for sands*. C. R. Mecanique, vol. 337, pages 675–681, 2009. (Cité en pages 7, 85 et 89.)
- [Mansouri 2011] M. Mansouri, J.-Y. Delenne, A. Seridi et M.S. El Youssoufi. *Numerical model for the computation of permeability of a cemented granular material*. PowderTechnology, vol. 208, pages 532–536, 2011. (Cité en pages 7, 69 et 77.)
- [Meguro 2000] K. Meguro et N. Ravichandran. *3-dimensional distinct element simulation of liquefaction phenomena*. Seisan-Kenkyu, vol. 52(12), pages 598–601, 2000. (Cité en page 3.)
- [Mei 1999] R. Mei, L.-S. Luo et W. Shyy. *An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method*. Journal of Computational Physics, vol. 155, pages 307–330, 1999. (Cité en page 92.)
- [Mei 2000] R. Mei, W. Shyy, D. Yu et L.-S. Luo. *Lattice Boltzmann method for 3-D flows with curved boundary*. Journal of Computational Physics, vol. 161, pages 680–699, 2000. (Cité en page 42.)
- [Moreau 1994] J. J. Moreau. *Some numerical methods in multibody dynamics : application to granular materials*. European Journal of Mechanics, vol. 13, no. 4, pages 93–114, 1994. (Cité en page 11.)
- [Nakase 1999] H. Nakase, T. Takeda et M.A. Oda. *Simulation study on liquefaction using DEM*. Earthquake Geotechnical Engineering, vol. 3, pages 637–642, 1999. (Cité en page 3.)
- [Noble 1998] D.R. Noble et J.R. Torczynski. *A lattice Boltzmann method for partially saturated computational cells*. International Journal of Modern Physics C, vol. 9, pages 1189–1201, 1998. (Cité en page 92.)
- [Nourgaliev 2003] R.R. Nourgaliev, T.N. Dinh, T.G. Theofanous et D. Joseph. *Boltzmann Equation Method : Theoretical Interpretation, Numerics and Implications*. International Journal of Multiphase Flows, vol. 29, pages 117–169, 2003. (Cité en page 47.)

- [Øren 2002] P. E. Øren et S. Bakke. *Process Based Reconstruction of Sandstones and Prediction of Transport Properties*. *Transport In Porous Media*, vol. 46, pages 311–343, 2002. (Cité en page 68.)
- [Patankar 2000] N.A. Patankar, P. Singh, D.D. Joseph, R. Glowinski et T.-W. Pan. *A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows*. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 26, pages 1509–1524, 2000. (Cité en pages 6 et 109.)
- [Patankar 2001] N.A. Patankar. *A formulation for fast computations of rigid particulate flows*, annual research briefs. Center for Turbulence Research, Stanford University, 2001. (Cité en pages 6, 109, 110 et 111.)
- [Preece 1999] D.S. Preece, R.P. Jensen, E.D. Perkins et J.R. Williams. *Sand production modeling using superquadric discrete elements and coupling of fluid flow and particle motion*. *Proceedings of the 37th U.S. Rock Mechanics Symposium*, pages 637–642, 1999. (Cité en page 4.)
- [Qi 1999] D. Qi. *Lattice-Boltzmann simulations of particles in non-zero-Reynolds-number flows*. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 385, pages 41–62, 1999. (Cité en page 109.)
- [Radjai 1998] F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean et J.-J. Moreau. *Bimodal character of stress transmission in granular packings*. *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 1, pages 61–64, 1998. (Cité en page 11.)
- [Richefeu 2005] V. Richefeu. *Approche par éléments discrets 3d du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints*. Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2005. (Cité en page 16.)
- [Schäfer 1996] J. Schäfer, S. Dippel et D.E. Wolf. *Force Schemes in Simulations of Granular Materials*. *Journal de Physique I*, vol. 6, no. 1, pages 5–20, 1996. (Cité en pages 15 et 17.)
- [Shafipour 2008] R. Shafipour et A. Soroush. *Fluid coupled-DEM modelling of undrained behavior of granular media*. *Computers and Geotechnics*, vol. 35(5), pages 673–685, 2008. (Cité en page 3.)

- [Sharma 2005] N. Sharma et N.A. Patankar. *A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows*. Journal of computational physics, vol. 205, pages 439–457, 2005. (Cité en page 6.)
- [Stevens 2005] A.B. Stevens et C.M. Hrenya. *Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts*. Powder Technology, vol. 154, no. 2-3, pages 99–109, 2005. (Cité en pages 15 et 17.)
- [Strack 2007] O. E. Strack et B. K. Cook. *Three-dimensional immersed boundary conditions for moving solids in the Lattice Boltzmann method*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 55, pages 103–125, 2007. (Cité en pages 92 et 109.)
- [Struchtrup 2005] H. Struchtrup. *Macroscopic transport equations for rarefied gas flows, approximation methods in kinetic theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. (Cité en page 38.)
- [Taberlet 2005] N. Taberlet. *Ecoulements gravitaires de matériaux granulaires modèles*. Thèse de Docteur de l’université de Rennes 1, 2005. (Cité en page 22.)
- [Tsuji 1993] Y. Tsuji, T. Kawaguchi et T. Tanaka. *Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed*. Powder Technology, vol. 77, pages 79–87, 1993. (Cité en page 4.)
- [Vidal 2009] D. Vidal, C. Ridgway, G. Pianet, J. Schoelkopf, R. Roy et F. Bertrand. *Effect of particle size distribution and packing compression on fluid permeability as predicted by lattice-Boltzmann simulations*. Computers and Chemical Engineering, vol. 33, pages 256–266, 2009. (Cité en page 68.)
- [Voivret 2007] C. Voivret, F. Radjai, J. Delenne et M. S. El Youssoufi. *Space-filling properties of polydisperse granular media*. Physical Review E (Statistical, Non-linear, and Soft Matter Physics), vol. 76, no. 2, pages 021301–12, 2007. (Cité en page 69.)
- [Wachs 2009] A. Wachs. *A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows : Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with collisions*. Computers and Fluids, vol. 38, pages 1608–1628, 2009. (Cité en page 6.)

- [Wang 2013] L. Wang, Z. Guo, B. Shi et C. Zheng. *Evaluation of Three Lattice Boltzmann Models for Particulate Flows*. Communications in Computational Physics, vol. 13(4), pages 1151–1172, 2013. (Cité en page 123.)
- [Wolf-Gladrow 2000] D. A. Wolf-Gladrow. Lattice-gas cellular automata and lattice boltzmann models. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000. (Cité en page 47.)
- [Yu 2003] D. Yu, R. Mei, L.-S. Luo et W. Shyy. *Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation*. Progress in Aerospace Sciences, vol. 39, pages 329–367, 2003. (Cité en pages 49, 98, 106 et 113.)
- [Zeghal 2008] M. Zeghal et U. El Shamy. *Liquefaction of saturated loose and cemented granular soils*. Powder Technology, vol. 184(2), pages 254–265, 2008. (Cité en pages 4 et 6.)
- [Zhu 2003] H. P. Zhu et A. B. Yu. *The effects of wall and rolling resistance on the couple stress of granular materials in vertical flow*. Physica A, vol. 325, pages 347–360, 2003. (Cité en pages 18 et 19.)
- [Zhu 2007] H.P. Zhu, Z.Y. Zhou, R.Y. Yang et A.B. Yu. *Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments*. Chemical Engineering Science, vol. 62(13), pages 3378–3396, 2007. (Cité en pages viii, 5 et 6.)
- [Zhu 2008] H.P. Zhu, Z.Y. Zhou, R.Y. Yang et A.B. Yu. *Discrete particle simulation of particulate systems : A review of major applications and findings*. Chemical Engineering Science, vol. 63(23), pages 5728–5770, 2008. (Cité en page 6.)
- [Zou 1997] Q. Zou et X. He. *On pressure and velocity boundary conditions for the Lattice Boltzmann BGK model*. Physics of Fluids, vol. 9, pages 1591–1598, 1997. (Cité en pages 50 et 68.)

Hydromécanique des milieux granulaires saturés par une approche micromécanique couplée Eléments discrets / Lattice-Boltzmann - Applications à la géotechnique

ملخص :

تهدف الأعمال المقدمة في هذه الأطروحة إلى إنشاء نموذج عددي لمحاكاة التصرف الميكانيكي للمواد الحبيبية المشبعة بسائل، مثل الأتربة الرملية المشبعة بالماء. و لهذا الغرض، تم اختيار طريقة العناصر المستقلة لنمذجة الحبيبات الصلبة وطريقة «حل معادلة بولتزمان على شبكة» لنمذجة السائل مع ضمان الأخذ بعين الاعتبار التأثير الميكانيكي لكل من المادتين على الأخرى. النموذج العددي المنجز تمت مقارنته بحلول بعض المسائل المعروفة وتم تطبيقه لمحاكاة تدفق الماء عبر نماذج لأتربة رملية و قياس نفاذيتها، و كذلك تم استعماله لمحاكاة الظاهرة المعروفة ب«غليان الرمل» و التي تعبر عن جرف الرمل إلى أعلى تحت تأثير تدفق الماء، و كانت النتائج المحصل عليها جد مرضية. هذا النموذج يمكن استعماله لمحاكاة التصرف الميكانيكي للمواد الحبيبية المشبعة الخاضعة لتدفق السوائل او لتأثيرات ميكانيكية و بذلك قد يساهم في فهم بعض الظواهر المتعلقة بهذه المواد.

كلمات مفتاحية : مواد حبيبية مشبعة، طريقة العناصر المستقلة، طريقة «حل معادلة بولتزمان على شبكة»، محاكاة، نفاذية.

Résumé :

Les travaux présentés dans cette thèse sont orientés sur le développement d'un modèle numérique pour la simulation du comportement mécanique de matériaux granulaires saturés. Pour cela, le choix a été fait sur le couplage de la méthode Lattice-Boltzmann du calcul dynamique des fluides avec une méthode du type éléments discrets, la dynamique moléculaire étant la méthode choisie pour cette fin. Initialement, des codes de simulation de milieux granulaires secs et d'écoulements de fluides sont élaborés de façons indépendentes. Ces codes ont été utilisés pour construire des dépôts granulaires modèles et simuler des écoulements traversants, en particulier la perméabilité et le gradient hydraulique de bouillonnement sont calculés. Les résultats obtenus sont en très bon accord avec les résultats classiques connus. En deuxième étape, après avoir mis une stratégie du couplage des deux méthodes, un code de calcul tenant compte du couplage a été mis au point. Ce code est d'abord soumis à certains tests de validation puis appliqué à la simulation de la bouillonnement des sables. Les résultats obtenus sont très satisfaisants. Cet outil numérique peut être utilisé pour la simulation des milieux granulaires saturés soumis à des gradients hydrauliques ou à des excitations mécaniques, il pourrait ainsi permettre d'apporter une contribution à la compréhension de certains comportements hydromécaniques relatifs à ces milieux .

Mots clés : Milieux granulaires saturés, simulation, Lattice Boltzmann, éléments discrets, perméabilité, bouillonnement des sables.

Abstract :

The works presented in this thesis are focused on the development of a numerical model to simulate the mechanical behavior of saturated granular materials. For this, the choice has been done is to couple the Lattice - Boltzmann method for fluid dynamics modeling with a discret element method, molecular dynamics is the method chosen for this purpose. The computer code developed in this framework was submitted to validation tests and applied to simulate flows through granular deposits models, permeability and critical hydraulic gradient corresponding to quick condition (boiling) are thus computed. The code is also used to simulate the sand boiling, the obtained results from all applications are very satisfactory. This computer code can be used to simulate saturated granular materials submitted to hydraulic gradients or mechanical excitations, it could hence contribute to the understanding of some hydromechanical behaviors related to these materials.

Keywords : Saturated granular materials, simulation, Lattice-Boltzmann, discret elements, permeability, sand boiling.
