Ecoulements de particules dans un milieu poreux

Franck Lominé

▶ **To cite this version:**

Franck Lominé. Ecoulements de particules dans un milieu poreux. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Rennes 1, 2007. Français. NNT : . tel-00198209

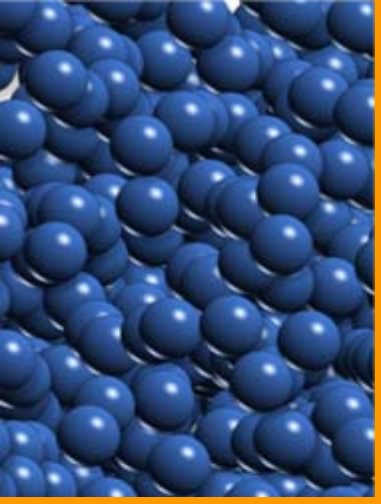
HAL Id: tel-00198209
https://theses.hal.science/tel-00198209

Submitted on 17 Dec 2007

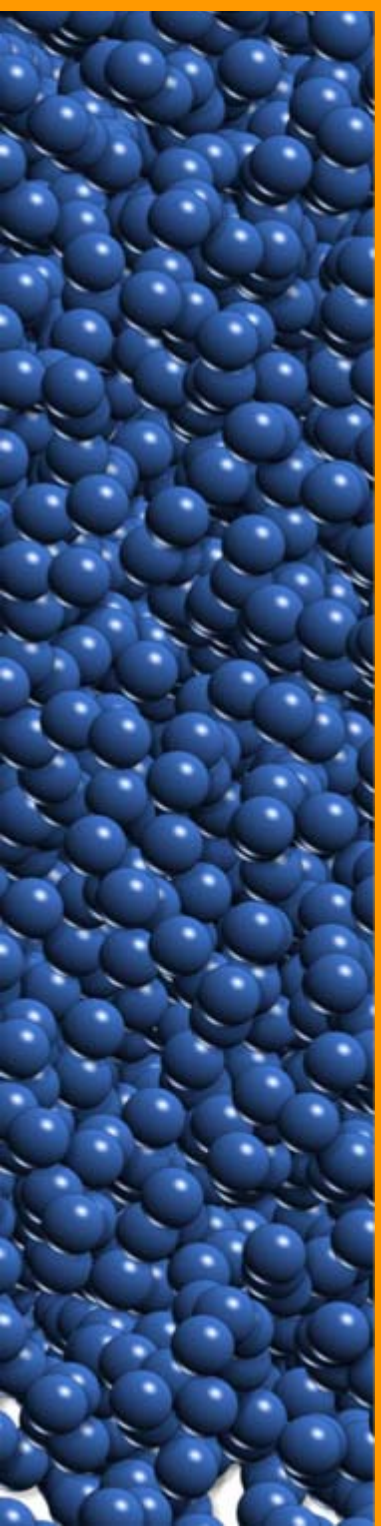
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Franck Lominé



ECOULEMENTS DE PARTICULES DANS UN MILIEU POREUX



Thèse de doctorat

soutenue le

19 octobre 2007

UNIVERSITÉ DE RENNES 1

N° Ordre : 3590

THÈSE

présentée

DEVANT L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1

pour obtenir

le grade de : ***DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1***

Mention : Physique

PAR

Franck LOMINÉ

Équipe d'accueil : Groupe Matière Condensée et Matériaux

École Doctorale : Sciences de la Matière

Composante universitaire : U.F.R. Structure et Propriétés de la Matière

TITRE DE LA THÈSE :

Écoulements de particules dans un milieu poreux

soutenue le 19 octobre 2007 devant la commission d'examen

COMPOSITION DU JURY :

M. Jean-Pierre HULIN	Directeur de recherches, Université Paris Sud	Rapporteur
M. Stefan LUDING	Professeur, Université de Delft	Rapporteur
M. Sean MCNAMARA	Maître de Conférences, Université de Rennes 1	Examinateur
M. Mohamed NAAIM	Directeur de recherches, Cemagref Grenoble	Examinateur
M. Luc OGER	Chargé de recherches, Université de Rennes 1	Directeur de thèse

Remerciements

Je tiens à remercier ici tous ceux qui ont participé de près ou de loin à mon travail de thèse. En premier lieu, je souhaite exprimer ma reconnaissance à Luc Oger pour m'avoir encadré pendant ces trois années. Il a su m'orienter dans mon travail, tout en me laissant une grande autonomie dans la manière de le mener à bien. Il a fait preuve d'une grande disponibilité et ce, en toutes circonstances. La confiance qu'il m'a accordée et notre entente ont rendu ces trois années enrichissantes aussi bien sur le plan humain que professionnel. Je tiens à lui exprimer ici toute ma gratitude.

Je voudrais également remercier Jean-Pierre Hulin et Stefan Luding d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse, ainsi que Mohamed Naaim et Sean McNamara pour avoir accepté d'être membres du jury.

Je remercie Hervé Orain pour la réalisation du montage expérimental et Patrick Chasles pour la mise au point du dispositif de mesure.
Je tiens à remercier les personnes de l'équipe Granulaires/Mousses que j'ai cotoyées pendant ces trois années à savoir : Alexandre, Janine, Jérôme, Daniel, Madani, Patrick, Arnaud, Gérard, Isabelle, ainsi que Daniel et Yvonig de l'atelier de mécanique. Je voudrais également remercier l'équipe d'enseignants avec qui j'ai eu l'occasion de travailler et notamment Véronique pour m'avoir fait confiance et m'avoir laissé une grande liberté dans la préparation des enseignements.

Mes remerciements incluent évidemment les personnels non-permanents pour leur contribution à l'ambiance formidable : Djaoued, El Hadji Mama, Emmanuel, Houda, Jean-François, Jérémy, Julie, Marco, Sébastien. Merci également aux membres des autres équipes du GMCM, ainsi qu'aux expatriés et à tous ceux qui ont été de passage pendant ces trois ans, en particulier Vincent, Nicolas, Jennifer, Emilie, Céline, Yvelin, Johan, Rémi, Dah et Julien.

Enfin, il y a encore des personnes que j'aimerais remercier, mais là, cela n'a plus grand chose à voir avec ma thèse...

Sommaire

Introduction **1**

1 L'état de l'art **5**
1.1 Mélange et ségrégation 5
1.1.1 Mélange de matériaux solides 5
1.1.2 Le phénomène de ségrégation 7
1.2 L'industrie et les mélangeurs 12
1.2.1 Les mélangeurs convectifs 12
1.2.2 Les mélangeurs à cuves tournantes 13
1.2.3 Les mélangeurs statiques 17
1.2.4 Comment éviter la ségrégation 17
1.3 Les milieux poreux 20
1.3.1 Quelques définitions 20
1.3.2 Caractéristiques des empilements de sphères 20
1.4 Transport dans un milieu poreux 27
1.4.1 La convection 27
1.4.2 La dispersion cinématique 28
1.4.3 La dispersion hydrodynamique 29
1.4.4 L'équation d'advection-dispersion (ou de convection-dispersion) . . 29
1.4.5 Advection versus dispersion 30
1.5 Solution des équations de transport 31
1.5.1 Solution de l'équation de convection diffusion 31
1.6 Le transport de grains en milieu poreux 33
1.6.1 Similitudes / différences avec le cas de l'écoulement d'un fluide . . . 33
1.6.2 Études antérieures 34

2 Étude expérimentale **41**
2.1 Introduction 41
2.2 Dispositif expérimental 41
2.2.1 Présentation 41
2.2.2 Conditions de largage des particules 44
2.3 Conditions expérimentales 46
2.4 Détermination d'un temps moyen de résidence 46

2.5 Existence d'un régime stationnaire 50
2.6 Influence du nombre de particules sur le temps moyen de transit 51
2.7 Influence de du rapport de taille D/d 53
2.8 Étude de la dispersion dans la direction de l'écoulement 56
2.9 Étude de la distribution spatiale des billes à la sortie de l'empilement . . . 57
2.9.1 Principe de la mesure 57
2.9.2 Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du nombre de particules 59
2.9.3 Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du type de matériau 60
2.10 Conclusion du chapitre 62

3 Modélisations numériques 65
3.1 Introduction 65
3.2 Les différents types de simulations 65
3.2.1 Les méthodes aux éléments discrets 66
3.2.2 La méthode de Monte Carlo 67
3.3 Création d'un milieu poreux 68
3.4 Traitement de la partie dynamique par une méthode Event-Driven 70
3.4.1 Idées et motivations 70
3.4.2 Traitement d'une collision entre deux sphères dures 71
3.4.3 Principe et implémentation de l'algorithme Event-Driven 75
3.4.4 Les limites de l'Event-Driven et leurs solutions 77
3.5 Traitement de la partie dynamique par la méthode des sphères molles . . . 81
3.5.1 Idées et motivations 81
3.5.2 Loi de contact entre deux sphères molles 81
3.5.3 Principe de l'algorithme 91
3.6 A la recherche des contacts entre particules 95
3.6.1 La liste de Verlet 95
3.6.2 La méthode des cellules 97
3.6.3 La méthode des cellules liées 97
3.6.4 Un algorithme à maillage fin 99
3.6.5 Un algorithme à deux maillages 100
3.6.6 Une méthode des cellules à doubles liens 100

4 Résultats numériques 103
4.1 Introduction 103
4.2 Une zone de thermalisation des vitesses 103
4.2.1 Nature de cette zone 103
4.2.2 Distribution des temps de passage à une profondeur de l'ordre de 2 tailles de grains 106
4.2.3 Variation du temps moyen de passage à H_{init} en fonction de divers paramètres. 107

4.3 Le temps moyen de transit . . . 111
4.3.1 Influence du nombre de particules . . . 111
4.3.2 Influence du rapport de taille . . . 114
4.3.3 Influence des coefficients de restitution . . . 116
4.4 Dispersion des billes au sein de l'empilement . . . 120
4.4.1 Allure de la distribution de positions des particules dans l'empilement 120
4.4.2 Détermination du coefficient de dispersion . . . 122
4.4.3 Évolution des coefficients de dispersion en fonction du nombre de particules . . . 124
4.4.4 Évolution des coefficients de dispersion en fonction du rapport de taille D/d . . . 125
4.4.5 Évolution des coefficients de dispersion en fonction des coefficients de restitution . . . 126

5 Application au mélange de particules 131
5.1 Réalisation du mélangeur . . . 131
5.2 L'état de mélange . . . 136
5.2.1 Un indice de mélange . . . 136
5.2.2 Qualité du mélange de particules par percolation spontanée . . . 139

Conclusion et perspectives 143

Annexe A Résultats publiés dans JSTAT 147

Annexe B L'équation de Smoluchowski 161

Annexe C Tableau d'équivalence 163

Annexe D Valeurs de quelques coefficients de frottement 165

Annexe E La méthode des cellules liées 167

Annexe F Une méthode des cellules à doubles liens 169

Table des notations 173

Table des figures 175

Bibliographie 185

Introduction

De nos jours les milieux granulaires sont présents dans de nombreux secteurs industriels comme le génie civil (route, ponts, ...), l'agro-alimentaire (silo de maïs, blé, ...), les industries chimiques (réactif, mélange, ...) et pharmaceutiques (comprimés, ...). Cette omniprésence est également marquée dans divers milieux naturels (glissements de terrains, lits de rivière, cendres volcaniques, dunes, ...). Dans le secteur industriel, ces milieux sont transportés, mélangés et comprimés dans des conditions et grâce à des méthodes plus ou moins contrôlées. Cependant, l'état final de ces diverses opérations est d'une importance primordiale. La fabrication, le transport et le stockage de ces milieux granulaires représentent 20% de l'énergie consommée dans le monde. C'est pourquoi une meilleure connaissance et maîtrise de ces milieux sont vitales pour l'avenir. Les matériaux granulaires peuvent tous être définis comme des milieux constitués de grains (d'une ou de plusieurs espèces) et de fluides interstitiels tels que l'air, l'eau ou l'huile. Ceux-ci peuvent donc tous être étudiés de manière plus ou moins comparable.
Malgré cela, ces matériaux ne se prêtent pas à une description aisée. Mettant en jeu un très grand nombre d'entités élémentaires, ils donnent souvent lieu à des comportements très complexes. Les matériaux granulaires peuvent, sous certaines conditions, présenter une évolution d'ensemble comparable à celle d'un solide, d'un liquide ou d'un gaz, et constituent des systèmes fortement dissipatifs. Pour décrire les différents phénomènes intervenant dans de tels systèmes, les outils de la physique statistique semblent bien adaptés. Néanmoins, comme l'agitation thermique ne se fait pas ressentir à l'échelle du grain, une description thermodynamique n'est pas aisément envisageable. Il est cependant possible, en prenant soin de définir ce que l'on nomme une température granulaire, de construire une thermodynamique du grain par analogie avec la thermodynamique classique. L'étude des milieux granulaires réels nécessite donc au préalable des études de milieux « modèles » où l'on contrôle la forme et la taille des grains ainsi que les conditions expérimentales (taux d'humidité, ...).

Objectif du présent travail

La manipulation de la matière en grains est souvent la source de nombreuses difficultés. L'une d'entre elles est la ségrégation de taille, qui implique une distribution non homogène des différents types de grains, ce qui rend très difficile la réalisation de mélanges homogènes. La référence classique dans ce domaine a été abordée dans le célèbre article de Rosato et al (*Rosato et al.*, 1987) dont le titre est « Pourquoi les noix du Brésil sont-elles au-dessus ? ». Durant ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à la percolation spontanée dans un

milieu granulaire. Le phénomène de percolation spontanée est défini comme le mouvement de fines particules à travers un arrangement de sphères plus grosses sous le simple effet de la gravité. L'énergie est alors dissipée lors des collisions qui entraînent une dispersion longitudinale et transversale des particules. Bridgwater (*Bridgwater et al.*, 1969) et Samson (*Samson*, 1997) ont auparavant entrepris l'étude d'un tel phénomène de transport en considérant la percolation d'une unique particule au sein du milieu poreux. Nous proposons ici de compléter les études antérieures en nous intéressant au cas où plusieurs particules transitent en même temps dans la structure. Ce travail a donné lieu à une publication (*Lominé et Oger*, 2006) dans *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* dont une copie est jointe en annexe A.

Plan de l'exposé

Dans un premier chapitre, résumant en quelque sorte l'état des connaissances sur le sujet, nous allons présenter les différents mécanismes responsables de la ségrégation. Nous verrons ensuite les différents types de mélangeurs utilisés dans le milieu industriel, pour pallier ces phénomènes de ségrégation et obtenir des mélanges homogènes de matériaux en grains. L'étude de la percolation de particules dans un empilement de sphères plus grosses nécessite la caractérisation de l'empilement de sphères utilisé. C'est pourquoi nous allons également présenter, dans ce premier chapitre, les différentes propriétés d'un empilement de sphères et les différents paramètres permettant de le caractériser. Enfin, nous terminerons ce chapitre en présentant les phénomènes de transport dans les milieux poreux. Pour cela, après une présentation des lois de transport utilisées pour décrire les écoulements de fluides, nous résumerons les principaux résultats des études antérieures au sujet de l'écoulement de grains dans des milieux poreux ou à travers des réseaux d'obstacles.
Nous allons ensuite, dans un deuxième chapitre, présenter le dispositif expérimental que nous avons mis au point pour réaliser cette étude. Avec ce dispositif, nous avons principalement axé notre étude sur la caractérisation d'un temps moyen de séjour et sur la caractérisation de la dispersion d'un paquet de particules en fonction des différents paramètres de l'expérience. Nous présenterons et expliquerons les résultats obtenus dans ce deuxième chapitre.
Pour compléter cette étude expérimentale, nous avons développé des programmes de simulation permettant de reproduire notre expérience. Ceux-ci seront présentés dans un troisième chapitre. Après avoir décrit l'algorithme que nous avons utilisé pour générer des empilements de sphères, nous expliquerons le fonctionnement et l'implémentation de deux méthodes numériques, connues sous le nom de « méthode Event-Driven » et « dynamique moléculaire de sphères molles ». Nous aborderons les avantages et les limites de ces méthodes ainsi que les techniques d'optimisation pouvant être mises en place pour améliorer l'efficacité de la recherche des collisions entre particules.
Dans un quatrième chapitre, nous présenterons les résultats de nos différentes simulations. Nous montrerons la validité des modèles utilisés par comparaison des résultats avec ceux obtenus expérimentalement. Nous compléterons alors l'étude expérimentale par l'analyse de divers paramètres physiques difficilement contrôlables expérimentalement.

Enfin, dans un cinquième et dernier chapitre, nous présenterons une application intéressante de la percolation spontanée de grains dans un empilement de sphères plus larges. Nous mettrons en évidence la possibilité d'utiliser ce type d'écoulement pour obtenir des mélanges homogènes de particules. Ceci rend alors possible l'élaboration d'un mélangeur industriel efficace et peu coûteux. Pour ce faire, nous réaliserons des mélanges de particules au moyen de nos programmes de simulation.

Chapitre 1

L'état de l'art

Dans ce premier chapitre, nous présentons le contexte de ce travail de thèse. Nous rappelons tout d'abord les différents mécanismes et les diverses méthodes permettant le mélanges de matériaux solides ainsi que les éléments nécessaires à la caractérisation des milieux poreux. Nous faisons ensuite un état des connaissances sur les écoulements dans les milieux poreux et nous résumons les principaux résultats des études antérieures.

1.1 Mélange et ségrégation

1.1.1 Mélange de matériaux solides

Mélanger signifie réaliser une substance homogène à partir de deux ou de plusieurs ingrédients (*Poux et al.*, 1991). L'objectif, du fabricant qui réalise des mélanges, est d'obtenir un produit d'une qualité donnée. Pour cela, il doit être capable, tout au long du processus d'élaboration, de maîtriser parfaitement la composition du mélange (*Fan et al.*, 1990). Ceci lui permet alors de contrôler un éventuel transfert de chaleur, de masse ou encore une réaction chimique. Par exemple, dans l'industrie pharmaceutique, une seule tablette de comprimés peut contenir plus de 5 ou 10 ingrédients qui sont mélangés dans des doses bien déterminées. Chacun de ces ingrédients a une fonction spécifique, telle que soigner la maladie, améliorer l'absorption du médicament, améliorer les propriétés gustatives ou encore apporter une touche d'esthétisme en donnant par exemple une couleur attrayante au comprimé (*Duran*, 2000).
Lors de l'élaboration de ces comprimés, les opérations de mélanges sont souvent les étapes cruciales du procédé de fabrication. Elles sont déterminantes dans la qualité du produit. Ainsi, une insuffisance de l'ingrédient actif dans un médicament peut induire un manque d'efficacité de celui-ci. A l'inverse, une concentration trop élevée peut être la cause d'effets indésirables chez le malade. Cependant, contrairement au cas du mélange de liquides miscibles, parvenir à contrôler et à maintenir le résultat du mélange de deux ou plusieurs solides n'est pas une chose aisée.
C'est pourquoi, l'étude des problèmes liés aux mélanges de matériaux granulaires intéresse

fortement les industriels. Une grande partie du travail dans ce domaine s'inspire directement des problèmes rencontrés par les industriels. Ainsi, la plupart des recherches actuelles ont pour origine le besoin d'étudier l'action et l'esthétisme d'un mélangeur particulier (tambour tournant (*Hogg et al.*, 1966), air-driven mixing (*Tenda et al.*, 1990)), ou de mener des études cinétiques vouées à la détermination du temps nécessaire à l'obtention d'un mélange homogène à partir d'une certaine combinaison de matériaux (*Coulson et Maitra*, 1950; *Rose*, 1959; *Boss*, 1992).
En dépit de l'aspect primordial que la maîtrise des mélanges de solides représente, il est actuellement difficile de prédire un taux de mélange pour une combinaison particulière de matériaux. En effet, comparativement au cas des liquides, l'état des connaissances fondamentales dans le domaine du mélange de solides est beaucoup moins avancé (*McCarthy*, 1998). Dans les années cinquante, *Lacey* (1954) a proposé plusieurs mécanismes permettant de mélanger des solides.

Le mélange par diffusion

Le premier type de mélange que l'on peut citer est un mélange par diffusion. Il s'agit d'un déplacement individuel des particules dû à des chocs. Ces derniers aboutissent à une redistribution individuelle des particules. Ce mécanisme a comme principale caractéristique d'être relativement lent mais demeure très efficace. La figure 1.1 illustre un exemple de mélange par diffusion, où l'on réalise un mélange de deux types de grains par écoulement sur une planche de Galton (*Bruno et al.*, 2001; *Bruno*, 2002; *Benito et al.*, 2007).

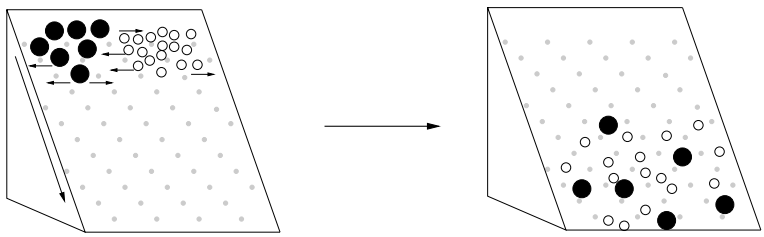


Figure 1.1: *Schéma illustrant le mécanisme de mélange par diffusion. Des billes sont lâchées du haut d'une planche de Galton. Les chocs aboutissent à une redistribution spatiale des particules.*

Le mélange par convection

Dans le cas du mélange par convection, on assiste au transport de groupes de particules d'un endroit du système à un autre. Ces groupes se meuvent les uns par rapport aux autres et ce mouvement relatif des amas de particules engendre un mélange macroscopique. La figure 1.2 illustre le mélange de particules par convection.

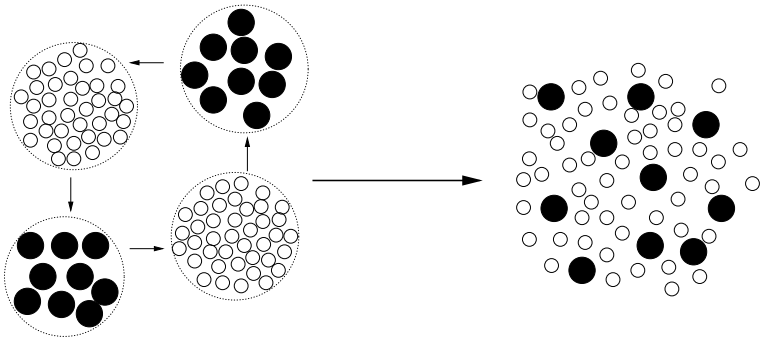


Figure 1.2: *Schéma illustrant le mécanisme de mélange par convection.*

Le mélange par cisaillement

Le dernier type de mélange que l'on peut rencontrer est le mélange par cisaillement. On assiste alors, sous l'effet d'une action mécanique, à l'apparition de plans de glissement séparant différentes couches de particules. Le mouvement relatif de ces plans implique un brassage des particules entre les différentes couches induisant ainsi un mélange des grains. Le mélange par cisaillement, illustré sur la figure 1.3, a une efficacité intermédiaire entre les deux mécanismes précédents.

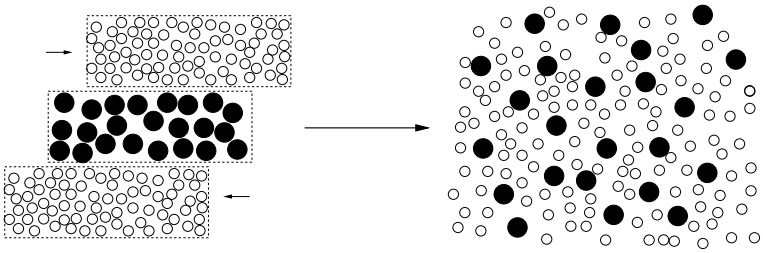


Figure 1.3: *Schéma illustrant le mécanisme de mélange par cisaillement. Une action mécanique induit des mouvements relatifs de plans séparant des couches de particules, entraînant un mélange.*

Dans la pratique, il est bien souvent difficile de dissocier ces trois mécanismes. La prépondérance de l'un ou l'autre est imposée par le mélangeur utilisé ainsi que par la nature même des grains que l'on désire mélanger. Néanmoins, la synergie entre ces mécanismes accélère fortement le processus de mélange (*Schofield*, 1970).

1.1.2 Le phénomène de ségrégation

La ségrégation est communément observée dans de nombreux procédés industriels comme le transport (figure 1.4), le brassage en tambours (figure 1.5) et la fluidisation de matière en grains (figure 1.6). Le mécanisme de ségrégation, que l'on appelle encore mécanisme de démélange ou de démixtion, est le processus inverse du mélange. La ségrégation apparaît lorsque des particules, qui ont des propriétés différentes, sont mises en mouvement.

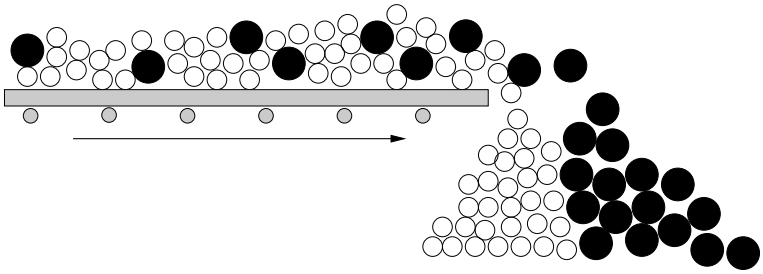


Figure 1.4: *Ségrégation lors du transport de matériaux granulaires. Lorsque les grains arrivent à l'extrémité du convoyeur, ils parcourent une distance horizontale proportionnelle au carré de leur diamètre (suivant l'équation (1.3)).*

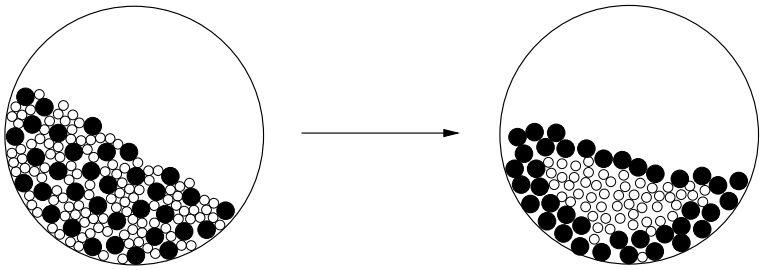


Figure 1.5: *Ségrégation en tambour tournant.*

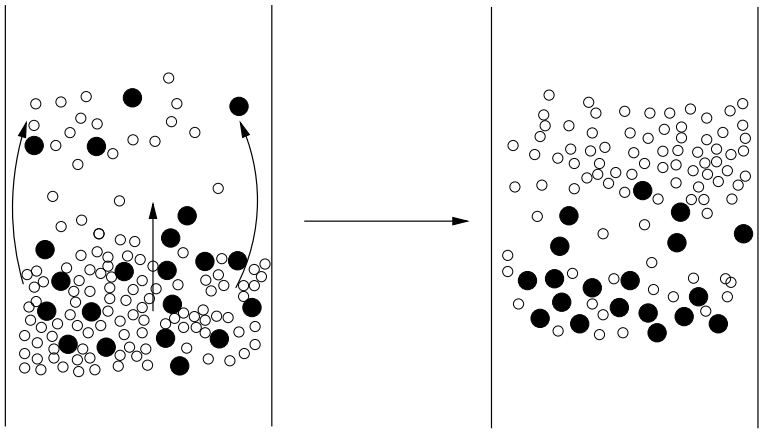


Figure 1.6: *Ségrégation par fluidisation.*

Ces différences de propriétés, telles qu'une différence de taille, une différence de densité ou bien une différence de forme, entraînent des mouvements préférentiels des particules. Il s'ensuit alors une répartition spatiale différente selon le type de particules. Par exemple, si l'on considère un mélange de billes sphériques de tailles différentes et de densité identique, on observe que les particules les plus petites ont tendance à se regrouper vers le centre du tambour (*Cantelaube et Duparcmeur*, 1995). Si les particules sphériques ont la même taille mais des densités différentes, les particules les plus denses se situant dans la zone d'écoulement se meuvent vers le bas. Les particules les plus denses se retrouvent donc préférentiellement au centre du tambour (*Ristow*, 1994). Enfin, si l'on considère maintenant des particules de même taille et de même densité, mais de formes variées, les grains peuvent, suivant leur forme, se concentrer sur la périphérie ou au centre du tambour (*Woodle et Munro*, 1993). Williams a différencié trois (*Williams*, 1976) puis quatre (*Williams*, 1978) principaux types de ségrégation.

Ségrégation due aux trajectoires

Lorsque des grains peuvent se déplacer librement et sont amenés à tomber, leur vitesse finale de chute peut être exprimée par une loi de Stockes lorsque le régime d'écoulement peut être qualifié de laminaire. Ce qui revient à dire que le nombre de Reynolds du grain [1]Re_g défini par :

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho_f \, U \, d}{\mu} \tag{1.1}$$

où ρ_f est la masse volumique du fluide, U et d sont respectivement la vitesse relative et le diamètre du grain, et μ est la viscosité du fluide, est petit devant l'unité. La vitesse maximale du grain $V_{\max}$ peut alors être donnée par l'équation (1.2) :

$$V_{\max} = \frac{g d^2}{18\mu} \left(\rho_s - \rho_f\right) \tag{1.2}$$

où g est l'accélération gravitationnelle, ρ_s est la masse volumique du solide. On peut aussi montrer que si l'on lance horizontalement une particule, d'une hauteur infinie et avec une vitesse V_0, la distance maximale l qu'elle peut parcourir horizontalement, aussi appelée distance d'arrêt, est donnée par :

$$l = \frac{V_0 \rho_s d^2}{18\mu} \tag{1.3}$$

Cette distance maximale varie également comme le carré du diamètre de la particule. La relation (1.3) explique pourquoi le phénomène de ségrégation est couramment rencontré et étudié (*Jiménez et Madsen*, 2003; *Ahrens*, 2000; *Baldock et al.*, 2004), qu'il soit désiré ou non, lors du transport de matières en grains sur des convoyeurs comme illustré sur le schéma 1.4. Ainsi des particules deux fois plus grosses iront quatre fois plus loin tandis que des particules deux fois plus denses iront seulement deux fois plus loin.

[1] On l'appelle aussi nombre de Reynolds de frottement ou nombre de Reynolds particulaire.

Ségrégation par percolation des fines particules

Le second type de ségrégation est la ségrégation par percolation. Lorsqu'un ensemble de particules est mis en mouvement, des défauts dans l'arrangement des grains peuvent entraîner l'apparition de lacunes. Si les grains constituant le matériau granulaire présentent une distribution de taille, on assiste à une ségrégation par la taille. Les particules les plus petites vont pouvoir s'insérer dans ces interstices et auront donc tendance à descendre vers le bas, donnant lieu au phénomène de ségrégation. Si la différence entre les petits et les gros grains est suffisante, les petits grains peuvent s'insérer dans les vides laissés par les gros grains même si ces derniers sont immobiles. Cet effet est connu sous le nom de percolation spontanée et peut apparaître dès que le rapport de taille entre les gros et les petits grains est supérieur à 4 (*Williams*, 1978). Si le lit de grains est légèrement perturbé, la ségrégation par percolation peut être observée lorsque les grains ont une très faible différence de tailles. Il est alors possible de différencier plusieurs situations.

Ségrégation lors du déversement en tas

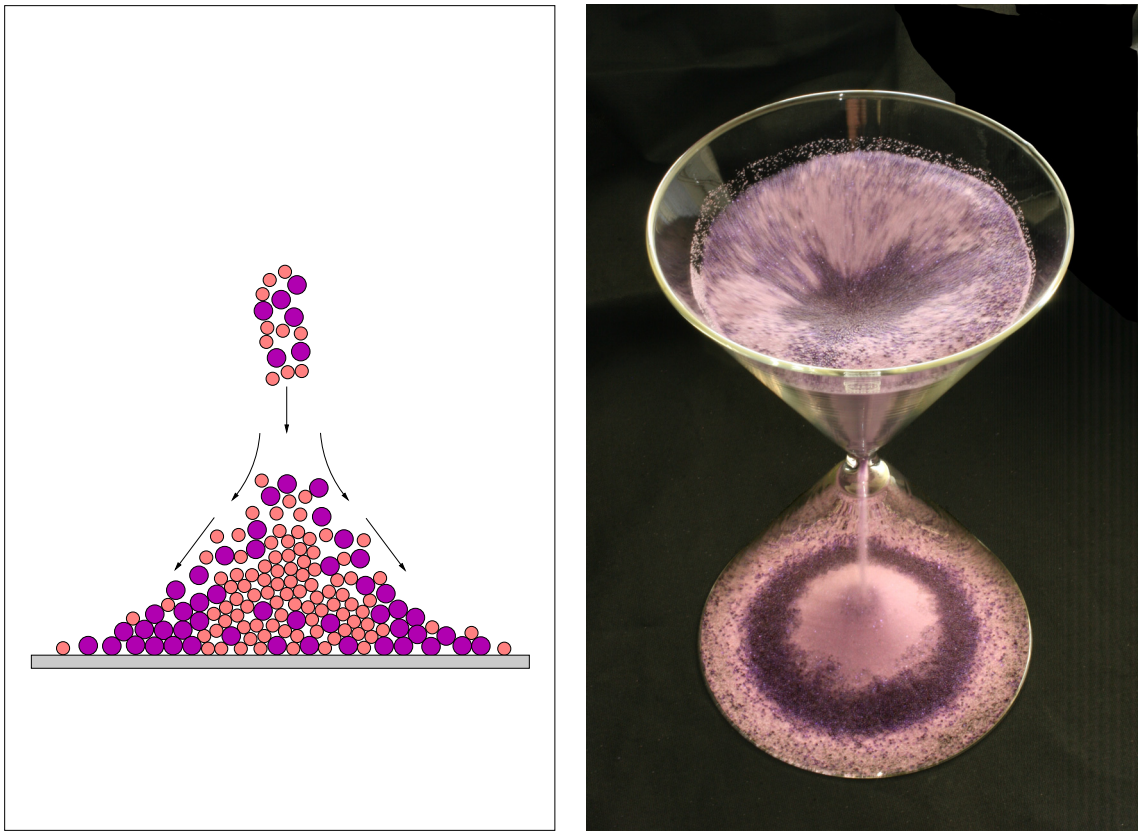
Ce type de ségrégation est courant lors du déversement d'un mélange de grains. Les particules de plus grandes tailles se retrouvent préférentiellement sur les bords du tas. La photographie 1.7(b) illustre cet exemple. Lorsqu'un matériau granulaire est déversé sur le haut d'un tas, les grains qui s'écoulent sur la surface du tas voient une rugosité différente selon leur taille. En effet, plus les grains sont gros et plus la surface du tas semble lisse. La dissipation d'énergie est donc plus lente et ils parcourent une plus grande distance avant de s'arrêter. C'est pourquoi on retrouve préférentiellement (voir figure 1.7(a)) les grains de plus petites tailles près de l'axe du tas et les gros grains sur la périphérie.

Ségrégation par cisaillement

Lorsque des grains sont mis en mouvement de telle sorte qu'il existe un gradient de vitesse, et qu'une couche de particules peut passer au-dessus d'une autre couche qui se déplace moins rapidement, les grains de plus petites tailles peuvent tomber dans la couche la plus lente et entraîner une ségrégation des grains. On peut par exemple observer ce genre de ségrégation dans un tambour tournant (*Nityanand et al.*, 1986; *Pollard et Henein*, 1989; *Matthee*, 1968; *Drahun et Bridgwater*, 1983; *Hill et Kakalios*, 1995) comme illustré précédemment sur la figure 1.5.

Ségrégation par vibration

Le phénomène de ségrégation par percolation s'accentue si le matériau est soumis à des vibrations. Les grains les plus fins percolent jusque dans le bas du tas et les gros grains se retrouvent sur le dessus même si ceux-ci sont les plus lourds. L'exemple le plus connu de ce type de ségrégation est l'exemple des noix du Brésil cité précédemment (*Rosato et al.*, 1987).



(a) (b)

Figure 1.7: *Illustration de la ségrégation lors du déversement en tas. (a) Schéma : les particules de plus grosses tailles se retrouvent préférentiellement sur les bords du tas. (b) Photographie de la ségrégation observée dans un sablier (photographie Stéphane Bourlès GMCM).*

La remontée des gros grains sous vibration

En plus du phénomène de percolation, il existe un autre mécanisme de ségrégation lorsque l'on soumet un milieu granulaire polydisperse à des vibrations. Si on vibre un lit de grains monodisperses au fond duquel on a pris soin de placer un grain de plus grande taille, on observe que le gros grain peut remonter jusqu'à la surface du lit granulaire[2]. En effet, les petites particules percolent dans les vides laissés sous le gros grain, qui de part son poids, entraîne une consolidation de l'empilement l'empêchant de redescendre.

Ségrégation par élutriation

Lorsqu'un matériau granulaire, dont les éléments le constituant présentent une forte distribution de taille et contient une part non négligeable de grains dont la taille est de l'ordre du micron, est autorisé à s'écouler dans un entonnoir, on peut observer un autre type de ségrégation appelé ségrégation par élutriation. Lorsque les grains tombent, la vitesse de l'air remontant à cause de leur déplacement peut être égale ou supérieure à celle des fines particules. Ces dernières restent alors en suspension ou peuvent être repoussées sur les bords de l'entonnoir. Il est alors possible d'observer une couche de fines particules sur le dessus des grosses sphères.

1.2 L'industrie et les mélangeurs

Pour mélanger des matériaux granulaires, les industriels peuvent avoir recours à plusieurs techniques. Nous allons présenter ici les principaux mélangeurs utilisés dans l'industrie. D'une manière générale, les mécanismes de ces mélangeurs sont relativement simples et leurs usages restent souvent spécifiques à un type de matériau.

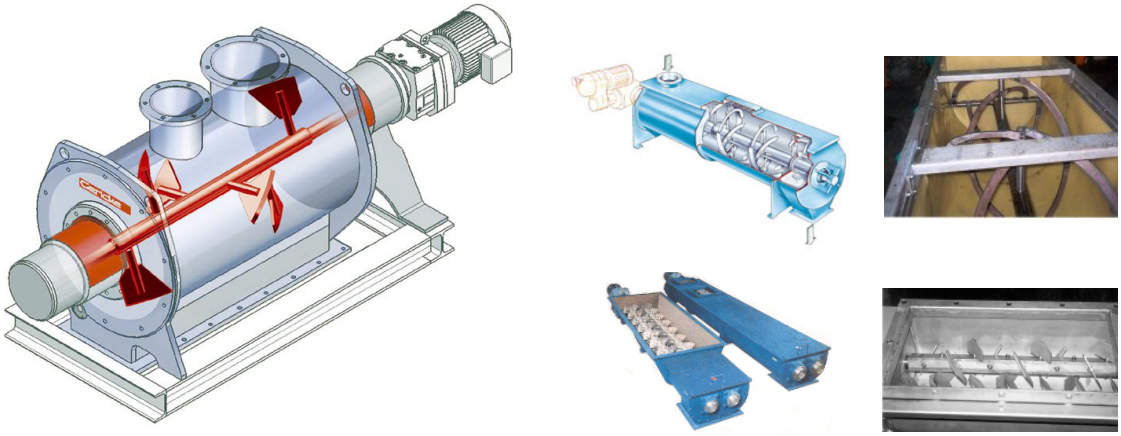
1.2.1 Les mélangeurs convectifs

Les mélangeurs convectifs sont des appareils comprenant une cuve de mélange fixe à l'intérieur de laquelle tourne un agitateur dont la vitesse de rotation peut varier entre 50 et 150 tours min^{-1}. Le mouvement de l'agitateur, dont la forme peut être extrêmement variée et conduire à des mélanges sensiblement différents, engendre un déplacement forcé d'un ensemble de particules d'un endroit à un autre de la cuve de mélange.

Les mélangeurs à pales

Les mélangeurs à pales sont constitués d'une auge horizontale cylindrique (voir figure 1.8(a)) ou hémicylindrique. L'agitateur est constitué d'éléments, tels que des socs ou un ou plusieurs rubans, fixés sur un arbre moteur ou sur un cadre. L'agitateur doit assurer une poussée axiale et une dispersion radiale des grains.

[2] A condition que l'amplitude des vibrations soit suffisamment élevée (*Duran et al.*, 1994).



(a) (b)

Figure 1.8: *(a) Mélangeur convectif à pales (d'après une documentation technique de Gericke Industries S.A.) .(b) De gauche à droite et de haut en bas : schéma d'un mélangeur cylindrique à rubans (d'après une documentation technique de Hosokawa Micron S.A.), photographie de rubans (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.), photographies de mélangeurs hémicylindriques à doubles pales (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.), photographie d'une pale (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.).*

Les mélangeurs à vis

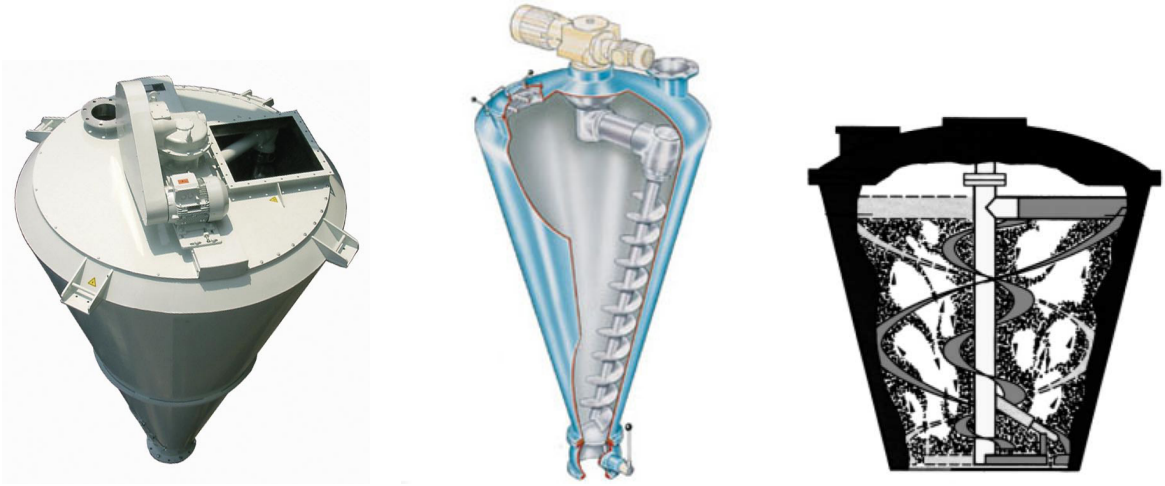
Parmi les mélangeurs convectifs, on distingue une seconde catégorie constituée des mélangeurs à vis. Dans ce genre de mélangeurs, une vis sans fin plonge dans la cuve de mélange depuis la partie supérieure. Les cuves sont généralement de forme conique ou cylindrique et disposées verticalement. La vis de mélange peut être verticale (voir figure 1.9(c)) ou orbitale avec la possibilité de tourner le long des parois de la cuve (voir figure 1.9(b)).

Les mélangeurs à haut cisaillement

Outre les mélangeurs à pales et les mélangeurs à vis, il existe un dernier type de mélangeur convectif constitué des mélangeurs à haut cisaillement. Dans ce type de mélangeur, l'agitateur est placé au fond de la cuve ce qui permet d'atteindre des vitesses beaucoup plus élevées que précédemment (1 000 tours min^{-1}). Ce genre de mélangeur permet parfois un broyage des particules. Pour assurer un raclage des parois de la cuve, l'agitateur a des dimensions proches de celles de la cuve.

1.2.2 Les mélangeurs à cuves tournantes

Les mélangeurs à cuves tournantes, ou mélangeurs à retournement, sont les plus couramment rencontrés. Les grains à mélanger sont contenus dans une enceinte fermée qui tourne



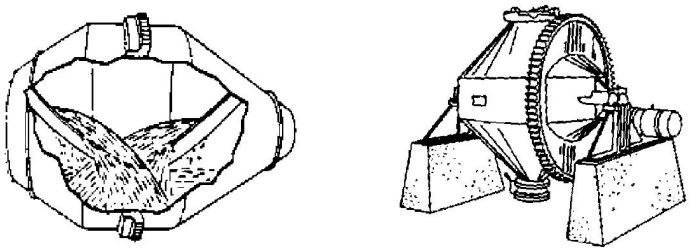
(a) (b) (c)

Figure 1.9: *(a) Photographie d'un mélangeur à vis orbitale, (b) schéma d'un mélangeur à vis orbitale (d'après une documentation technique de Hosokawa Micron S.A.), (c) schéma d'un mélangeur à vis verticale.*

autour d'un axe. On distingue différents types de mélangeurs à retournement suivant la forme de la cuve et de la position de l'axe de rotation.

Les mélangeurs à double cône

Parmi les mélangeurs à cuves tournantes, on distingue les mélangeurs à double cône. Comme leur nom l'indique, ceux-ci sont constitués de deux cônes reliés entre eux par une zone cylindrique à l'intérieur desquels sont placés des éléments permettant un brassage des grains. La cuve biconique est mise en rotation selon le plan contenant l'axe des cônes (voir figure 1.10(a)) ou perpendiculairement à celui-ci (voir figure 1.10(b)).



(a) (b)

Figure 1.10: *Schémas de mélangeurs à double cône d'après Berthiaux (2002) : (a) configuration horizontale, (b) configuration verticale.*

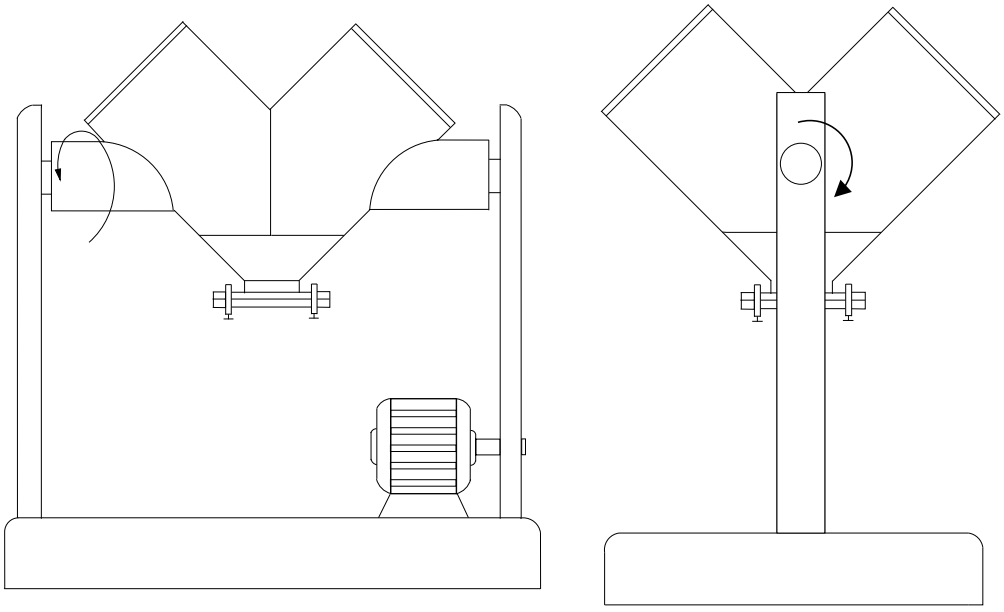


Figure 1.11: *Schémas de mélangeurs à double cuve : (a) mélangeur de type V, (b) mélangeur de type Y.*

Les mélangeurs à double cuve

Il existe des mélangeurs à double cuve pour lesquels la cuve de mélange est formée de deux cylindres. L'axe de rotation de la cuve peut être dans le plan des cuves ou perpendiculairement à celui-ci. Suivant le cas, on parle respectivement de mélangeurs de type V (figure 1.11(a)) et de mélangeurs de type Y (figure 1.11(b)).

Les mélangeurs en conteneur

Parfois, il peut être plus pratique de mélanger le milieu granulaire directement dans le conteneur qui est destiné à accueillir le mélange. Cela permet en effet d'éviter sa manipulation et donc de limiter la ségrégation du mélange. Ces appareils sont dépourvus d'agitateur ce qui facilite grandement le nettoyage de ce genre de mélangeurs. Les cuves peuvent être de formes quelconques, on peut ainsi trouver des cuves en forme de V ou cubiques comme illustré par la photographie 1.12. Il existe également des mélangeurs en conteneur, tel que le turbula, qui peuvent s'adapter à des récipients de formes et de tailles quelconques. Une photographie d'un turbula est donnée sur la figure 1.13. Les turbulas permettent via un mouvement complexe, d'obtenir des mélanges homogènes très rapidement.

Figure 1.12: *Mélangeur en conteneur à cuve cubique (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.).*

Figure 1.13: *Photographie d'un turbula (d'après une documentation technique de Artisan Scientific).*

1.2.3 Les mélangeurs statiques

Contrairement aux mélangeurs convectifs et aux mélangeurs à cuves tournantes, il existe une troisième catégorie de mélangeurs qui ne nécessite pas l'action d'un agitateur ou la mise en mouvement de la cuve pour réaliser le mélange d'un matériau granulaire. Le système étudié durant ce travail de thèse peut rentrer dans cette catégorie de mélangeur. En effet, nous montrerons que l'écoulement de grains à travers un empilement de sphères plus larges peut conduire à la réalisation de mélanges homogènes. Ces mélangeurs, qui utilisent l'écoulement des grains à travers un dispositif fixe, sont dénommés : les mélangeurs statiques. Suivant la nature de l'écoulement des grains, on peut différencier plusieurs catégories.

Les mélangeurs à lit fluidisé

Dans les mélangeurs à lit fluidisé, le matériau granulaire à mélanger traverse une cuve dans laquelle circule un gaz. La plupart de ces mélangeurs fonctionnent par intermittence pour permettre une phase de redéposition des particules. Un exemple de mélangeur utilisant le principe de fluidisation est représenté sur la figure 1.14.

Les mélangeurs en silo

Lorsque l'on vidange un silo, on observe un mélange axial des grains en raison d'un profil de vitesse parabolique dans le sens de l'écoulement et du rétrécissement du silo au niveau de son embouchure. Les mélangeurs en silos utilisent cette propriété et permettent également de réaliser un mélange radial par l'ajout de mini silos (figure 1.15(a)), de chicanes (figure 1.15(b)) ou de collecteurs (figure 1.15(c)). Pour accroître l'efficacité du principe de mélange, une recirculation du milieu granulaire jusqu'au sommet du silo est souvent mise en place.

Les mélangeurs en ligne

Les mélangeurs en ligne sont des éléments de faibles dimensions que l'on place au sein des écoulements de grains. On retrouve par exemple ces mélangeurs dans les conduites permettant l'acheminement du matériau granulaire entre deux endroits de la chaîne industrielle. La photographie 1.16 illustre un exemple de mélangeur en ligne.

1.2.4 Comment éviter la ségrégation

Comme nous venons de le voir, la diversité des mélangeurs illustre le fait que différentes techniques peuvent être utilisées pour éviter la ségrégation. D'un point de vue plus général, on peut brasser les grains via un agitateur ou les forcer à emprunter des chemins différents. Un grand nombre de sociétés industrielles évitent la démixtion en capturant le mélange granulaire dans une granule[3]. Cependant, la granulation du mélange n'est pas toujours possible. C'est par exemple le cas dans l'industrie alimentaire, où la pulvérisation de liquides sur les poudres déshydratées, les chips ou les céréales pour petits déjeuners est à proscrire.

[3]Une granule s'obtient en pulvérisant un liquide sur le mélange pour former des agglomérats. Ces derniers sont ensuite séchés.

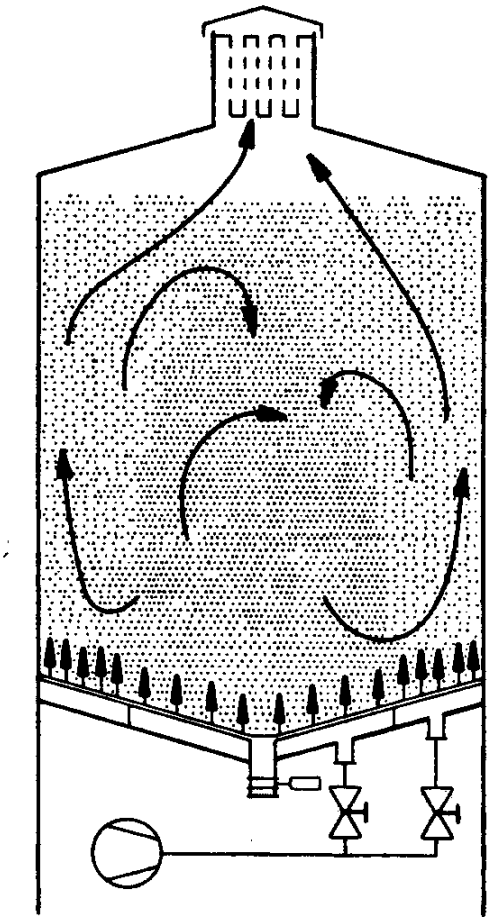


Figure 1.14: *Mélangeur à lit fluidisé d'après Fan et al. (1990).*

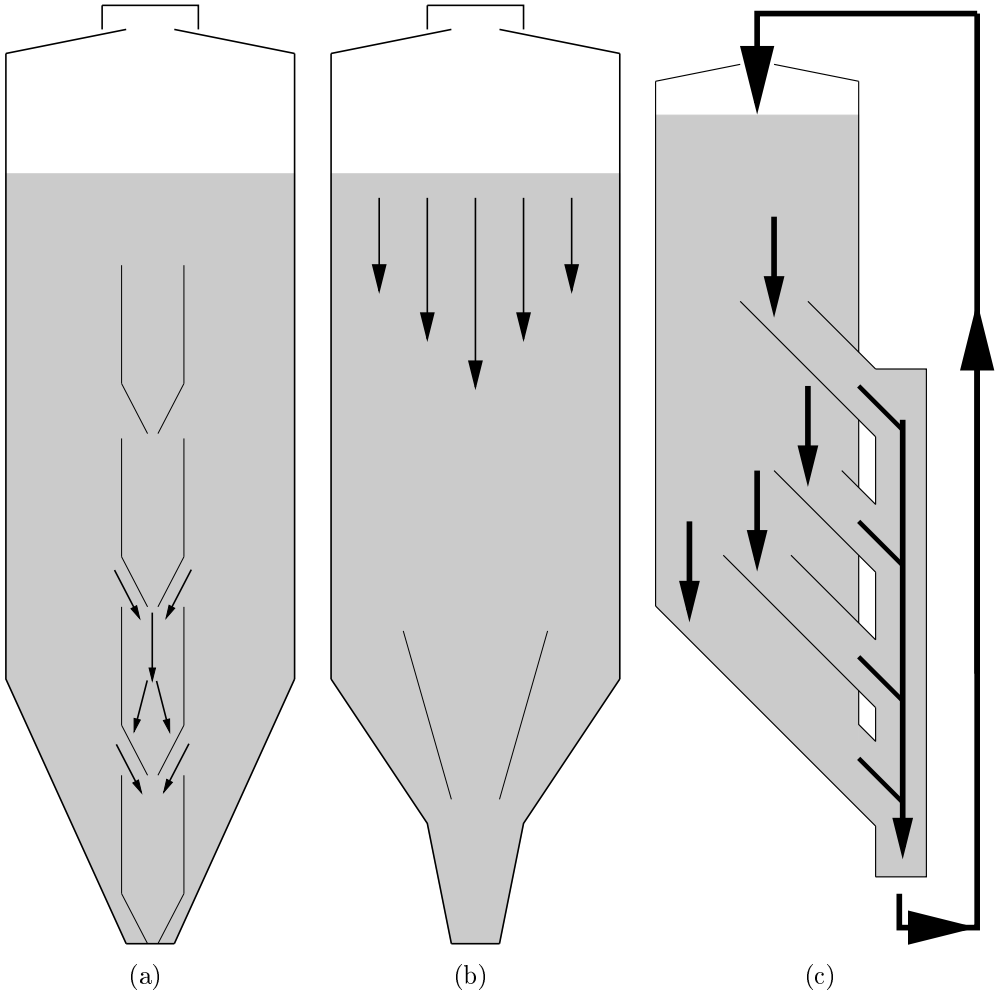


Figure 1.15: *Schémas de mélangeurs en silos : (a) mélangeur en silo avec mini silos, (b) mélangeur en silo avec chicanes, (c) mélangeur en silo avec collecteurs.*

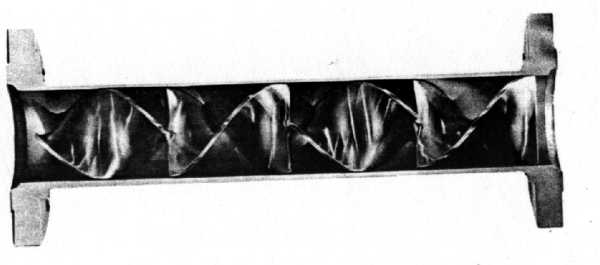
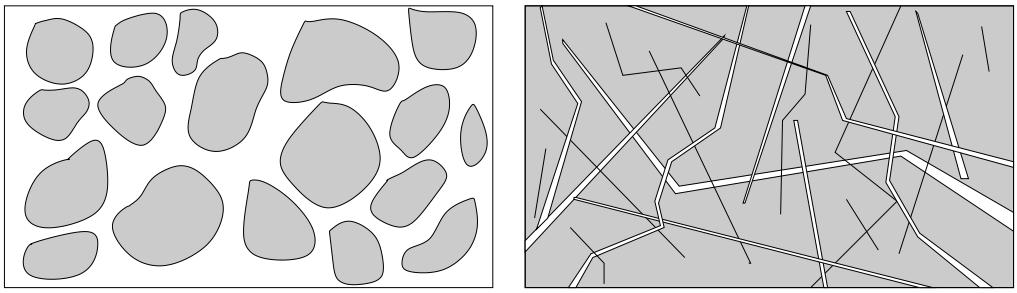


Figure 1.16: *Photographie d'un mélangeur en ligne d'après Guyon et Hulin (1997).*

1.3 Les milieux poreux

1.3.1 Quelques définitions

Un milieu poreux est constitué par une matrice solide et des vides appelés pores. Ces vides peuvent être remplis par de l'eau, de l'air ou d'autres fluides. D'une manière générale, on distingue deux types de porosité. La porosité d'interstice (voir figure 1.17(a)) et la porosité de fissure (voir figure 1.17(b)). La porosité d'interstice représente les vides autour



(a) (b)

Figure 1.17: *Deux types de porosité : (a) la porosité d'interstice, (b) la porosité de fissure.*

de particules solides plus ou moins liées les unes aux autres. Tandis que la porosité de fissure correspond à des fractures, fissures dans le matériau. En général, ces deux types de porosité peuvent cohabiter comme dans les roches par exemple. D'une manière générale la porosité P est définie par le rapport :

$$P = \frac{\text{volume des vides}}{\text{volume total de l'échantillon}} \tag{1.4}$$

La porosité est aussi liée au rapport C entre le volume de matière et le volume total par la relation $P = 1 - C$. C est appelé la compacité. On définit également une autre grandeur sans dimension qui est le rapport entre le volume des pores sur le volume du solide. Ce rapport est appelé indice des vides.
Dans tout ce qui suit, nous nous intéresserons uniquement au premier type de porosité c'est à dire à la porosité d'interstice. Lors des études en laboratoire, il est souvent commode de considérer un milieu poreux modèle dont la géométrie (forme des grains, porosité, ...) peut être contrôlée facilement. C'est pourquoi, on a souvent recours à des empilements de grains sphériques.

1.3.2 Caractéristiques des empilements de sphères

La porosité maximale d'un empilement de sphères est de $1 - \frac{\pi}{6} = 47,6\%$ et correspond à un agencement cubique simple des sphères représenté sur la figure 1.18(a). L'agencement le plus compact, sans déformer les sphères, est obtenu par un agencement hexagonal compact des sphères comme sur la figure1.18(d) ou bien par un agencement cubique faces centrées

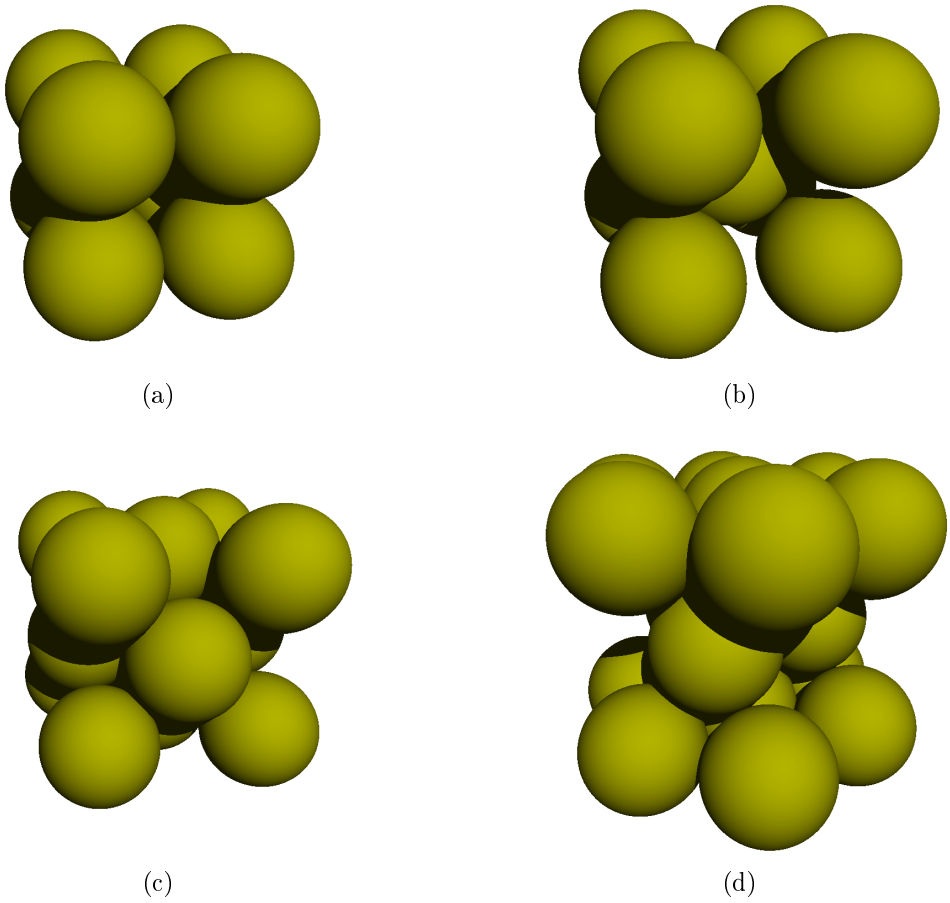


Figure 1.18: *Les structures ordonnées pour des empilements de sphères monotailles : (a) cubique simple, (b) cubique centré, (c) cubique à faces centrées et (d) hexagonal compact.*

1.18(c). La porosité est alors de $1 - \sqrt{2}\frac{\pi}{6} = 25.9\%$. D'une manière générale, on observe plus souvent des états intermédiaires avec des porosités comprises entre ces deux valeurs extrêmes. Si des contraintes sont exercées sur l'empilement, les grains peuvent se déformer ce qui a tendance à réduire la porosité. De la même manière, une dispersion de taille des grains constituant le milieu poreux a tendance à réduire la porosité (*Ben-Aim*, 1970; *Oger et al.*, 1986; *Oger*, 1987). La géométrie des empilements de grains a été et est encore le sujet de nombreuses études. Loin des cas idéaux de la figure 1.17, la géométrie d'un empilement réel de sphères est beaucoup plus complexe. En effet, les grains constituant les matériaux granulaires ne sont jamais identiques au micron près (au mieux, les sphères sont de classe A, c'est à dire que la précision sur la taille de celles-ci est $\pm 10^{-6}$ %). Or les forces de contacts qui agissent entre deux solides s'exercent typiquement sur des longueurs de l'ordre du millionième de mètre. Les empilements de matériaux granulaires sont donc sujet à un désordre des contacts. Des points de contacts peuvent être supprimés aléatoirement

sans remettre en cause la stabilité de l'empilement (*Oger*, 1987). La figure 1.19 montre un réseau des forces de contacts dans un empilement bidimensionnel. L'empilement de sphères construit aléatoirement qui présente la plus faible compacité et donc la plus grande porosité est l'empilement RLP (« Random Loose Packing »). $C_{RLP} \approx 56\%$ et $P_{RLP} \approx 0.44\%$. A l'inverse, l'empilement aléatoire le plus dense, l'empilement RCP (« Random Close Packing ») a une compacité C_{RCP} proche de 64% (*Jaeger et Nagel*, 1992) et une porosité P_{RCP} de 36%.

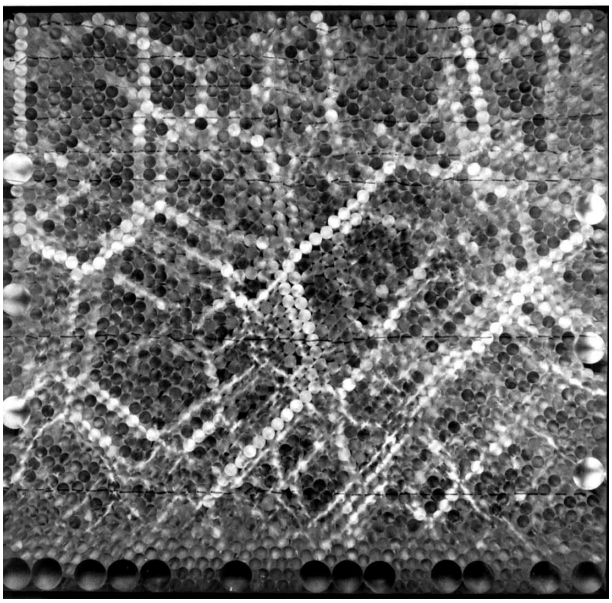


Figure 1.19: *Photographie d'un empilement de cylindres de Schneebeli biréfringents. Les chaînes de forces sont traduites par une luminosité plus intense (photographie : Madani Ammi).*

La porosité traduit donc le volume de vide dans un milieu poreux. Les mesures de volumes peuvent être effectuées par différents procédés (*Monicard*, 1965; *Dullien*, 1979; *Bourbié et Zinszner*, 1985; *Bourbié et al.*, 1986) pouvant conduire à des résultats différents. En effet, suivant la technique utilisée, on mesurera soit la porosité ouverte (c'est à dire le volume de vide relié à l'extérieur et accessible au fluide, la porosité ouverte peut par exemple être mesurée par porosimétrie au mercure (*Drake*, 1949; *Moura et al.*, 2005)) ou la porosité totale. La différence entre ces deux porosités provient de l'existence de pores non accessibles au fluide susceptible de s'écouler dans le milieu poreux et à la présence d'eau liée aux grains par des forces moléculaires (voir figure 1.20). On parle alors de porosité fermée. Une méthode pour déterminer la connectivité d'un milieu poreux isolant peut être de mesurer la conductivité d'un fluide conducteur qui sature ce milieu poreux. Plus le milieu poreux est connecté et plus la conductivité sera grande. La conductivité σ d'un milieu poreux saturé par un fluide conducteur de conductivité σ_f est caractérisée par un facteur de formation F défini par :

$$F = \frac{\sigma_f}{\sigma} \tag{1.5}$$

Ainsi, lorsque l'on désire faire s'écouler un fluide dans un tel milieu, on se réfère de préférence au terme de porosité cinématique ou porosité ouverte. En effet, le volume dans lequel un fluide peut s'écouler est inférieur au volume total des pores.

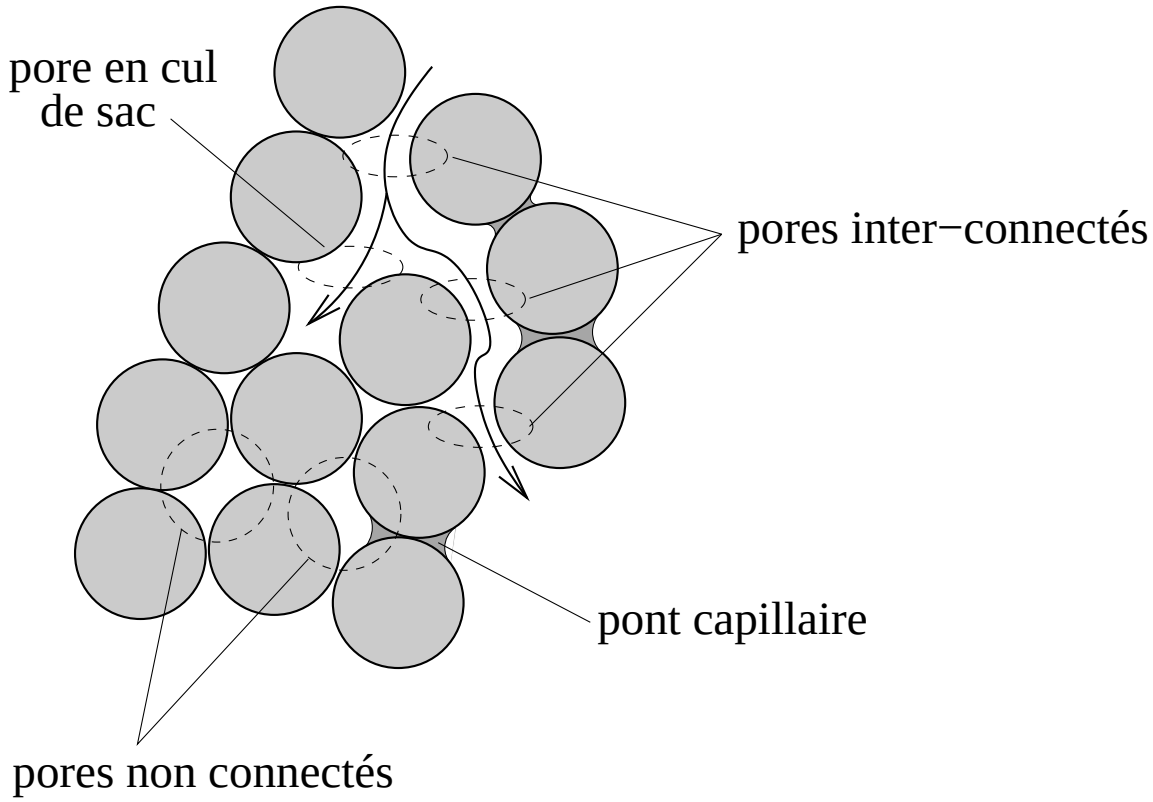


Figure 1.20: *Schéma 2D illustrant les différents volumes accessibles ou non accessibles lors du passage d'un fluide.*

La perméabilité est la capacité qu'a un milieu poreux à laisser passer un fluide. Une perméabilité élevée est synonyme d'une porosité élevée. Cependant l'inverse n'est pas vrai. Une perméabilité élevée nécessite que les pores soient fortement interconnectés. Une autre propriété sans dimension que l'on définit pour caractériser un milieu poreux est la tortuosité T. La tortuosité peut être reliée au facteur de formation (*Archie*, 1942; *Johnson et Sen*, 1981).

$$F = \frac{T}{C} \tag{1.6}$$

Le facteur de structure peut également être déterminé par la relation empirique d'Archie,

$$F = C^{-m} \tag{1.7}$$

où l'exposant m peut varier entre 3/2 et 2 pour des empilements de billes de verre (*Wong et al.*, 1984). La tortuosité est définie comme le rapport entre la longueur L' d'une ligne de courant séparant deux points et la distance L entre ces deux points (voir figure 1.21). On a

donc $T = L'/L > 1$. Pour une géométrie simple de tubes parallèles à l'écoulement, $T = 1$. Carman et Kozeny (*Carman*, 1961) ont relié la perméabilité à la taille D des grains,

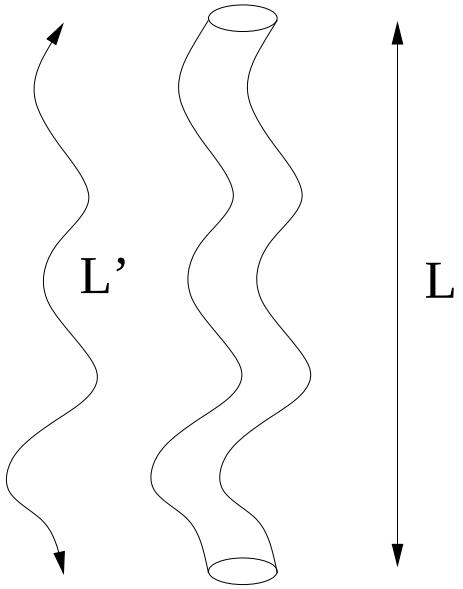


Figure 1.21: *Schéma illustrant la définition de la tortuosité : $T = L'/L$.*

$$k = AC^3 \frac{D^2}{T} \tag{1.8}$$

où A est un nombre sans dimension.
Dans un empilement de sphères, en raison du caractère désordonné, les pores peuvent avoir plusieurs tailles. Si l'on considère un empilement compact de sphères de diamètres D et que l'on cherche à faire transiter des petites sphères de diamètres d, il est possible de définir une valeur critique Φ_a du rapport D/d (*Oger*, 1987).
Le rapport Φ_a correspond au cas où une sphère de diamètre d passe juste à travers le cou formé par trois sphères en contact deux à deux comme illustré sur la figure 1.22

$$\Phi_a = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right)^{-1} \approx 6{,}46 \tag{1.9}$$

On peut aussi définir un second rapport D/d particulier. Ce rapport que l'on notera Φ_b correspond au cas où la petite sphère de diamètre d s'inscrit juste dans les plus petites cavités de l'empilement. Les plus petites cavités qui peuvent exister dans un empilement de sphères de diamètre D sont celles formées par le contact mutuel de quatre sphères, formant un tétraèdre, comme représenté sur la figure 1.23. Le rapport entre D et le diamètre de la petite sphère pouvant s'inscrire dans cette cavité vaut :

$$\Phi_b = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1\right)^{-1} \approx 4{,}45 \tag{1.10}$$

Si l'on considère uniquement les causes géométriques de la capture :

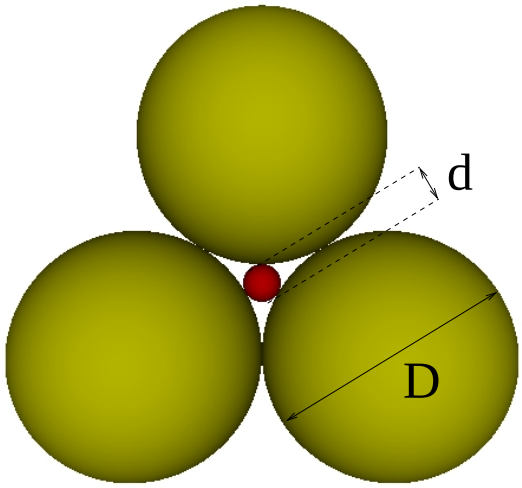


Figure 1.22: *Schéma illustrant le rapport D/d seuil au-dessus duquel les particules sont susceptibles de rester piégées dans l'empilement.*

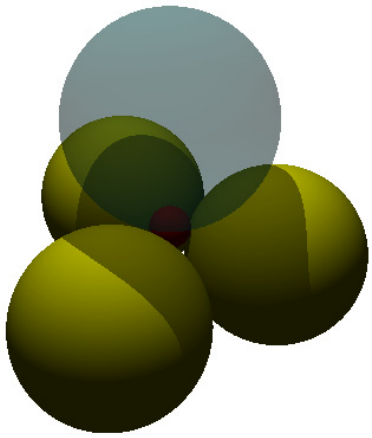


Figure 1.23: *Illustration d'une cavité tétraédrique. Il s'agit de la plus petite cavité que l'on peut observer dans un empilement de sphères monotailles. La petite sphère s'inscrit juste dans cette cavité. Le rapport des diamètres entre les grosses et la petite sphère vaut alors approximativement* 4,45.

- si $D/d > \Phi_a$, les particules peuvent alors traverser tout le milieu,
- si $D/d < \Phi_a$, les particules peuvent rester bloquées dans le réseau de pores si elles rencontrent des pores de dimensions inférieures à leur taille.

Frost (*Frost*, 1978) a donné la distribution de taille des cavités dans un empilement de sphères de même diamètre. Elle est représentée sur la figure 1.24. Lorsque nous désirons

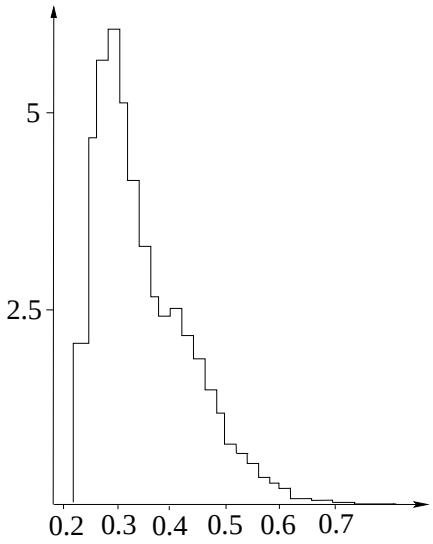


Figure 1.24: *Distribution $p(k_0)$ de taille des cavités. k_0 représente le rayon de la cavité en unité de rayon des grosses sphères.*

remplir les pores d'un empilement de sphères par des sphères plus petites, il peut être préférable de raisonner en terme de volume plutôt qu'en terme de nombre de particules. Pour cela, il est commode d'estimer le volume interstitiel maximum entre 4 sphères de diamètre D dans un arrangement tétraédrique. Ce volume est le volume accessible pour des particules de diamètre d. Si on tient compte de la compacité limite $C_{RCP} = 0{,}64$ de l'empilement aléatoire le plus dense, on peut alors définir ce volume V_p comme :

$$V_p = C_{RCP}\frac{D^3}{12}(\sqrt{2} - 2\Omega)$$

où $\Omega = 3\,\mathrm{Arccos}\,(1/3) - \pi$ est l'angle solide du tétraèdre. Le volume V_p est alors une estimation du volume accessible pour des sphères de diamètre d dans le plus petit pore de la structure. On peut donc définir la fraction de volume de cavité tétraédrique N_p occupée par N petites sphères comme $N_p = V/V_p$ où $V = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{d}{2}\right)^3 N$. On a donc N_p qui est proportionnel à $(D/d)^{-3}$.

1.4 Transport dans un milieu poreux

Il existe une multitude de modèles pour décrire les phénomènes de transport de matières dans un milieu poreux. Ces différents modèles peuvent être regroupés selon quatre catégories (*Dam et al.*, 2004) :

- *Stochastic-Convective Model* (SCM). Le milieu poreux est considéré comme un assemblage de « tubes » d'écoulement indépendants les uns des autres.
- *Advection-Dispersion Equation* (ADE). On suppose que le milieu poreux est le siège d'un flux uniforme où le soluté se propage par un flux dispersif analogue à la diffusion, et régit par la loi de Fick.
- *Fractional Advection-Dispersion Equation* (FADE). Les modèles de type FADE, sont des modèles intermédiaires entre les modèles de type SCM et ADE. La raison principale du développement de ce genre de modèle est l'incapacité des modèles ADE à modéliser le transport à l'échelle du terrain.
- *Continuous-Time Random Walk* (CTRW). Ces modèles décrivent le mouvement de particules par un déplacement aléatoire dans le temps (*Berkowitz et al.*, 2000; *Berkowitz et Scher*, 2001).

Bien que nous nous soyons intéressés aux transports de grains secs dans un milieu poreux, il peut être envisageable, comme nous serons amenés à le faire par la suite, de comparer ce type de transport avec celui d'un fluide. C'est pourquoi nous allons exposer ici les différents mécanismes pouvant occasionner un flux de matières dans un milieu poreux. Pour cela, nous considérons une approche de type ADE, car celle-ci permet la détermination de paramètres physiques. Dans ce type d'approche, on attribue les flux de matières observés dans un milieu poreux homogène à deux phénomènes : la convection caractérisée par une vitesse convective moyenne des particules V et la dispersion hydrodynamique caractérisée par un coefficient de dispersion.

1.4.1 La convection

La convection est l'un des mécanismes prépondérants à l'origine des flux de matières dans les milieux poreux. Il est également le plus intuitif. La convection consiste en l'entraînement des éléments par le fluide qui se déplace. Dans un milieu unidimensionnel, l'équation de transport par convection est donnée par :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -V_x \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \tag{1.11}$$

où $C(x,t)$ est la concentration de l'espèce migrante et V_x est la vitesse moyenne linéaire du fluide. Dans un milieu tridimensionnel, l'équation de transport par convection devient :

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(\overrightarrow{V} C(r,t)\right) \tag{1.12}$$

où V est la vitesse de Darcy. Dans le cas d'un fluide incompressible (div $\overrightarrow{V} = 0$), cette équation de transport devient :

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = -\overrightarrow{V}\,\overrightarrow{\text{grad}}\; C(r,t) \tag{1.13}$$

1.4.2 La dispersion cinématique

En raison de la microstructure du milieu, la vitesse du fluide varie en magnitude et en direction au sein du milieu poreux. Cette variation des vitesses entraîne une dilution du soluté, appelée dispersion cinématique. Les principales causes de la dispersion cinématique sont tout d'abord l'existence de profils de vitesses paraboliques lors du passage des particules au sein des pores. La friction entraîne une vitesse maximale au centre du pore tandis que la vitesse est nulle sur les parois de celui-ci. Deuxièmement, en raison des grandes variations de longueurs et de tailles des pores qui peuvent exister dans un milieu poreux, la vitesse moyenne de l'écoulement varie d'un pore à l'autre. Enfin, en raison de la tortuosité du milieu, les particules ont des chemins plus ou moins longs pour une même direction globale d'écoulement. Ces variations locales de longueurs de trajet contribuent également à la dispersion cinématique. Ainsi, en raison du mouvement du fluide, des groupes de particules sont continûment séparés. Il s'ensuit alors un étalement longitudinal et transversal des particules autour du front convectif pur. Cet étalement peut être décrit phénoménologiquement par une loi similaire à la loi de Fick, où le coefficient de dispersion s'exprime sous une forme tensorielle, symétrique de second ordre :

$$\overrightarrow{\overrightarrow{D_c}} = \begin{vmatrix} D_{c_\perp} & 0 & 0 \\ 0 & D_{c_\perp} & 0 \\ 0 & 0 & D_{c_{//}} \end{vmatrix}$$

Les directions principales du tenseur sont liées à l'écoulement. On définit ainsi $D_{c_{//}}$ comme le coefficient de dispersion dans la direction longitudinale. C'est-à-dire dans la direction de l'écoulement. Et on définit $D_{c_\perp}$ comme le coefficient de dispersion dans les directions transverses à l'écoulement. Il a été établi (*Scheidegger*, 1961) que ces coefficients de dispersion cinématique sont proportionnels au module de la vitesse de Darcy.

$$D_{c_{//}} = \alpha_{//}\|V\|$$

$$D_{c_\perp} = \alpha_\perp\|V\|$$

Les coefficients de proportionnalités, $\alpha_{//}$ et $\alpha_\perp$ sont respectivement la dispersivité longitudinale et la dispersivité transversale. La dispersivité est une propriété caractéristique du milieu poreux et du champ de vitesse.

La diffusion moléculaire

Contrairement à la dispersion cinématique, la diffusion moléculaire peut agir indépendamment de la convection. Il s'agit d'un phénomène lié à l'agitation des particules en raison des collisions entre particules. Si la concentration n'est pas homogène, un flux de particules des

régions de plus fortes concentrations vers les régions de plus faibles concentrations s'établit suivant la loi de Fick :

$$j_d = -D_m \overrightarrow{\text{grad}}\, C(r,t) \tag{1.14}$$

traduisant que le flux massique de particule j_d est proportionnel au gradient de concentration. Le coefficient de proportionnalité D_m est le coefficient de diffusion moléculaire. Dans les milieux poreux, la présence de grains ralentit le processus de diffusion car les particules doivent suivre des chemins plus longs que dans le cas où la diffusion se ferait dans un fluide libre. On définit alors un coefficient de diffusion effectif D_m^{eff} que l'on peut parfois relier au coefficient de diffusion moléculaire.

1.4.3 La dispersion hydrodynamique

En pratique, on ne peut pas dissocier l'effet dû à la dispersion cinématique de celui dû à la diffusion moléculaire. C'est pourquoi ces deux contributions sont généralement décrites ensemble par une loi de diffusion de Fick avec un coefficient de dispersion commun $\overrightarrow{\overrightarrow{D}}$, appelé coefficient de dispersion hydrodynamique, qui regroupe le coefficient de dispersion cinématique et le coefficient de diffusion moléculaire. On peut alors expliciter les éléments diagonaux du tenseur par :

$$D_{//} = \alpha_{//}\|V\| + D_m^{eff}$$
$$D_{\perp} = \alpha_{\perp}\|V\| + D_m^{eff}$$

Au sens large du terme dispersion, on peut exprimer la variation de la concentration dans le temps et l'espace par :

$$\left(\frac{\partial C(r,t)}{\partial t}\right)_{\text{dispersion}} = \text{div}\left(\overrightarrow{\overrightarrow{D}}\, \overrightarrow{\text{grad}}\, C(r,t)\right)$$

1.4.4 L'équation d'advection-dispersion (ou de convection-dispersion)

Un bilan de matière, en tenant compte à la fois des phénomènes de convection et des phénomènes de dispersion ainsi qu'en tenant compte éventuellement d'un terme source Q, amène à considérer une équation de la forme :

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = \text{div}\left(\overrightarrow{\overrightarrow{D}}\, \overrightarrow{\text{grad}}\, C(r,t) - \overrightarrow{V} C(r,t)\right) + Q \tag{1.15}$$

équation que l'on écrit souvent sous la forme :

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} + L\left(C(r,t)\right) = Q \tag{1.16}$$

où $L(C(r,t)) = -\,\text{div}\left(\overrightarrow{\overrightarrow{D}}\, \overrightarrow{\text{grad}}\, C(r,t) - \overrightarrow{V} C(r,t)\right)$ est l'opérateur de transport.

Dans la pratique, on rencontre rarement une convection-diffusion pure. Le cas obéissant à l'équation (1.16) demeure donc un cas idéal. En effet, il néglige toute interaction entre la matrice poreuse et les espèces migrantes. Ces interactions, dites interactions de sorption, peuvent être de plusieurs types (*D'Angelo et al.*, 2003; *Drazer et al.*, 1999).

- L'adsorption consiste en l'accumulation d'éléments sur l'interface solide-fluide.
- La chimiesorption consiste en l'intégration d'éléments à la matrice solide par réaction chimique.

Ces phénomènes de sorption induisent un terme source $Q_s(C(r,t))$ dans l'équation de transport. Ce terme source est défini comme :

$$Q_s(C(r,t)) = -\frac{\rho_s}{P}\Gamma\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} \tag{1.17}$$

où ρ_s est la masse volumique du milieu poreux et Γ est une constante caractéristique de l'interaction de sorption. Cette constante est appelée constante de sorption et s'exprime en $\mathrm{m^3Kg^{-3}}$. On peut donc reformuler l'équation de transport avec un facteur de retard R tel que :

$$R = 1 + \frac{\rho_s}{P}\Gamma \tag{1.18}$$

L'équation de transport s'écrit alors :

$$R\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} + L(C(r,t)) = 0 \tag{1.19}$$

En plus de ces réactions de sorption, les particules peuvent être soumises à des désintégrations radioactives. Dans ce genre de situations, la variation de la concentration de particules s'exprime par :

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = -\lambda C(r,t) \tag{1.20}$$

On peut aussi, par analogie avec une décroissance radioactive, modéliser les phénomènes de réaction par un terme de dépôt du premier ordre négligeant tout effet de relargage des particules (*Corapcioglu et Jiang*, 1993; *Dieulin*, 1980; *Kretzschmar et al.*, 1997) où K est le coefficient cinétique de dépôt (constante de décroissance du premier ordre) s'exprimant en $\mathrm{m^3s^{-1}}$. Si on tient compte également d'un terme source de la phase liquide d'ordre zéro γ, l'équation de transport à une dimension s'écrit alors

$$R\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - D_{//}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} + KC(x,t) + \gamma = 0 \tag{1.21}$$

1.4.5 Advection versus dispersion

L'importance relative du transport par advection par rapport au transport par dispersion (dispersion cinématique et/ou diffusion moléculaire) est exprimée à l'aide d'un paramètre adimensionné : le nombre de Péclet Pe :

$$\mathrm{Pe} = \frac{\text{transport par advection}}{\text{transport par dispersion}} = \frac{Vs}{D_{//}} \tag{1.22}$$

où s est une longueur caractéristique. Ainsi, plus le nombre de Péclet est grand, plus le transport se fait par advection. On définit également les nombres de Péclet Pe_l suivant la direction de l'écoulement et Pe_r dans la direction perpendiculaire à l''écoulement.

1.5 Solution des équations de transport

Nous allons présenter ci-dessous quelques solutions analytiques des équations de transports. Il existe plusieurs solutions analytiques pour différentes conditions aux limites. Faire la liste de ces solutions pour l'ensemble des conditions aux limites envisageables sort du cadre de ce travail. Une discussion sur les différentes conditions aux limites et leurs significations physiques a été effectuée par de nombreux auteurs (*Brigham*, 1974; *Baker*, 1977; *Kreft et Zuber*, 1978, 1979; *Kreft*, 1981; *Nauman*, 1981). C'est pourquoi nous allons présenter, dans ce qui suit, les solutions analytiques de l'équation (1.21) pour des conditions aux limites semblables à celles de nos expériences, c'est à dire pour une injection brève de particules au sein du milieu poreux. Une « collection » de solutions analytiques de l'équation (1.21) a été donnée par *Van Genuchten et Alves* (1982).

1.5.1 Solution de l'équation de convection diffusion

En considérant un milieu semi-infini, Van Genuchten (*Van Genuchten*, 1981; *Van Genuchten et Alves*, 1982) a montré que pour une injection continue ($C(0,t) = C_0$) , l'équation (1.21), avec comme condition initiale $C(x,0) = 0$ et comme condition limite $\dfrac{\partial C(\infty,t)}{\partial x} = 0$, à une solution analytique de la forme :

$$C(x,t) = \left(C_0 - \frac{K}{\mu}\right) H(x,t) + M(x,t) \tag{1.23}$$

où :

$$\begin{aligned} H(x,t) =& \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(V-\beta)\,x}{2D_{//}}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{(Rx-\beta t)}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right] \\ &+ \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(V+\beta)}{2D_{//}}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{(Rx+\beta t)\,x}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right] \end{aligned} \tag{1.24}$$

et

$$\begin{aligned} M(x,t) =& \frac{K}{\mu} \exp\left(-\frac{\mu t}{R}\right) \left\{\frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{Vx}{D_{//}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right)\right\} \\ &+ \frac{K}{\gamma}\left(1 - \exp\left(-\frac{\mu t}{R}\right)\right) \end{aligned} \tag{1.25}$$

avec

$$\beta = V\sqrt{1 + \frac{4KD_{//}}{V^2}}$$

Une solution analytique pour une injection brève peut être obtenue par différentiation de l'équation (1.23) par rapport au temps. On peut d'une manière générale distinguer plusieurs cas.

premier cas : $R = 1$, $K = 0$ et $\gamma = 0$

Dans ces conditions, l'équation (1.21) se simplifie sous la forme :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - D_{//}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = 0 \tag{1.26}$$

Pour une injection brève ($C_0 \mathrm{d}t = M/Q$), la solution analytique de l'équation (1.26) est donnée par

$$C(x,t) = \frac{mx}{Q\sqrt{4\pi D_{//} t^3}} \exp\left(\frac{-(x-Vt)^2}{4D_{//}t}\right) \tag{1.27}$$

Si on note $C_{e_1}(x,t)$ la concentration cumulée dans le temps à la sortie du milieu poreux, autrement appelée profil d'élutriation, celle-ci est alors donnée par :

$$C_{e_1}(x,t) = \frac{C_0}{2}\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x-Vt}{\sqrt{4D_{//}t}}\right) + \exp\left(\frac{xV}{D_{//}}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x+Vt}{\sqrt{4D_{//}t}}\right)\right] \tag{1.28}$$

deuxième cas : $\gamma = 0$

En l'absence du terme source d'ordre 0, l'équation de transport s'écrit :

$$R\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - D_{//}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} + KC(x,t) = 0 \tag{1.29}$$

La solution analytique pour une injection brève ($C_0 \mathrm{d}t = M/Q$) est alors donnée par :

$$C(x,t) = \frac{mRx}{Q\sqrt{4\pi D_{//} Rt^3}} \exp\left(\frac{x(V-\beta)}{2D_{//}}\right) \exp\left(\frac{-(Rx-\beta t)^2}{4D_{//}Rt}\right) \tag{1.30}$$

Si on note $C_{e_2}(x,t)$ la concentration cumulée dans le temps à la sortie du milieu poreux, celle-ci est alors donnée par :

$$C_{e_2}(x,t) = \frac{C_0}{2}\left[\exp\left(\frac{x(V-\beta)}{2D_{//}}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-\beta t}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right) + \exp\left(\frac{x(V+\beta)}{2D_{//}}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+\beta t}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right)\right] \tag{1.31}$$

troisième cas : $K = 0$

En l'absence du terme source du premier ordre, l'équation de transport prend la forme :

$$R\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - D_{//}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} - \gamma = 0 \tag{1.32}$$

La solution (1.23) se réécrit donc sous une forme particulière :

$$C_{e_3}(x,t) = \frac{C_0}{2}\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right) + \exp(\frac{Vx}{D})\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right)\right] + \frac{\gamma}{R}\left(t + \frac{Rx-vt}{2V}\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right) + \frac{Rx+vt}{2V}\exp\frac{Vx}{D}\operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+Vt}{\sqrt{4D_{//}Rt}}\right)\right) \tag{1.33}$$

correspondant également à l'intégrale

$$C_{e_3}(x,t) = \int_0^t C(x,t)\,\mathrm{d}t$$

où $C(x,t)$ serait la solution de (1.32) pour une injection de traceur sous la forme d'une impulsion.

quatrième cas : cas d'une convection pure

Enfin, il existe un dernier cas intéressant. Il s'agit du cas correspondant à une convection pure. L'équation (1.21), en l'absence de termes sources et du facteur de retard s'écrit :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - D_{//}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} = 0 \tag{1.34}$$

La solution de l'équation (1.34) pour une injection brève s'écrit :

$$C(x,t) = \frac{mx}{Q\sqrt{4\pi D_{//}t^3}}\exp\left(\frac{-x^2}{4D_{//}t}\right) \tag{1.35}$$

De la même manière que précédemment, on peut écrire C_{e_4} comme l'intégrale de l'équation (1.35) par rapport au temps.

$$C_{e_4}(x,t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{//}t}}\right) \tag{1.36}$$

1.6 Le transport de grains en milieu poreux

1.6.1 Similitudes / différences avec le cas de l'écoulement d'un fluide

L'écoulement de grains à travers un milieu poreux sec est différent de l'écoulement de traceurs dans un milieu poreux. En effet, dans la gamme de taille des grains utilisés (du millimètre au centimètre), les phénomènes d'adsorption des grains sont inexistants. L'agitation thermique ne se faisant pas ressentir, la diffusion moléculaire n'intervient pas dans le processus de transport. Néanmoins, les collisions des particules entre elles et avec les

sphères constituant le milieu poreux induisent des changements aléatoires des vitesses des particules. C'est pourquoi, si l'on fait abstraction de l'apport d'énergie indispensable à la percolation des grains, on peut faire une analogie entre la diffusion moléculaire et la diffusion des grains via les collisions. Il est donc tout à fait raisonnable d'utiliser une loi de type advection diffusion pour décrire les comportements de grains en écoulement dans un milieu poreux. On peut aussi se convaincre de la validité d'une telle équation par analogie avec l'équation de Smoluchowski, établie en 1906 et permettant la description de la distribution de probabilité d'une particule brownienne dans un milieu inhomogène. La démonstration de cette équation est présentée en annexe B.

1.6.2 Études antérieures

La percolation spontanée de grains dans des empilements de sphères de plus grandes tailles, de part son intérêt dans la compréhension des mécanismes à la base de la ségrégation de taille, a été le sujet d'études préalables dont nous allons rappeler ici les principaux résultats.

Percolation d'une sphère dans un empilement de sphères plus grosses

Bridgwater et al. (1969) se sont intéressés à l'écoulement de particules injectées les unes après les autres dans un empilement de sphères. L'empilement de sphères était contenu dans un récipient cylindrique de hauteur 30 cm et de diamètre interne 15 cm. Ils injectaient des particules les unes après les autres dans l'empilement et observaient le point de sortie des particules en les récupérant sur un plateau adhésif placé sous l'empilement de grosses sphères. Pour s'assurer du passage des particules à travers tous les orifices de la structure poreuse, les auteurs ont pris soin de choisir des particules suffisamment petites par rapport aux sphères constituant le milieu poreux. Si on considère un nombre N_0 de particules placées sur l'axe d'un cylindre rempli de sphères plus larges, ces petites particules peuvent se disperser radialement en tombant dans l'empilement suivant l'équation :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_\perp \left(\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n}{\partial r} \right) \tag{1.37}$$

où n est le nombre de petites particules, par unité d'aire perpendiculairement à la direction de percolation, à une distance r au temps t. L'équation (1.37) implique donc de considérer l'empilement comme uniforme et l'approche considérée fait abstraction de toute dispersion longitudinale. Si on fait les hypothèses que toutes les particules mettent autant de temps pour traverser l'empilement et que celui-ci s'étend à l'infini radialement, alors les auteurs montrent que l'on peut écrire :

$$\frac{r^2}{4 D_\perp t} = \ln \left(\frac{N_0}{N_0 - N} \right) \tag{1.38}$$

où N est le nombre de petites particules dont le centre est à l'intérieur du rayon r au temps t. N_0 est le nombre total de particules. *Bridgwater et al.* (1969) ont montré que la relation (1.38) était vérifiée pour différents types de particules percolantes et de larges

Empilement	Particules percolantes	$D_\perp$	e
$D = 1{,}2$ cm, verre	$d = 0{,}8$ mm, acier	1,7	0,92
	$d = 0{,}8$ mm, fer	1,7	0,88
	$d = 0{,}8$ mm, verre	1,5	0,84
	$d = 0{,}8$ mm, résine	1,3	0,69
	$d = 0{,}8$ mm, plomb	1,4	0,19
$D = 3{,}7$ cm , balles de tennis de table	$d = 1{,}3$ mm, verre	8,1	0,42
	$d = 2{,}1$ mm, verre	7,4	0,79
	$d = 3{,}1$ mm, verre	7,5	0,82
	$d = 4{,}2$ mm, plomb	6,6	0,50
	$d = 1{,}6$ mm, acier	12	0,84

Tableau 1.1: *Tableau résumant les valeurs de coefficients de dispersion obtenus par Bridgwater et al. (1969), pour différentes tailles de grains.*

sphères. Ceci traduit donc le caractère diffusif de la dispersion radiale des particules et valide l'hypothèse que le temps de transit est identique pour toutes les particules et cela quel que soit le matériau qui les constitue. Cela illustre également que les effets de tailles finies sont négligeables. Ils ont pu ainsi déterminer les coefficients de dispersion pour différents matériaux, dont les valeurs sont rappelées dans le tableau 1.1.

Les auteurs ont également déterminé les valeurs du nombre de Péclet radial pour différents types de billes (*Bridgwater et al.*, 1969). D'une manière générale, ils ont montré que le nombre de Péclet radial, qui varie dans la gamme de 12 à 5, décroît lorsque le coefficient de restitution croît. Selon les auteurs, ces résultats sont raisonnablement en accord avec le modèle de dispersion de traceurs de *Ranz* (1952). Plus le coefficient de restitution est élevé et plus les particules parcourent de grandes distances. Ceci a pour effet d'augmenter la dispersion radiale des particules et donc de diminuer le nombre de Péclet. Les auteurs suggèrent également que le mouvement des particules se ferait essentiellement par saut et que le frottement des matériaux n'a pas d'influence sur les caractéristiques du transport. Dans une deuxième série d'expériences *Bridgwater et Ingram* (1971) ont mesuré le temps de résidence de ces particules injectées les unes après les autres. Ils ont ainsi pu montrer que la vitesse moyenne de percolation diminue lorsque la valeur du coefficient de restitution augmente. Plus la collision est élastique, moins la dissipation d'énergie est rapide. La particule percolante met alors plus de temps pour descendre dans l'empilement. Ces deux résultats, à savoir que la dispersion radiale augmente et que la vitesse moyenne de percolation diminue lorsqu'on augmente le coefficient de restitution, sont très importants. En effet, nous serons amenés à y revenir dans la suite de ce travail. Les auteurs ont également montré que la somme cumulée des temps de transit à la sortie du milieu poreux suivait

une loi du type :

$$\frac{n}{N_0} = \frac{1}{2}\left(1 - \text{erf}\left(\frac{V\left(\langle t\rangle - t\right)}{2\sqrt{D_{//}\langle t\rangle}}\right)\right) \tag{1.39}$$

basée sur la solution d'une équation de diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_{//}\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \tag{1.40}$$

avec les conditions :

$$\begin{cases} n = 0, & t = 0,\ |z| > 0 \\ n = 0, & t > 0,\ z = \pm\infty \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} n\,\mathrm{d}z = N_0, & \text{pour tout } t \end{cases} \tag{1.41}$$

En plus de ces études expérimentales, *Masliyah et Bridgwater* (1974) ont mené une étude numérique pour différents arrangements de l'empilement de grosses sphères (cubique, aléatoire, hexagonal compact et cubique à faces centrées). En faisant ainsi varier la compacité entre 0.52 et 0.74, ils ont montré que la dispersion radiale des particules augmente sensiblement quand la compacité diminue. D'un point de vue théorique, *Wilkinson et Edwards* (1982) ont réalisé une approche basée sur l'analyse de mouvements brownien (*Einstein*, 1922). A l'aide de modèle microstructuraux bidimensionnels détaillant l'interaction des particules percolantes avec l'empilement de sphères plus larges, ils ont déterminé l'influence du coefficient de restitution e. Ainsi, pour des collisions presque élastiques, la vitesse moyenne de percolation adimensionnée dépend du coefficient de restitution suivant la relation :

$$\frac{\langle V\rangle}{\sqrt{2gD}} \propto (1-e)^{1/4} \tag{1.42}$$

où $\langle V\rangle$ est la vitesse moyenne de la bille en écoulement et où g est l'accélération gravitationnelle. Les prédictions de *Wilkinson et Edwards* (1982) sont raisonnablement en accord avec les résultats expérimentaux de Bridgwater et al (*Bridgwater et al.*, 1969; *Bridgwater et Ingram*, 1971) pour les grandes valeurs de D/d. L'analyse quasi-élastique de Wilkinson et Edwards prédit que les nombres de Péclet dans la direction de l'écoulement et perpendiculairement à celle-ci sont égaux et sont tels que :

$$\text{Pe}_l = \text{Pe}_r \propto (1-e)^{1/2} \tag{1.43}$$

Une autre étude expérimentale de la percolation spontanée d'une particule à travers un empilement de sphères plus larges a été menée par Samson et Ippolito (*Samson*, 1997; *Ippolito et al.*, 2000). Contrairement aux expériences de Bridgwater et al, qui s'étaient essentiellement intéressés à caractériser l'influence du coefficient de restitution, ils ont souhaité étudier l'influence de la hauteur H de l'empilement ainsi que celle du rapport de taille D/d. *Ippolito et al.* (2000) ont montré, en mesurant le temps de transit d'une particule pour différentes hauteurs de l'empilement (voir figure 1.25), que la particule descendait

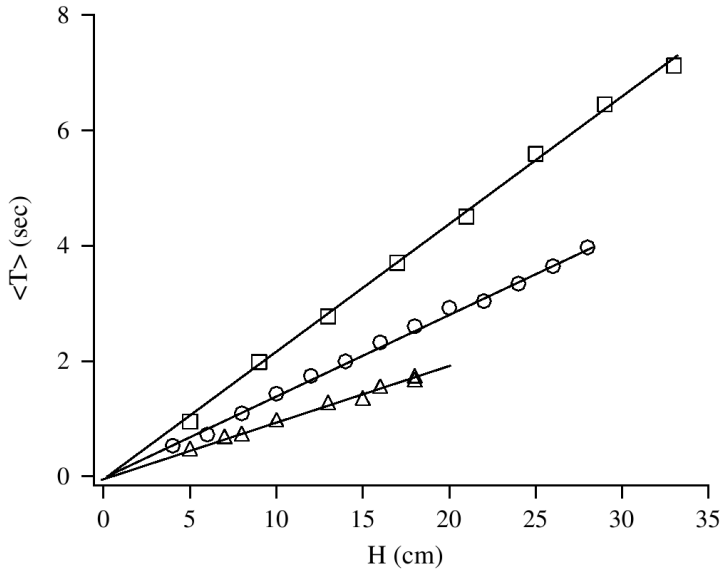


Figure 1.25: *Variation du temps moyen de transit* $\langle T \rangle$ *en fonction de la hauteur de l'empilement* H *pour des particules percolantes de diamètre* $d = 0{,}7$ mm *dans un empilement aléatoire de sphères de diamètre* $(\square) D = 6$ mm, $(\bigcirc) D = 10$ mm *et* $(\triangle) D = 16$ mm. *Figure extraite de Ippolito et al. (2000).*

dans l'empilement avec une vitesse moyenne de percolation constante. Ce résultat avait également été observé numériquement par *Masliyah et Bridgwater* (1974). *Ippolito et al.* (2000) ont confirmé le caractère diffusif de la dispersion radiale des billes à la sortie de l'empilement de grosses sphères. En déterminant l'écart quadratique moyen $\langle R^2 \rangle$, ils ont montré que cette dispersion semble indépendante de la taille de la particule percolante (figure 1.26(a)) et qu'elle est principalement déterminée par le diamètre D des sphères constituant l'empilement (voir figure 1.26(b)). Par analogie avec la dispersion de traceur dans les milieux poreux (*Bear*, 1972), ils ont défini la dispersivité comme des longueurs caractéristiques $\alpha_\perp = D_\perp / \langle V \rangle$ et $\alpha_{//} = D_{//} / \langle V \rangle$ dans chacune des directions de l'écoulement. Ils ont alors montré que $\alpha_{//}$ variait linéairement avec D ce qui selon les auteurs s'explique par un modèle de marche au hasard avec un pas de longueur D. En mesurant la dispersion des temps de transit pour différentes hauteurs, les auteurs ont montré que le processus était diffusif dans la direction de l'écoulement. Ils ont alors montré que la dispersivité $\alpha_{//}$, dans la direction de l'écoulement, dépend essentiellement du diamètre D des grosses sphères. Autrement dit, la taille des particules percolantes n'a que peu d'influence sur la dispersion longitudinale excepté pour les grandes valeurs de D, ce qui correspond à un rapport de taille $D/d = 16$, ce qui sera le cas dans nos expériences.

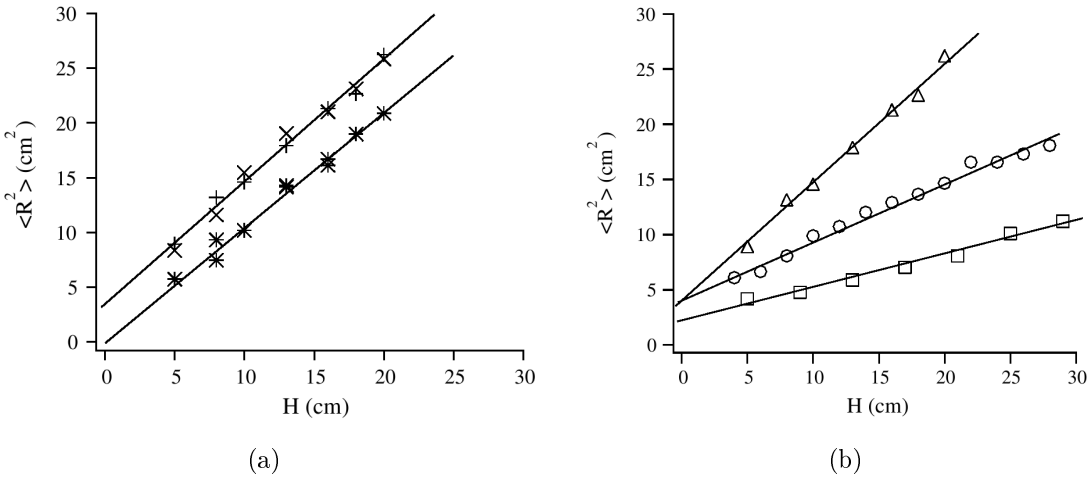


Figure 1.26: *Résultats expérimentaux d'après Ippolito et al. (2000). (a) Évolution de la variance des positions dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction de la hauteur H pour $D = 16$ mm et $(+)d = 0{,}7$ mm, $(\times)d = 1$ mm et $(*)d = 2$ mm. (b) Influence de la taille des particules constituant le milieu poreux. $\langle R^2 \rangle$ en fonction de H pour $(\square)D = 6$ mm, $(\bigcirc)D = 10$ mm et $(\triangle)D = 16$ mm.*

Diffusion sur une planche de Galton et à l'intérieur d'un réseau d'obstacles 3D.

Plus récemment, Bruno et al (*Bruno et al.*, 2001, 2003) ont étudié la dispersion de disques sur une planche de Galton. En plus d'étudier le lâcher d'une particule dans le réseau d'obstacles, ils se sont également intéressés à des lâchers de cluster de particules. Ces clusters étaient constitués au plus de 150 particules. Il a été montré qu'après un petit nombre de collisions, les particules atteignent un régime stationnaire. Les auteurs ont montré que, lors de lâchers de particules les unes après les autres, la vitesse moyenne d'écoulement sur la planche de Galton dépend du diamètre effectif d_{eff} des disques, défini comme le rapport entre le diamètre des disques et le parcours moyen entre deux obstacles du réseau. A l'inverse, ils ont montré que cette vitesse ne dépend pas de d_{eff} lorsque plusieurs particules transitent en même temps. L'influence des effets collectifs intervient également lorsque l'on considère la diffusion des particules. En effet, les auteurs ont mis en évidence l'existence d'un régime transitoire situé dans la partie haute de la planche de Galton mais ils ont également constaté que le régime diffusif était atteint plus rapidement pour un cluster de particules en écoulement que pour une particule isolée. Ce résultat s'explique par le fait que la probabilité de collision d'une particule se trouvant dans un cluster de particules est plus grande que celle d'une particule isolée. Une particule isolée aura donc besoin de plus de temps pour atteindre un régime diffusif.

Ces études ont mis en évidence quelques similitudes avec les écoulements de fluide dans les milieux poreux. Néanmoins elles montrent également la complexité du phénomène de percolation spontanée. Ces études ont montré l'existence d'un régime stationnaire avec

une vitesse moyenne de percolation constante lorsque l'on faisait transiter une particule au sein d'un empilement de sphères plus grosses. Elles ont également montré que cet état stationnaire restait observable lorsque le nombre de particules, transitant simultanément, était de l'ordre de quelques dizaines. Mais qu'en est-il lorsque le nombre de particules est plus important et que des phénomènes d'encombrement peuvent intervenir ? Ces études antérieures ont également mis en évidence la dépendance du temps de transit d'une particule avec l'élasticité des collisions entre cette particule et le milieu poreux. Cependant, lorsque plusieurs particules transitent en même temps, ce comportement est-il observé ? Comment les collisions inter-particules modifient-elles les propriétés de l'écoulement par rapport au cas de l'écoulement d'une seule particule ? Les éventuels effets collectifs résultant de la présence d'une grande quantité de particule modifieraient-ils les comportements diffusifs observés précédemment ? Pour répondre à ces questions, une étude avec un plus grand nombre de particules était nécessaire. Nous nous sommes intéressés durant ce travail de thèse à la caractérisation des propriétés de l'écoulement d'un grand nombre de particules à travers un empilement de sphères plus grosses. Pour réaliser une telle étude, nous avons mis au point un dispositif expérimental permettant d'étudier l'influence du nombre de particules injectées dans le milieu poreux ainsi que l'influence du type de matériau et du rapport de taille entre les billes constituant le milieu poreux et les particules en écoulement. Grâce à la modélisation numérique, nous allons reprendre et compléter l'étude expérimentale pour caractériser de manière la plus complète possible le phénomène de percolation spontanée d'un grand nombre de particules.

Chapitre 2

Étude expérimentale

2.1 Introduction

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à l'écoulement de petites particules à travers un empilement de sphères plus larges. Nous avons vu au chapitre précédent qu'il était nécessaire de réaliser une injection la plus ponctuelle possible afin de pouvoir utiliser les modèles de diffusion de fluide, cependant la réalisation de ces contraintes appliquées aux transports de grains n'est pas aussi simple. Dans ce chapitre, nous allons tout d'abord présenter le dispositif expérimental mis au point au cours de cette thèse et nous permettant de réaliser l'étude de la percolation spontanée de grains à travers un milieu poreux. Nous verrons ensuite les conditions expérimentales dans lesquelles cette étude à été réalisée, puis nous présenterons l'ensemble de nos résultats expérimentaux.

2.2 Dispositif expérimental

2.2.1 Présentation

Notre dispositif expérimental, dont une vue schématique est présentée sur la figure 2.1, est constitué d'un empilement de billes monodisperses de diamètre D contenues dans une boîte parallélépipédique constituée de plexiglas et de PVC. Les dimensions de cette boîte sont de 26 cm $\times$ 26 cm $\times$ 51 cm. L'empilement, réalisé par un simple dépôt sous gravité, constitue un milieu poreux reproductible avec une porosité proche de 0,4 (*Philippe*, 2002). Un second empilement, constitué de petites billes de diamètres d, est placé dans un réservoir cubique surplombant le milieu poreux. Ce réservoir, muni d'une trappe à ouverture verticale, permet un lâcher quasi-instantané des particules. La figure 2.2 montre trois schémas représentant ce distributeur de billes sous différents angles de vue. Il est possible de modifier (voir figure 2.1) la hauteur de lâcher des particules en ajustant le réglage du bras de fixation du réservoir. Pour garantir que les conditions de largage de notre empilement de particules sont similaires quel que soit le nombre de particules, il est indispensable de pouvoir contrôler le volume du réservoir. Pour cela, il est possible de placer à l'intérieur de

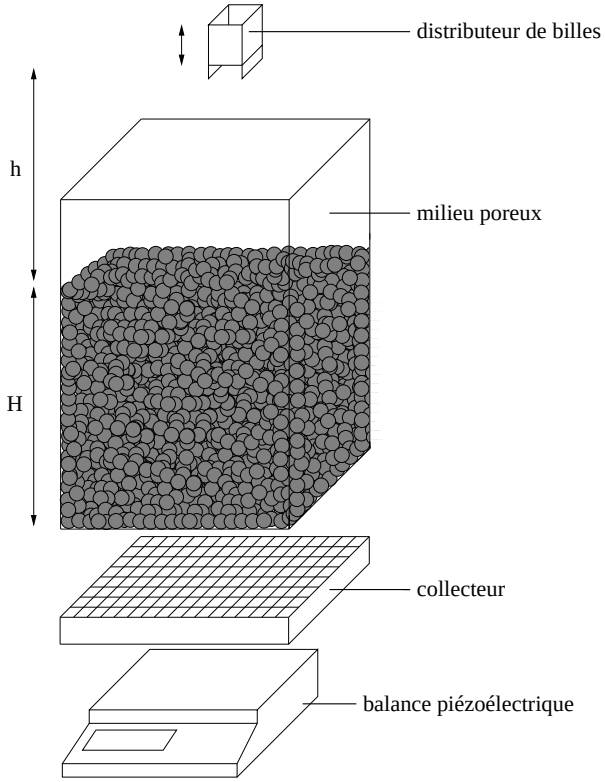


Figure 2.1: *Schéma du montage expérimental.*

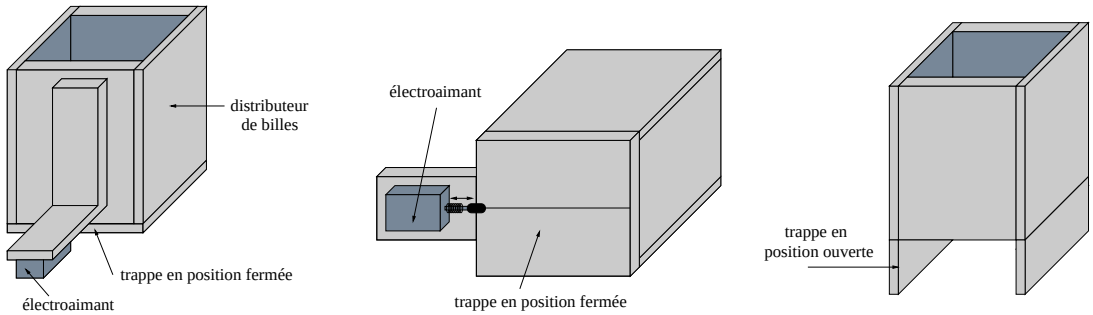


Figure 2.2: *Schémas du dispositif de largage. Celui-ci est constitué d'une boîte en téflon munie d'une trappe constituée de deux portes. Ces portes sont maintenues fermées par le biais d'un électroaimant commandé par l'ordinateur. (a) Vue de côté, (b) vue de dessous (c) vue de côté lorsque la trappe est en position ouverte.*

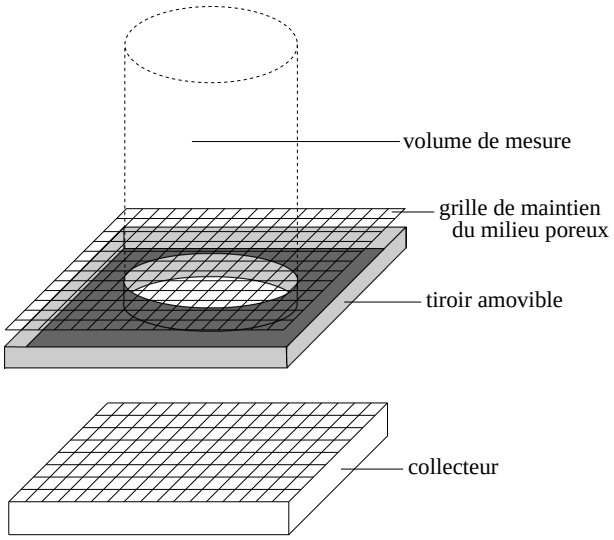


Figure 2.3: *Schéma du tiroir amovible qui délimite la zone de mesure.*

ce dernier des cubes concentriques. Ainsi, le lâcher est le plus ponctuel possible quel que soit le nombre de particules que l'on désire injecter dans le milieu. L'empilement de grosses sphères repose sur une grille d'acier solidaire du bâti du dispositif expérimental. Afin de s'assurer qu'aucune particule prise en compte dans nos mesures n'a auparavant atteint les parois de la boîte en plexiglas, nous limitons la hauteur H du milieu poreux à une valeur de l'ordre de 20 cm. Néanmoins pour s'assurer que la condition précédente est pleinement remplie, nous restreignons notre volume de mesure au sein de l'empilement à un cylindre de diamètre 20 cm. Ceci est réalisé par l'utilisation d'un tiroir amovible, présenté sur la figure 2.3 muni en son centre d'un orifice circulaire de diamètre 20 cm. Ainsi les particules qui, malgré notre précaution sur la hauteur H, atteignent les parois restent immobilisées dans le tiroir.

La partie détection du dispositif expérimental est constituée d'une balance piézoélectrique couplée à un amplificateur, le tout relié à un ordinateur via une carte d'acquisition. L'ouverture de la trappe du réservoir de particules est pilotée par l'ordinateur et déclenche l'enregistrement du signal émis par la balance. Il est important de noter que nous nous s'affranchissons du temps de réponse de la balance en recueillant directement, après un filtrage préalable, le signal émis par le piézoélectrique. Pour collecter les particules à la sortie du milieu poreux, on place sur la balance une boîte dont le fond est garni d'un matelas de mousse permettant d'éviter les rebonds pouvant perturber la mesure. Pour conserver l'efficacité de ce système d'amortissement, notre boîte collectrice doit être vidée entre chaque expérience. Ce dispositif nous donne donc accès à l'évolution temporelle du nombre de billes à la sortie de l'empilement. Comme nous allons le voir par la suite, ceci nous permet de remonter à la mesure du temps moyen de résidence des particules au sein de la structure poreuse.

Pour pouvoir accéder aux positions des particules à la sortie de l'empilement de grosses sphères, nous disposons également d'un réceptacle compartimenté. Celui-ci est formé par

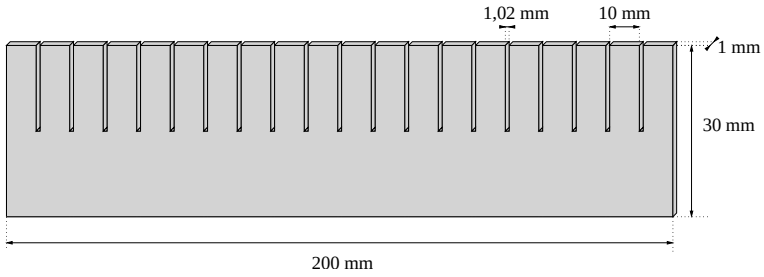


Figure 2.4: *Vue schématique d'une lamelle.*

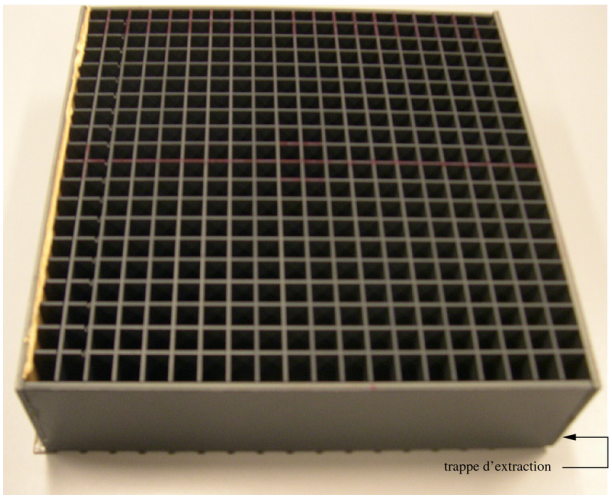


Figure 2.5: *Photographie du réceptacle compartimenté.*

l'entrecroisement de quarante lamelles identiques à celle représentée sur la figure 2.4. Avec un tel dispositif, on obtient ainsi un réceptacle (voir figure 2.5) de quatre cents cases de dimensions 10 mm par 10 mm. En pesant la masse de billes contenue dans chacune des cases, on remonte aisément au nombre de billes dans chacune des cases. Ceci est rendu possible par la présence d'une trappe d'extraction située sous le réceptacle.

2.2.2 Conditions de largage des particules

Pour garantir la reproductibilité des mesures, un grand soin a été apporté à la mise en place du système de lâcher des particules. Comme nous l'avons dit précédemment, l'ouverture de la trappe du distributeur de billes déclenche l'enregistrement du signal émis par la balance piézoélectrique. Cependant, pour s'assurer que les portes de la trappe s'ouvrent rapidement, et cela quelle que soit la masse de billes contenue dans le distributeur, les portes de la trappe sont écartées latéralement dès le déclenchement de l'électroaimant par un système de deux lamelles de métal déformées qui en reprenant leur forme d'origine repoussent les portes de la trappe sur les côtés. Pour garantir la symétrie des conditions de largage, nous avons rajouté deux fausses portes sur le distributeur de billes. Ceci est

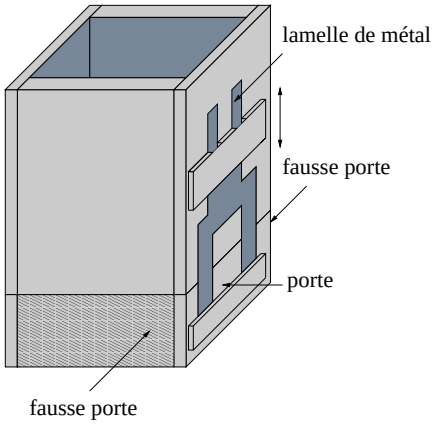


Figure 2.6: *Schéma du distributeur de billes muni des lamelles permettant l'écartement rapide des portes. Nous avons également représenté les fausses portes permettant de garantir la symétrie du lâcher.*

illustré sur la figure 2.6. Nous avons au préalable étudié l'influence de la hauteur de largage h du paquet de particules au-dessus du milieu poreux. La figure 2.7 montre l'évolution du

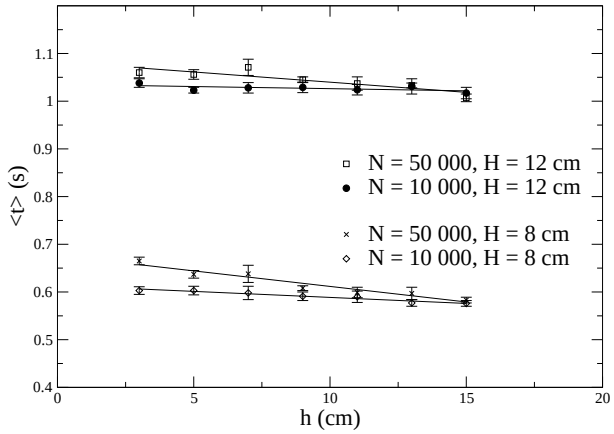


Figure 2.7: *Évolution du temps moyen de transit en fonction de la hauteur h, pour deux hauteurs H de l'empilement de grosses sphères.*

temps moyen de transit à l'intérieur du milieu poreux en fonction de la hauteur h et ce pour deux hauteurs H de l'empilement de grosses sphères. Nous pouvons remarquer que plus la hauteur h est grande, plus le temps moyen de transit diminue. Cette constatation est valable quel que soit le nombre de particules et la hauteur de l'empilement de grosses sphères. Plus les particules sont lâchées de haut et plus leur vitesse de pénétration dans le milieu poreux est grande. Nous constatons aussi qu'à une hauteur H fixée, et pour de faibles valeurs de h, le temps moyen de transit diffère suivant le nombre de particules N. Celui-ci est plus élevé pour $N = 50\,000$ que pour $N = 10\,000$. Cette variation du temps moyen de

transit avec le nombre de particule disparaît au fur et à mesure que la hauteur h de lâcher augmente. Plus le paquet de particules est lâché de haut et plus il se disperse par rebond sur la surface du milieu poreux. Ceci explique pourquoi les courbes, présentant l'évolution du temps moyen de transit avec h pour $N = 50\,000$, rejoignent celles présentant cette même évolution pour $N = 10\,000$ lorsque la valeur de h est grande. À la vue de ces résultats, nous avons choisi de placer le distributeur de billes au plus près de la surface du milieu poreux. Pour cela, la hauteur h à été prise à une valeur $h = 2{,}6$ cm correspondant à la dimension des portes de la trappe. Cette hauteur est restée fixe dans toutes nos expériences.

2.3 Conditions expérimentales

Notre expérience consiste à laisser transiter sous le simple effet de la gravité, des particules de diamètres d dans un empilement de sphères de diamètres plus grands D. Il est évident que pour que l'écoulement, au sein des grosses sphères, de ces petites particules soit possible, le diamètre de ces dernières doit être suffisamment petit par rapport aux cavités existantes dans l'empilement de grosses sphères. Pour nous affranchir d'éventuels effets de piégeages, nous avons choisi de travailler toujours au-dessus du seuil de capture défini par l'équation (1.9). Néanmoins, l'aspect géométrique n'est pas le seul effet pouvant entraîner un piégeage des particules. En effet, l'humidité de l'air peut également entraîner la formation de ponts capillaires favorisant ainsi l'adsorption des particules sur la surface des grosses sphères. C'est pourquoi, pour contrôler la formation de ces ponts capillaires et d'assurer ainsi la reproductibilité de nos mesures, nous travaillons à taux d'humidité constant de 40%.
Dans la plupart de nos expériences, nous avons utilisé un milieu poreux formé de billes de verre de diamètre 16 mm et des particules d'acier de diamètre 1 mm. Nous admettrons donc dans la suite, que toutes les expériences ont été réalisées dans ces conditions, sauf quand nous le mentionnerons explicitement.

2.4 Détermination d'un temps moyen de résidence

Dans un premier temps, nous avons souhaité déterminer un temps moyen de résidence des particules au sein du milieu poreux. Ce temps moyen de résidence, ou temps moyen de transit, sera dans la suite noté $\langle t \rangle$. Pour pouvoir déterminer ce temps, la solution idéale serait de pouvoir identifier de façon unique chacune des particules pour pouvoir ainsi mesurer individuellement leur temps de transit. Comme les particules percolantes sont indiscernables les unes des autres, cette méthode n'est pas envisageable. La seule manière d'obtenir une information sur les temps de résidence des particules au sein de l'empilement de sphères plus grosses est de considérer la distribution de ces temps de transit, ou plus exactement son intégrale temporelle. En effet, le signal recueilli via la balance piézoélectrique, dont un exemple est donné sur la figure 2.8, traduit l'évolution de la masse de billes récupérées à la sortie du milieu poreux en fonction du temps. Ce signal équivaut donc à l'intégrale par rapport au temps de la distribution des temps de transit des particules. Cette dernière pouvant être obtenue par différentiation du signal. La figure 2.9 montre un exemple de distribution des temps de séjours. À partir de cette distribution, il est possible de déterminer

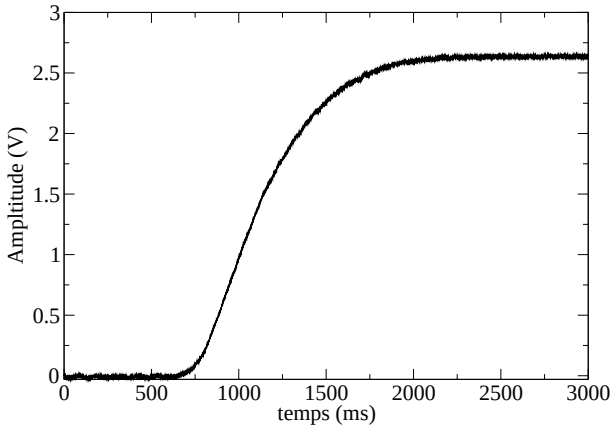


Figure 2.8: *Exemple de signal recueilli sur la balance piézoélectrique. Le signal est pris directement sur le matériau piézoélectrique et est filtré par un filtre passe bas réglé à* 2 kHz. *On s'affranchit ainsi du temps de réaction de la balance.*

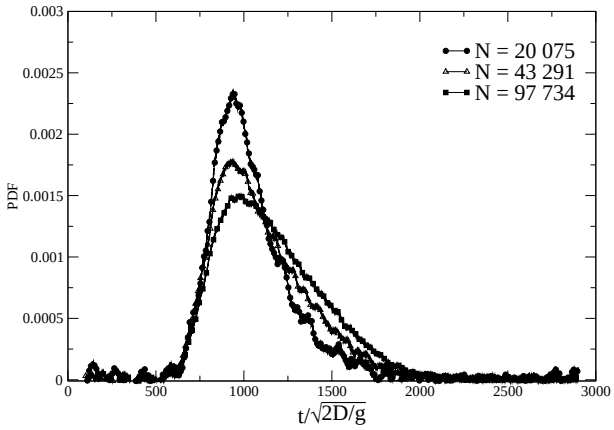


Figure 2.9: *Exemple de distribution des temps de transit à la sortie d'un milieu poreux de hauteur* $H = 16$ cm, *pour des lâchers de* $N = 20\,075$, $N = 43\,291$ *et* $N = 97\,734$ *particules avec un rapport de taille de* $D/d = 16$.

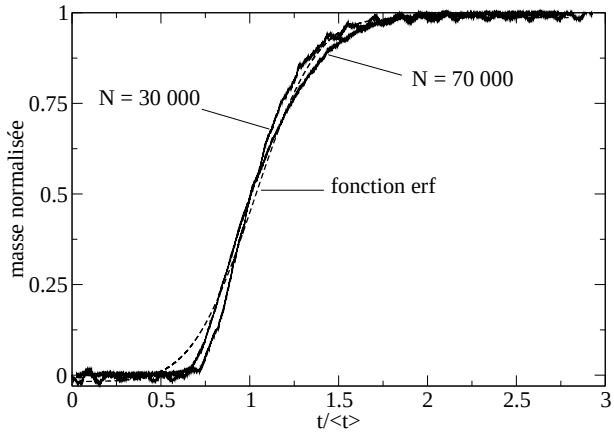


Figure 2.10: *Exemples de données expérimentales normalisées. Un ajustement avec la loi (2.1) est également représenté.*

le temps moyen de transit $\langle t \rangle$ par une simple moyenne pondérée des différents temps de séjour. Cependant, bien que cette méthode demeure acceptable pour une détermination du temps moyen de résidence des particules au sein du milieu poreux, il peut être intéressant de déterminer une loi de comportement permettant un ajustement de la courbe donnée sur la figure 2.8.
En se basant sur les résultats de *Bridgwater et Ingram* (1971) présentés précédemment au paragraphe 1.6. Nous avons essayé d'ajuster les courbes d'élutriation par la loi

$$C_e(t) = \frac{1}{2}\left(1 + \text{erf}\left(\frac{V\left(t - \langle t \rangle\right)}{2\sqrt{D_{//}\,\langle t \rangle}}\right)\right) \tag{2.1}$$

similaire à la loi (1.39). La figure 2.10 montre un exemple typique de l'évolution de la masse cumulée avec le temps, obtenue après renormalisation. Cette figure montre aussi la différence avec le meilleur ajustement obtenu avec la loi (2.1). Il est clair que l'équation (2.1), solution de l'équation de diffusion n'est pas adaptée pour décrire dans notre cas le phénomène de transport de particules à travers un milieu poreux. Contrairement au cas de *Bridgwater et Ingram* (1971), nous avons plusieurs particules qui s'écoulent en même temps au sein de la structure. Dans ce cas, l'inertie de l'écoulement de l'ensemble des particules doit être prise en compte. On peut alors penser que la présence de plusieurs particules au sein du milieu poreux induit un phénomène de retard par rapport au cas de l'écoulement d'une seule particule. Ainsi, on peut également essayer d'ajuster les courbes d'élutriation en donnant plus de poids lors de l'ajustement aux faibles valeurs des temps de transit. Un exemple de ce genre d'ajustement est présenté sur la figure 2.11.
La figure 2.11 traduit que plus le nombre de particules s'écoulant dans le milieu poreux est important et plus le comportement s'éloigne d'un cas de diffusion pure. Les résultats de *Bridgwater et Ingram* (1971) ne sont donc pas applicables ici. La présence de plusieurs particules dans le milieu poreux doit nous amener à prendre également en compte un terme convectif dans la loi pouvant gouverner le phénomène. Comme nous l'avons dit précédemment, en faisant une analogie avec l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux, nous

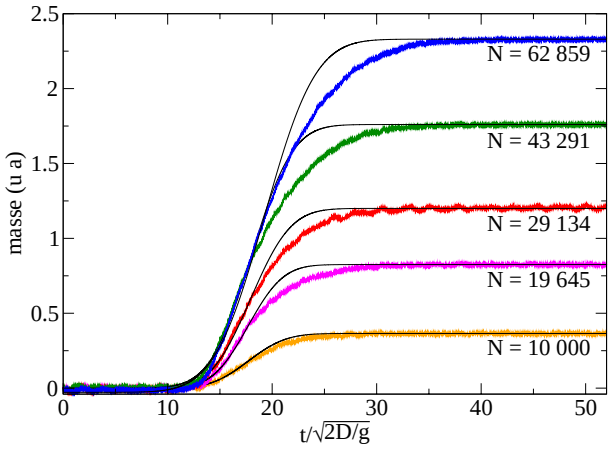


Figure 2.11: *Exemples de données expérimentales. Des ajustements avec une loi de type (2.1) en donnant plus de poids aux faibles valeurs des temps de résidence sont également représentés.*

pouvons utiliser une loi de convection diffusion telle que la loi (1.16) pour modéliser l'écoulement de particules à travers un milieu poreux. L'injection des particules au sein du milieu poreux peut être considérée comme instantanée. En effet, même si les particules mettent un certain temps pour passer le premier pore en raison d'un phénomène d'encombrement ou de rebonds de fortes amplitudes sur le haut du milieu poreux, ce temps de pénétration reste petit par rapport au temps moyen que mettent les particules pour atteindre le bas de l'empilement de grosses sphères. Dans un premier temps, si on néglige tous phénomènes d'adsorption des particules sur le milieu poreux, on peut essayer d'ajuster les courbes d'élutriation par la loi (1.23), solution de l'équation de convection diffusion pour une injection continue de traceur à l'entrée du milieu poreux, et correspondant à l'intégrale dans le temps de la solution pour l'injection de traceurs sous forme d'une impulsion de durée infinitésimale. La figure 2.12 représente un ajustement de deux courbes d'élutriation avec la loi :

$$C_e(x,t) = \frac{C_0}{2}\left[\exp\left(\frac{xV}{D_{//}}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x+Vt}{\sqrt{4D_{//}t}}\right)\right] \tag{2.2}$$

On constate, en comparant la figure 2.12 à la figure 2.10, que la loi (2.2) reproduit mieux l'évolution temporelle du nombre de billes collectées à la sortie. Cependant, on remarque que la loi (2.2) ne reproduit pas correctement la partie basse de la courbe d'élutriation. Nous avons essayé d'améliorer l'ajustement en incorporant dans notre modèle les divers termes de retard inclus dans l'équation (1.21). Pour cela, nous avons essayé d'ajuster les courbes d'élutriation avec les lois (1.31) et (1.33) mais les ajustements obtenus ne sont pas plus satisfaisant que ceux obtenus par l'utilisation de la loi (2.2). L'équation (2.2) permet néanmoins de décrire convenablement l'allure générale des courbes d'élutriation. Elle permet en faisant intervenir le paramètre H de déterminer une vitesse moyenne de percolation et le coefficient de dispersion dans la direction longitudinale $D_{//}$. Aux incertitudes de mesures près, les vitesses moyennes d'écoulement sont égales aux vitesses que l'on peut

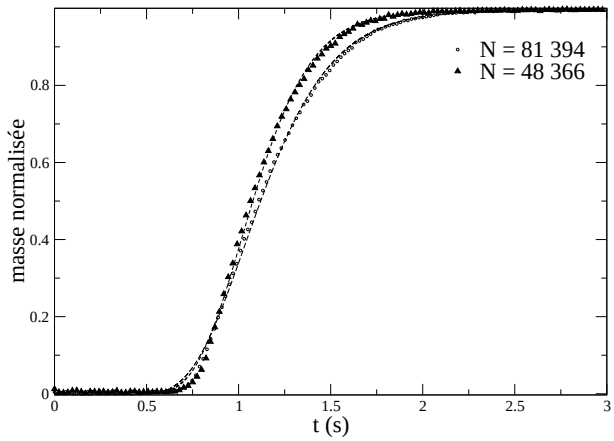


Figure 2.12: *Ajustement de courbes d'élutriation avec la loi (2.2) pour* $N = 48366$ *et* $N = 81394$.

calculer par le rapport $H/\langle t\rangle$. De même, les coefficients de dispersion dans la direction de l'écoulement sont du même ordre de grandeur que ceux trouvés dans les études précédentes (*Samson*, 1997). Il est alors également possible par cette méthode de déterminer un temps moyen de résidence à partir de la vitesse moyenne de percolation. Ceux-ci sont reliés à la hauteur H de l'empilement par $\langle t\rangle = H/\langle V\rangle$.
Dans tous les cas et quelle que soit la méthode utilisée pour déterminer le temps moyen de transit d'un paquet de particules à travers un empilement de sphères plus grosses, les fluctuations de $\langle t\rangle$ entre les différentes techniques de mesures sont comprises dans les incertitudes expérimentales. Comme nous avons réalisé nos expériences un grand nombre de fois afin d'obtenir une bonne statistique sur nos mesures, nous pouvons utiliser l'une ou l'autre de ces méthodes sans influence sur les résultats que nous allons présenter dans la suite.

2.5 Existence d'un régime stationnaire

Avec ce dispositif, nous avons voulu déterminer le temps moyen de transit pour différentes hauteurs H du milieu poreux. Pour s'affranchir des fluctuations sur la valeur moyenne du temps de transit et de l'incertitude sur la détermination de la hauteur de l'empilement, plusieurs mesures ont dû être réalisées. La figure 2.13 montre les résultats obtenus. On remarque que le temps moyen de transit $\langle t\rangle$ est proportionnel à la hauteur de l'empilement. En réalité, ceci est vrai si la taille de l'empilement est suffisamment grande pour minimiser l'influence d'un régime de transition qui apparaît dans la partie haute de l'empilement. Cet état stationnaire apparaît au-dessus d'une hauteur seuil, de l'ordre de quelques tailles de grains, au-dessous de laquelle aucun équilibre de la température granulaire ne peut être atteint. La figure 2.13 montre également la dispersion des temps moyens de transit obtenu pour une série d'expériences avec $N = 10\,000$ et $N = 70\,000$ pour une valeur de $H/D = 1{,}5$. On constate que le temps moyen de transit varie beaucoup d'une expérience à l'autre.

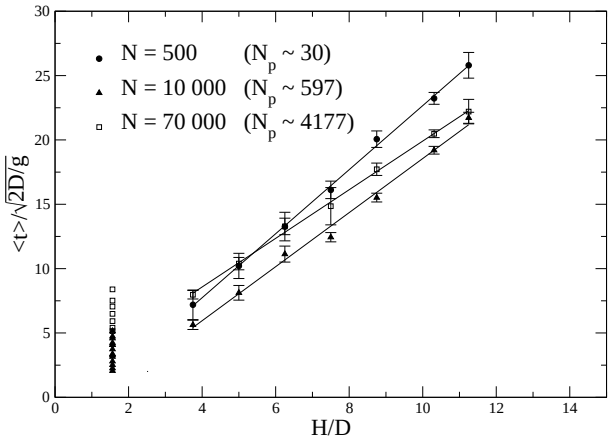


Figure 2.13: *Évolution du temps moyen de transit en fonction de la hauteur H du milieu poreux, pour des particules d'acier de diamètre $d = 1$ mm et des sphères de verre telles que $D = 16$ mm. Trois séries de valeurs correspondant à des valeurs de N_p différentes sont représentées. Nous avons également représenté les temps moyens de transit mesurés pour $H/D = 1{,}5$. La grande dispersion des valeurs mesurées traduit la non-reproductibilité de l'expérience pour les faibles valeurs de H/D.*

Cette non-reproductibilité de l'expérience s'explique par les importantes fluctuations de temps que l'on peut observer entre l'entrée et la sortie du milieu poreux. En effet, selon la présence ou non d'un pore sous la trappe d'ouverture, une différence de distance de l'ordre du diamètre d'une grosse sphère peut avoir lieu. Les particules peuvent également rebondir sur la surface du milieu poreux et mettre un certain temps avant d'entrer dans ce dernier. En raison des considérations précédentes, il n'est pas possible d'extrapoler les courbes de la figure 2.13 en zéro.
La figure 2.13 nous montre également que la vitesse moyenne de percolation atteinte dans le régime stationnaire dépend du nombre de particules. C'est pourquoi, nous avons entrepris une étude de l'influence du nombre de particules sur le temps moyen de transit et nous allons maintenant vous en présenter les résultats.

2.6 Influence du nombre de particules sur le temps moyen de transit

Nous avons fait une série d'expériences pour étudier l'influence du nombre de particules sur le temps moyen de transit $\langle t \rangle$. Il est évident que si une seule particule transite à travers la structure poreuse, celle-ci peut explorer entièrement l'espace libre sans aucune perturbation. Cependant, ceci n'est plus vrai si plusieurs particules transitent en même temps. Dans ce cas, les particules peuvent interagir entre elles. Si nous sommes près du seuil de capture, défini précédemment (voir la loi (1.9)), seulement une ou deux particules peuvent passer ensemble à travers le même pore. Si plusieurs particules transitent en même

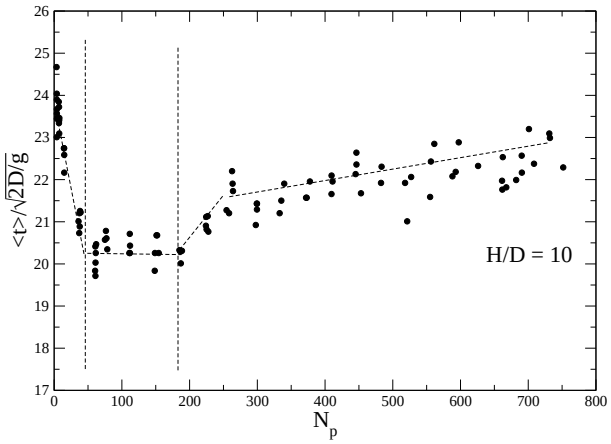


Figure 2.14: *Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules, pour une hauteur $H = 16$ cm.*

temps dans le milieu poreux, elles doivent passer les unes après les autres. D'un autre coté, si nous travaillons loin de ce seuil, plusieurs sphères peuvent passer simultanément à travers le même pore. Le temps moyen de résidence dépend plutôt du volume $N_p V_p$ occupé par le paquet de particules en écoulement que simplement du rapport de taille D/d. Le temps moyen de transit dépend donc directement du nombre de particules. La figure 2.14 représente l'évolution du temps moyen de transit en fonction de N_p pour une hauteur $H = 10D$. A titre de référence, l'annexe C présente un tableau d'équivalence entre le nombre de particules et le paramètre N_p dans ces conditions expérimentales. Comme mentionné précédemment, il est raisonnable de penser que la vitesse moyenne de percolation va diminuer avec le nombre de particules en raison de l'augmentation de l'encombrement des pores. En d'autres termes, le temps moyen de transit devrait croître avec N_p, à cause de la difficulté éprouvée par les particules pour trouver des pores accessibles. Néanmoins la figure 2.14 montre que le phénomène est plus complexe et que nous pouvons définir principalement trois régimes d'écoulement. Dans cette étude, nous avons deux phénomènes qui régissent la percolation spontanée sous gravité : un rebond important d'une particule sur les sphères constituant le milieu poreux (ceci en raison d'un coefficient de restitution important), ainsi qu'une décroissance rapide de la vitesse des particules due au fait que ces dernières entrent en collision les unes avec les autres ainsi qu'avec celles constituant le milieu poreux. Dans le premier régime, de $N_p = 1$ jusqu'a approximativement $N_p = 50$, le temps moyen de transit décroît quand le nombre de particule augmente. Au fur et à mesure que N_p croît, les particules perdent de plus en plus d'énergie par collisions avec leurs voisines. Ceci implique que pour $N_p \approx 50$ elles tombent presque directement dans les pores sous-jacents sans rebondir autour. Quand le nombre de particules augmente encore plus, un équilibre entre la chute directe des billes et les collisions entre particules est atteint. Il peut être observé dans un second régime de $N_p \approx 50$ à $N_p \approx 200$. Dans ce régime d'écoulement sous gravité, la vitesse moyenne de percolation est quasi indépendante de N_p, et donc indépendante de N. Si l'on augmente encore le nombre de particules, on observe un troisième régime dans lequel le temps moyen de résidence $\langle t \rangle$ augmente avec le

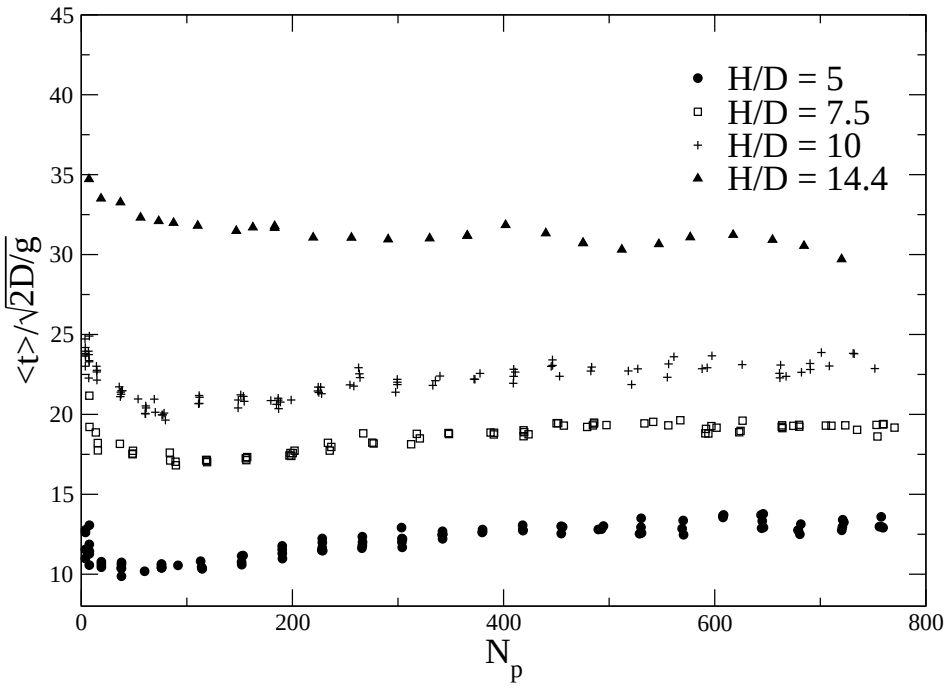


Figure 2.15: *Évolution du temps moyen de résidence avec le paramètre N_p pour différentes hauteurs H.*

paramètre N_p. De manière plus précise, ce régime peut être divisé en deux sous-régimes. Premièrement, de $N_p \approx 200$ à $N_p \approx 250$, l'écoulement ralentit fortement lorsque nous augmentons N_p. Ce comportement traduit la mise en place d'un effet d'embouteillage des pores situés dans la zone d'écoulement. L'effet d'encombrement croît avec N_p et ensuite, pour $N_p > 250$, l'augmentation du temps moyen de transit avec N_p est moins importante en raison de l'accumulation de particules dans les connections entre pores. Pour de telles valeurs de N_p, l'encombrement d'un pore est directement relié à l'encombrement des pores avec lesquels il est connecté, via l'encombrement des chemins préférentiels.
La figure 2.15 présente l'évolution du temps moyen de transit pour quatre hauteurs de milieux poreux. Pour $H/D = 5$, les trois régimes d'écoulement sont également visibles. Le second domaine semble apparaître pour un nombre de particules plus petit que pour $H/D = 10$. Néanmoins pour $H/D = 14{,}4$, l'existence de ces différents régimes n'est pas évidente. On observe en effet que le temps moyen de transit décroît lorsque N_p augmente. On peut alors penser que la hauteur de l'empilement est suffisante pour permettre une forte dispersion du paquet de particules, évitant ainsi les phénomènes d'encombrements.

2.7 Influence de du rapport de taille D/d

Nous avons ensuite voulu étudier l'influence du rapport de taille sur le temps moyen de transit. Bien qu'expérimentalement il soit difficile de faire varier uniquement le paramètre D/d d'une expérience à l'autre en raison de la difficulté à trouver des billes de précision

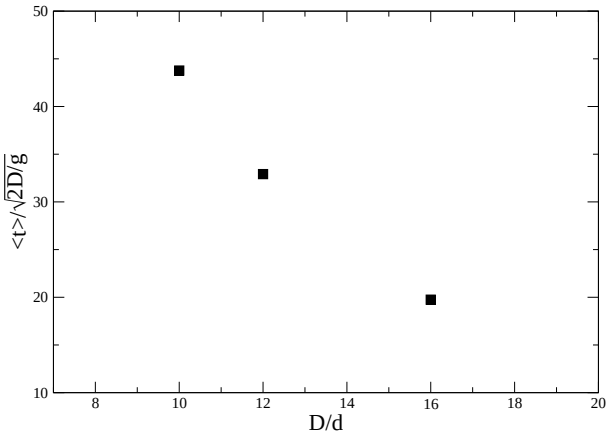


Figure 2.16: *Évolution du temps moyen de transit en fonction du rapport de taille pour un lâcher de $N = 30\,000$ particules d'acier de diamètre $d = 1$ mm au-dessus de plusieurs empilements de billes de verre de diamètres différents.*

de petites tailles et de même composition, nous avons tenu à présenter ces résultats que nous pouvons qualifier de préliminaires. Cependant grâce au recours à la modélisation numérique, nous reviendrons sur ces résultats au chapitre 4. En fixant la taille du milieu poreux à une hauteur $H = 13$ cm, nous avons fait varier le diamètre des billes qui le constituait. Le milieu poreux a donc été fabriqué avec des billes de verre de diamètres $D = 10$ mm puis $D = 12$ mm et enfin $D = 16$ mm. Les particules lâchées au-dessus de ce milieu poreux était quant à elles des billes d'acier de diamètre $d = 1$ mm au nombre de $N = 30\,000$. La figure 2.16 montre l'évolution du temps moyen de transit adimensionné en fonction du rapport de taille D/d. Plus les particules qui s'écoulent dans l'empilement de grosses sphères sont petites et plus le temps moyen de transit diminue. Cette décroissance est liée à la facilité, qu'ont les particules de plus petites tailles, à franchir les pores de l'empilement. Nous avons ensuite réalisé une série d'expériences en faisant varier le nombre N de particules et en utilisant un milieu poreux composé de billes de verre de diamètre $D = 12$ mm. Nous avons fixé la hauteur de ce dernier à la valeur de $H = 8$ cm. Ceci avait pour but de pouvoir tester l'influence du paramètre D par comparaison avec les résultats présentés au paragraphe 2.6. Nous avons donc, comme dans le cas de la figure 2.15, choisi d'utiliser des particules d'acier de diamètres 1 mm. La figure 2.17 montre les résultats obtenus. On observe que, contrairement aux cas représentés sur les figures 2.14 et 2.15, la figure 2.17 ne montre pas de façon évidente la présence de plusieurs régimes d'écoulements. En réalité, et c'est là qu'apparaît clairement le sens de l'adimensionnement par le paramètre N_p, il est plus judicieux de représenter l'évolution du temps moyen de transit en fonction du volume de particules injectées dans le milieu poreux adimensionnée par le plus petit pore du milieu poreux. La figure 2.18 montre l'évolution du temps moyen de résidence des particules au sein de l'empilement en fonction du paramètre N_p. Nous avons également représenté sur cette même figure les résultats de la figure 2.15 obtenus avec $D = 16$ mm. Dans un premier temps, et comme nous l'avons vu précédemment sur la figure 2.16, nous constatons que le temps moyen de résidence des particules augmente lorsque le rapport de

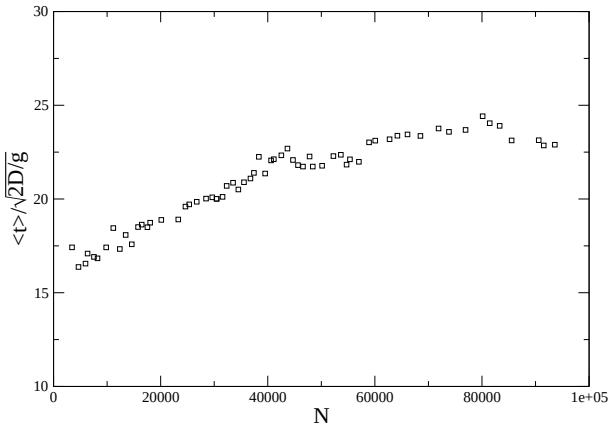


Figure 2.17: *Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules pour des lâchers de particules d'acier de diamètre* 1 mm *et un milieu poreux tel que* $H = 8$ cm *et* $D = 12$ mm.

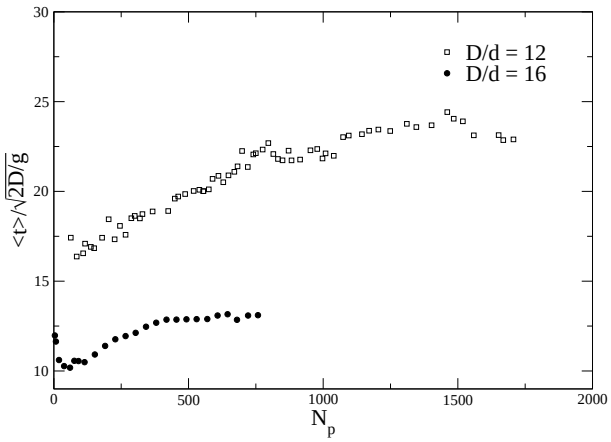


Figure 2.18: *Évolution du temps moyen de transit avec le paramètre* N_p *pour deux rapports de taille* D/d *et pour des lâchers de particules d'acier de diamètre* 1 mm. *Le milieu poreux est tel que* $H = 8$ cm.

taille D/d diminue. Ceci est vérifié quel que soit le nombre de particules. Nous pouvons ensuite remarquer que notre incapacité à distinguer plusieurs régimes d'écoulement lors de l'utilisation d'un rapport de taille $D/d = 12$ peut s'expliquer par la différence de volume de particules injectées relativement à la taille des pores du milieu poreux.

2.8 Étude de la dispersion dans la direction de l'écoulement

Expérimentalement, il n'est pas possible d'accéder à la position des particules à l'intérieur du milieu poreux. Cependant, il est possible grâce au profil d'élutriation recueilli par la balance piézoélectrique d'accéder à une valeur du coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement. Bien que nous ayons montré précédemment que la loi (2.2) ne décrivait pas complètement le profil d'élutriation, il est possible via une telle loi d'accéder à une mesure du coefficient de dispersion, qui sera noté $D^*_{//}$.

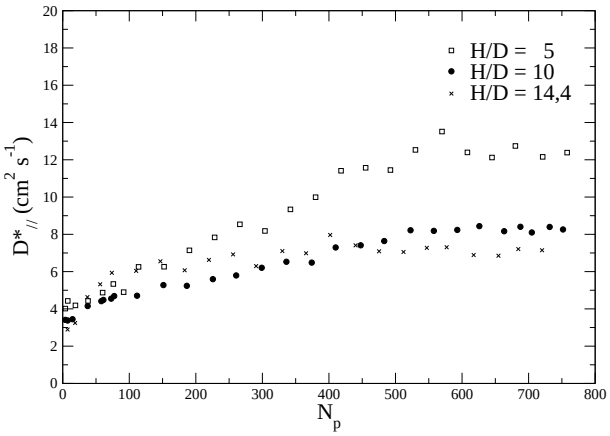


Figure 2.19: *Valeurs des coefficients de dispersion dans la direction de l'écoulement en fonction du paramètre N_p pour différentes hauteurs H.*

La figure 2.19 montre les coefficients de dispersion obtenus par un ajustement avec la loi (2.2) en fonction du paramètre N_p. Nous avons représenté les valeurs obtenues pour des ajustements avec des lâchers de différentes hauteurs. Nous pouvons remarquer que ces valeurs des coefficients de dispersion diffèrent selon la hauteur de lâcher. En effet, on constate sur la figure 2.19 que les valeurs des coefficients de dispersion obtenues pour $H/D = 5$ sont plus grandes que les valeurs de ces mêmes coefficients obtenues pour $H/D = 10$ et $H/D = 14{,}4$. En revanche, les résultats obtenus pour les deux plus grandes valeurs de H/D sont comparables. On peut expliquer ce comportement par la présence d'un régime de transition dont l'influence n'est pas négligeable pour les faibles hauteurs. Ce régime de transition est dû à la phase de rebond des particules sur la surface du milieu poreux et au temps nécessaire pour atteindre un régime diffusif. Quand la hauteur du milieu poreux est grande, la part jouée par ce régime de transition est négligeable sur le régime diffusif. La figure 2.19 montre également que $D^*_{//}$ croît lorsque le paramètre N_p augmente.

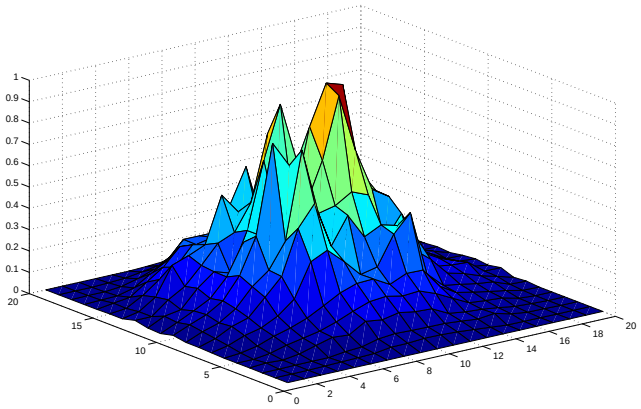


Figure 2.20: *Exemple de distribution spatiale des billes obtenue à la sortie de l'empilement. Cette distribution correspond à un lâcher de* 100 000 *billes d'une hauteur de* 8 cm.

2.9 Étude de la distribution spatiale des billes à la sortie de l'empilement

2.9.1 Principe de la mesure

Pour étudier la distribution spatiale des particules à la sortie de l'empilement, dont un exemple est donné sur la figure 2.20, nous plaçons, sous notre milieu poreux modèle, le réceptacle compartimenté présenté précédemment. En pesant le contenu de chacune des cases, on peut accéder au nombre de billes qui sont sorties à une position donnée dans le plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement. Dans un premier temps, on a pu vérifier que la distribution des billes dans une direction donnée suivait une loi normale. Ceci est par exemple visible sur les figures 2.21 et 2.22. On a également constaté que le milieu poreux était bien isotrope, c'est à dire que les distributions des particules dans les deux directions perpendiculaires à l'écoulement étaient similaires.
Grâce à ce dispositif, nous avons pu déterminer la distribution spatiale des particules à la sortie de l'empilement pour différents nombres N de particules ainsi que différentes hauteurs H de l'empilement. Pour minimiser les fluctuations des grandeurs déterminées, nous avons répété nos expériences un grand nombre de fois en reconstruisant parfois le milieu poreux pour minimiser l'effet d'éventuels chemins préférentiels. Comme nous l'avons vu sur les figures 2.21 et 2.22, on observe à la sortie de l'empilement une distribution gaussienne des particules dans le plan transverse. Il est alors possible de déterminer la variance de ces distributions pour différentes hauteurs et différents nombres de particules. La courbe 2.23 représente la variance $\langle(\Delta R)^2\rangle$ en fonction de la hauteur H du milieu poreux. Lors d'un processus diffusif, la variance $\langle(\Delta R)^2\rangle$ évolue de façon linéaire avec le temps tel que :

$$\left\langle(\Delta R)^2\right\rangle = 4D_{\perp}t \tag{2.3}$$

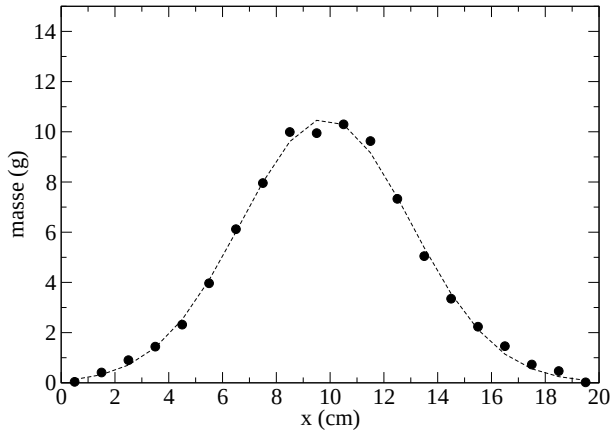


Figure 2.21: *Exemple de distribution spatiale des billes obtenue à la sortie de l'empilement. Un ajustement avec une loi normale est également représenté.*

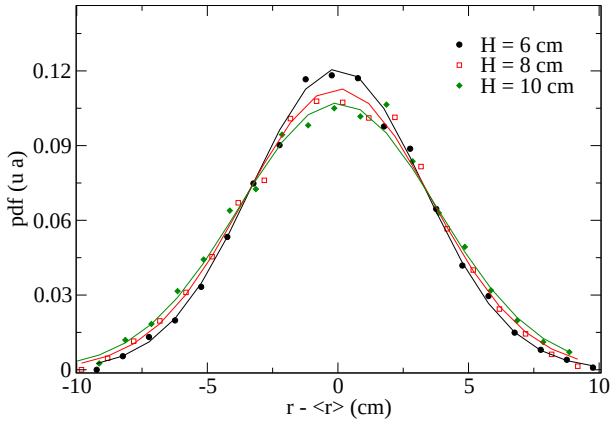


Figure 2.22: *Figure illustrant l'étalement de la distribution des particules à la sortie de l'empilement lorsque la hauteur H varie. Ces distributions correspondent à des lâchers de* 100 000 *particules d'acier de diamètre* 1 mm.

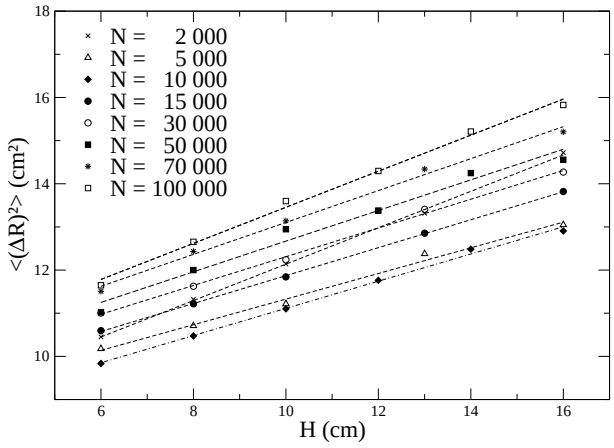


Figure 2.23: *Évolution de* $\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle$ *avec la hauteur* H *de l'empilement. Les billes constituant le milieu poreux sont des billes de verre de diamètre* 16 cm. *Les particules utilisées sont des billes d'acier telles que* $D/d = 16$.

où $D_\perp$ est le coefficient de dispersion hydrodynamique dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Nous avons vu dans la partie 2.5 que le temps moyen de transit était proportionnel à la hauteur de l'empilement. Nous avons donc :

$$\langle t \rangle = \frac{H}{V} \tag{2.4}$$

On peut donc écrire que la variance de la distribution des positions des particules à la sortie de l'empilement s'écrit comme :

$$\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle = 4 D_\perp \frac{H}{V} \tag{2.5}$$

En d'autres termes, la variance de la distribution des particules à la sortie de l'empilement est donc proportionnelle à la hauteur H du milieu poreux. Au moyen de la méthode présentée au paragraphe 2.5, il est possible de déterminer la vitesse moyenne de percolation V qui intervient dans l'équation (2.5). Nous pouvons ainsi remonter à la valeur des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement.

2.9.2 Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du nombre de particules

La figure 2.24 montre l'évolution du coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du nombre N de particules. On voit clairement qu'avec le rapport de taille utilisé, la dispersion latérale des petites billes augmente lorsque leur nombre augmente. Plus le nombre de particules transitant dans l'empilement de grosses sphères est important, plus le « cœur » dense du nuage de particules est gros. La surface de ce dernier permet des éjections de particules vers la périphérie moins dense. L'augmentation de cette surface avec le nombre de particule favorise donc la dispersion latérale des particules.

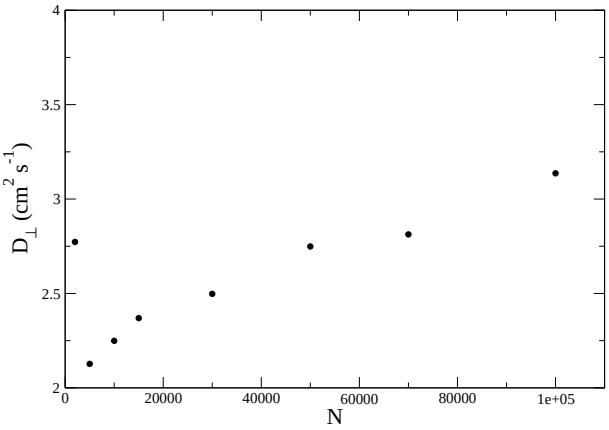


Figure 2.24: *Évolution du coefficient de dispersion latéral en fonction du nombre de particules pour un rapport de taille* $D/d = 16$.

2.9.3 Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du type de matériau

Pour qualifier l'influence du type de matériau sur le coefficient de dispersion $D_\perp$, nous avons fait une autre série d'expériences avec des particules de verre de diamètre 1 mm. La figure 2.25 montre l'évolution de la variance de la distribution des particules à la sortie de l'empilement en fonction de la hauteur H. L'encadré de la figure 2.25 montre quant à lui, les valeurs des coefficients de dispersion pour $N = 10\,000$, $N = 50\,000$ et $N = 100\,000$. Nous

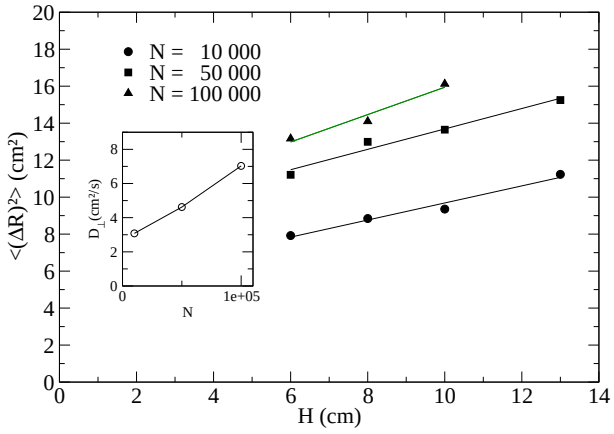


Figure 2.25: *Évolution de* $\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle$ *avec la hauteur* H *de l'empilement. Les billes constituant le milieu poreux sont des billes de verre de diamètre* 16 cm. *Les particules utilisées sont des billes de verre telles que* $D/d = 16$. *L'encadré représente l'évolution du coefficient de dispersion latéral en fonction du nombre de particules.*

constatons que $D_\perp$ augmente avec N comme nous avons pu l'observer précédemment sur la figure 2.24. On constate cependant que les valeurs des coefficients de dispersion dans la

direction perpendiculaire à l'écoulement sont plus élevées pour des particules de verre que pour des particules d'acier. A ce stade, nous pouvons émettre plusieurs hypothèses concernant cette augmentation des coefficients de dispersion avec le changement de matériau. Le changement de matériau implique en réalité un changement de plusieurs paramètres physiques :

- un changement des propriétés de surface et donc des propriétés de frottement,
- un changement de densité,
- un changement des coefficients de restitution.

La première hypothèse, qui concerne la modification des propriétés de frottement, est peu plausible. En effet, lors de l'écoulement de petits grains à travers un empilement de sphères plus grosses, les déplacements des particules se font essentiellement par vols paraboliques ponctués de temps à autre par des collisions avec les sphères du milieu poreux ou avec les autres particules. Même si des frottements peuvent intervenir lorsque le nuage de particules en écoulement est relativement dense, cette hypothèse ne peut pas expliquer à elle seule les différences entre la figure 2.24 et l'encadré de la figure 2.25. Si l'on considère maintenant la deuxième hypothèse, la densité de l'acier est de 7,8 g cm^{-3} tandis que celle du verre est de 2,5 g cm^{-3}. A diamètres égaux, des billes de verre ont une masse moindre par rapport à des billes d'aciers. Les billes de verre présentent donc moins l'effet de la gravité. Ce raisonnement est une des explications possibles de l'augmentation des coefficients de dispersion lors du passage de l'utilisation de billes d'acier à l'utilisation de billes de verre. En ce qui concerne la dernière hypothèse, sur une modification des propriétés de restitution de l'énergie lors d'une collision, un changement de matériau entraîne la modification de plusieurs coefficients de restitution : le coefficient de restitution entre deux particules et celui entre une particule et une sphère du milieu poreux. D'une manière générale, lors du passage de l'utilisation de billes d'acier à l'utilisation de billes de verre, les deux coefficients de restitution augmentent (*Goldsmith*, 1960). Cependant, l'étude de leur influence sur la dispersion latérale des particules n'est pas facilement réalisable expérimentalement. En revanche une telle étude est possible numériquement et nous y reviendrons par la suite dans le chapitre 4. Néanmoins, cette augmentation de la dispersion lors du passage de l'utilisation de particules d'acier à des particules de verre se traduit par une exploration latérale plus importante pour les billes de verre que pour les billes d'acier. La figure 2.26 montre l'évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules de verre pour différentes hauteurs. Nous avons également reporté les valeurs du temps moyen de transit mesuré dans le cas de l'utilisation de particules d'acier. Nous pouvons constater, à la vue de la figure 2.26 et en raison des résultats précédents, que le temps moyen de transit des particules de verre est plus important que celui des particules d'acier.

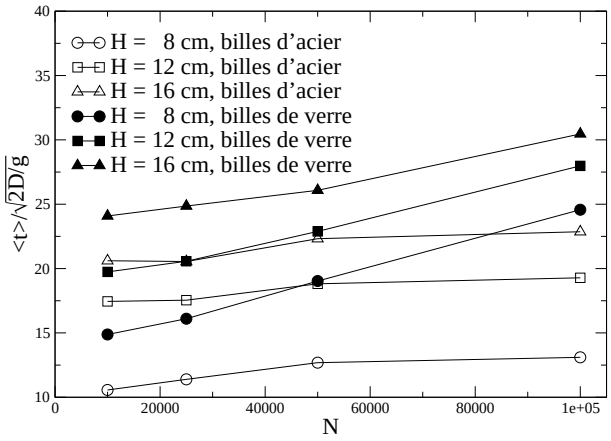


Figure 2.26: *Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules pour des petites sphères de verre de diamètre $d = 1$ mm. Cette même évolution pour des particules d'acier est également représentée.*

2.10 Conclusion du chapitre

Les expériences, réalisées grâce au dispositif présenté dans la partie 2.2, ont permis de mettre en évidence de nombreux résultats intéressants. Après avoir décrit les conditions expérimentales, nous avons montré comment il était possible, via un ajustement des profils d'élutriation, de déterminer un temps moyen de transit. Nous avons alors mis en évidence le fait qu'une approche de type ADE pouvait décrire le phénomène de percolation spontanée d'un ensemble de particules au sein d'un empilement de sphères plus larges. Des mesures du temps moyen de transit pour différentes hauteurs du milieu poreux et pour différents nombres de particules ont permis d'étendre la validité des résultats de *Samson* (1997), *Ippolito et al.* (2000) au cas où plusieurs particules transitent simultanément dans le milieu poreux. En effet, nous avons montré que le paquet de particules atteint un régime d'écoulement à vitesse constante après avoir franchi seulement quelques couches du milieu poreux. La partie haute de l'empilement de grosses sphères est le siège d'un régime transitoire qui a été en partie reflété par la forte dispersion des valeurs des temps moyen de transit que nous avons mesurées pour les faibles hauteurs H.
Nous nous sommes intéressés par la suite à caractériser l'influence du nombre de particules sur le temps moyen de transit. On a alors observé que l'on pouvait différencier trois principaux régimes d'écoulements suivant le nombre de particules qui transitent dans la structure. Ces trois régimes sont de types collisionnel, gravitaire ou d'encombrement. Une autre série d'expériences a été réalisée pour étudier l'influence du rapport de taille entre les deux types de sphères sur le temps moyen de transit. Il a alors été observé que plus les particules sont petites et plus la vitesse d'écoulement à travers le milieu poreux est grande. Enfin, nous avons terminé ce chapitre en montrant l'influence du nombre de particules sur la dispersion de ces dernières. Grâce à la loi (2.2), nous avons mesuré le coefficient de dispersion dans la direction longitudinale pour différents nombres de particules. Il a été mis en évidence que ce coefficient croît avec N et qu'il ne dépend pas de la hauteur de

l'empilement, à condition que celle-ci soit suffisamment grande pour minimiser l'influence de la phase de rebond sur la surface du milieu poreux et celle du régime de transition dans la partie haute de l'empilement. Cette hauteur ne doit cependant pas être trop grande pour éviter que le paquet de particules ne soit complètement dilué et donc permettre que des effets collectifs puissent encore avoir lieu. Des mesures du coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à la direction de l'écoulement ont été réalisées à partir des distributions spatiales des particules obtenues à la sortie du milieu poreux. Nous avons mis en évidence une augmentation de la dispersion latérale du paquet en écoulement lorsque le nombre de particules qui le constitue augmente.

Chapitre 3

Modélisations numériques

3.1 Introduction

Les études expérimentales des milieux granulaires sont souvent complétées par une étude numérique. La modélisation des expériences au moyen d'un ordinateur permet de contrôler efficacement l'influence des divers paramètres physiques qui peuvent intervenir, en les incorporant ou non dans le modèle. Ainsi, plusieurs approches, plus ou moins complexes les unes par rapport aux autres, sont possibles pour modéliser un milieu granulaire. Un modèle numérique est validé lorsqu'il reproduit, à partir des ingrédients essentiels, les comportements expérimentaux. En raison de la nature même des milieux granulaires, la modélisation numérique de ces systèmes se trouve confrontée à la difficulté de mettre en oeuvre un grand nombre d'entités élémentaires. Numériquement, un accroissement du nombre d'entités à modéliser entraîne une augmentation du temps de calcul. Les principaux avantages qu'apporte l'approche numérique par rapport à l'approche expérimentale sont :

- La simulation numérique donne accès aux variables locales, c'est-à-dire aux coordonnées spatiales, aux composantes des vitesses ainsi qu'éventuellement aux forces, à différents instants et ce pour chaque particule.
- Contrairement aux expériences réelles, la modélisation discrète des milieux granulaires permet d'appréhender les caractéristiques des contacts. En effet, lors des expériences, les contacts inter-grains sont très sensibles aux conditions extérieures. Ainsi, la simulation numérique permet par exemple de ne pas modéliser la formation de ponts capillaires entre les grains (en raison de l'humidité ambiante) et des effets de vieillissement.

3.2 Les différents types de simulations

La difficulté de modéliser parfaitement le comportement des milieux granulaires explique sans aucun doute le grand nombre d'approches qui ont été proposées. Chacune de ces méthodes possède ses avantages et ses inconvénients, aussi bien sur le plan du temps de calcul

que sur la fiabilité des résultats. C'est pourquoi il convient d'être prudent quant au choix d'une méthode et de son domaine d'utilisation. Dans les sections qui suivent, nous allons passer en revue les différents types de méthodes couramment employées dans la modélisation de la matière en grains. Nous présenterons dans un premier temps les principales méthodes aux éléments discrets (DEM) puis dans un second temps, nous aborderons la méthode de Monte Carlo.

3.2.1 Les méthodes aux éléments discrets

Les modélisations discrètes à l'échelle de la particule, que l'on regroupe sous le terme collectif de Méthodes aux Éléments Discrets (MED ou DEM), considèrent un système physique comme un assemblage de corps distincts. Chaque corps, pourvu d'une géométrie spécifique, possède une structure interne propre. En raison de la montée en puissance des calculateurs, les méthodes aux éléments discrets constituent aujourd'hui un outil important dans les travaux de recherches. Ces méthodes sont donc couramment employées dans l'étude des systèmes complexes comme les milieux granulaires. D'un point de vue général, on distingue parmi les méthodes aux éléments discrets, deux grandes catégories. Il existe des algorithmes de calcul dirigés par « les événements » et d'autres dirigées par une « horloge ». Cela correspond respectivement assez bien aux différentes approches que sont les modèles à sphères dures et ceux à sphères déformables.

La dynamique moléculaire de sphères déformables

La plus ancienne de ces méthodes, et de loin la plus usitée à ce jour, est une méthode élaborée par Cundall (*Cundall et Strack*, 1979) et inspirée de la dynamique moléculaire (*Alder et Wainwright*, 1959). Cette technique, communément appelée « dynamique moléculaire de sphères molles », consiste à intégrer au cours du temps les positions ainsi que les vitesses de toutes les particules obtenues à partir d'une équation du mouvement induite par le calcul des forces exercées sur chaque particule. Il existe différentes variantes dans la dynamique moléculaire de sphères molles. Celles-ci diffèrent entre elles par le modèle employé pour modéliser la force qui s'exerce sur les grains lors d'une collision. D'une manière générale, les particules sont considérées comme déformables et la force induite par une collision est calculée à partir de la détermination de l'interpénétration entre les particules.

La dynamique des contacts

La dynamique des contacts est une technique mise au point dans les années 1980 par Moreau et Jean (*Moreau*, 1988; *Jean et Moreau*, 1992; *Jean*, 1995). Elle permet de traiter des ensembles de particules rigides, frottantes et inélastiques. Les particules sont considérées comme indéformables et les forces sont calculées en appliquant la loi de Coulomb. Elle représente une alternative intéressante à la dynamique moléculaire de sphères molles. Cette technique permet l'utilisation d'un pas de temps plus grand comparé à une méthode de dynamique moléculaire de sphères molles. Cette technique a été appliquée avec succès à la modélisation de milieux granulaires dans des cas statiques (*Radjai et al.*, 1996), quasi-statiques ((*Moreau*, 1997)) et dynamiques (*Staron*, 2002).

La méthode Event-Driven

La méthode Event-Driven est, comme son nom l'indique, une méthode basée sur les évènements. Le modèle Event-Driven ou IHS (Inelastic Hard Sphere) possède la particularité de considérer les collisions comme binaires et instantanées. Contrairement aux deux méthodes précédentes, on ne procède pas par intégration dans le temps. L'absence de pas de temps rend ce genre de simulation beaucoup plus rapide qu'une méthode possédant un pas de temps.

3.2.2 La méthode de Monte Carlo

Il existe une autre méthode appelée technique de Monte Carlo. Elle a été maintes fois utile dans la résolution de problèmes de mécanique statistique. Cette technique a été aussi employée dans la physique des milieux granulaires (*Rosato et al.*, 1986, 1987; *Barker et Mehta*, 1993; *Devillard*, 1990; *Alder et al.*, 1955; *Duke et al.*, 1990; *Philippe*, 2002). La méthode de Monte Carlo est une méthode qui cherche les positions relaxées d'un milieu granulaire. Pour pouvoir utiliser cette technique, il est donc nécessaire de distinguer deux phases dans l'évolution temporelle du milieu granulaire : une phase d'excitation, suivie d'une phase de relaxation. Cette technique de simulation numérique ne prend donc pas en compte la dynamique des collisions. De plus, elle est impropre à la description d'une collection de grains en interactions collisionelles fréquentes. En effet, la période du cycle excitation-relaxation devant être inférieure à l'intervalle de temps entre deux évènements, le nombre d'étapes de calcul diverge.

Les automates cellulaires

L'origine des automates cellulaires remonte aux années quarante et au mathématicien Stanislas Ulam. Celui-ci s'est intéressé à l'évolution, dans un espace à deux dimensions divisé en cellules, de constructions graphiques engendrées par des règles simples. Chacune des cellules pouvait avoir deux états : allumé ou éteint. L'état d'une cellule à l'instant suivant était déterminé par des règles de voisinages. Par exemple, si une cellule compte deux cellules voisines qui se trouvent en position allumée alors celle-ci s'allume ou s'éteint le cas échéant. Partant d'une configuration donnée et en appliquant des règles de voisinages simples, Ulam remarqua qu'il était possible de générer des structures très complexes. Il se posa alors la question de savoir si de tels mécanismes récursifs pouvaient expliquer la complexité du réel, ce qui traduirait alors que cette complexité n'est qu'apparente et que les lois fondamentales qui gouvernent certains phénomènes complexes pourraient être décrites simplement. L'utilisation des automates cellulaires pour modéliser le comportement des milieux granulaires a débuté vers la fin des années quatre-vingts (*Bak et al.*, 1987; *Baxter et Behringer*, 1990, 1991; *Peng et Herrmann*, 1994). En 1987 *Bak et al.* (1987) ont défini un modèle d'automate cellulaire pour simuler une avalanche à la surface d'un tas de sable. Depuis, de nombreuses études ont été réalisées (*Désérable et Martinez*, 1993; *Désérable*, 1998), principalement dans le domaine des écoulements et de la formation des tas.

3.3 Création d'un milieu poreux

Pour pouvoir modéliser notre expérience, nous avions besoin dans un premier temps de générer des empilements de sphères désordonnés. Nous avons donc créé un empilement de sphères de diamètres D, qui va constituer notre milieu poreux, ainsi qu'un empilement de sphères de diamètres d que l'on place au dessus de l'empilement précédent. Ces deux empilements vont donc nous permettre de reproduire nos expériences par simulations. Avant de décrire notre manière de procéder pour traiter la partie dynamique de la simulation du transport de petites particules dans un empilement de sphères, nous allons décrire le principe de fonctionnement de l'algorithme utilisé pour générer ces empilements. Pour

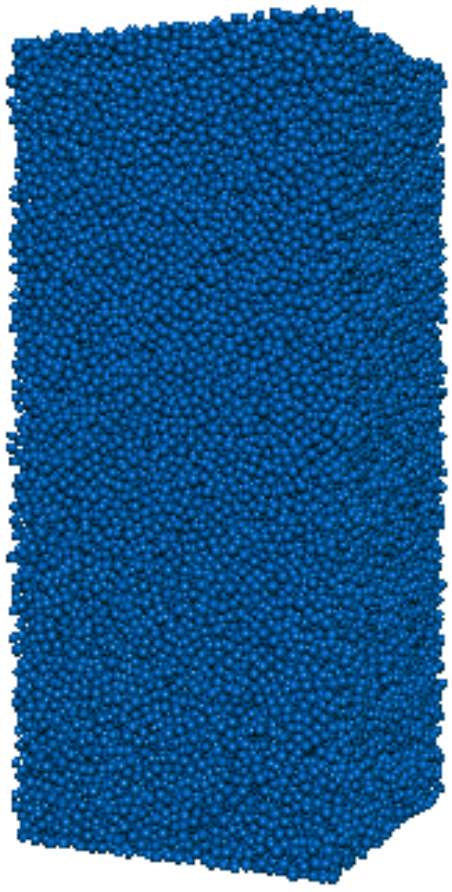


Figure 3.1: *Exemple d'empilement de* 70 000 *sphères généré avec l'algorithme de Powell.*

construire des empilements de sphères, il existe plusieurs algorithmes. Citons par exemple les algorithmes dits séquentiels tels que l'algorithme RSA (Random Sequential Adsorption) (*Rényi*, 1958; *Widom*, 1966; *Hinrichsen et al.*, 1986), l'algorithme MRSA (Modified Random Sequential Adsorption) (*Jullien et Meakin*, 1992), les algorithmes gravitationnels tels que l'algorithme de *Visscher et Bolsterli* (1972) ou l'algorithme de *Powell* (1980). Il existe

aussi des algorithmes coopératifs tels que l'algorithme de *Jodrey et Tory* (1985) ou sa version modifiée par *Jullien et al.* (1996). Nous avons choisi d'utiliser l'algorithme de *Powell* (1980). Pour cela, nous partons d'une configuration initiale où nous plaçons un cluster de trois sphères en contact deux à deux dans un coin inférieur d'une boîte parallépipédique. Cette boîte permet de délimiter la taille du système, mais hormis sa base elle n'impose pas de contrainte sur l'empilement. Les empilements générés par notre programme sont donc périodiques latéralement. Ce cluster constitue l'amorce qui va nous permettre de faire croître l'empilement dans les trois directions de l'espace. Le fond de l'empilement étant en contact avec la base de la boîte, nous générons la première couche de l'empilement par une routine spécifique permettant de prendre en compte la présence d'un plan et de s'assurer du contact des sphères avec ce plan. Cette routine est essentiellement une version à deux dimensions de la routine principale nous permettant de construire l'empilement. On cherche alors à placer successivement des sphères, dont les rayons sont choisis de manière aléatoire, au contact de la base de la boîte et de deux sphères déjà placées. Les sphères placées ne sont alors plus autorisées à bouger. Quand il n'est plus possible de placer de sphères dans cette première couche, la phase d'initialisation s'arrête. Commence alors une nouvelle phase dans laquelle chaque nouvelle sphère de l'empilement est placée en contact avec trois autres sphères déjà en place. De la même manière, on choisit aléatoirement le rayon d'une nouvelle sphère que l'on va ajouter à notre empilement. On place cette sphère en contact avec une sphère de l'empilement choisie au hasard et qui n'est pas encore recouverte. On positionne ensuite la nouvelle sphère de telle sorte qu'elle soit en plus en contact avec deux autres sphères assez proches de la sphère choisie précédemment. A ce stade, nous vérifions que la sphère ne recouvre pas une autre sphère de l'empilement. Si cette condition est remplie, alors la position de la nouvelle sphère est acceptée. Elle est alors en contact avec trois autres sphères ce qui garantit la stabilité de l'empilement. S'il y a recouvrement avec une quatrième sphère, la position de la nouvelle sphère est invalidée. On cherche alors deux autres sphères candidates pour assurer le contact. Les sites autorisés pour le placement d'une nouvelle sphère sont ceux tels que la partie basse de la sphère soit comprise entre une gamme d'altitude donnée correspondant à une zone de travail. La taille de celle-ci est de l'ordre du cinquième de la taille d'un grain. En réalité, pour chacune des nouvelles sphères que l'on cherche à placer, on effectue plusieurs tests de positionnement. Ainsi, si dans notre zone de travail, il y a plus d'une seule position possible pour la nouvelle sphère, c'est-à-dire s'il existe d'autres positions telles que la nouvelle sphère soit au contact de la même sphère choisie aléatoirement dans l'empilement et de deux autres sphères, alors on retient comme position celle qui place la sphère à la hauteur la moins élevée pour avoir un empilement relativement dense.
Si aucune position n'est acceptable, le programme choisit alors au hasard une autre sphère pour être en contact avec la nouvelle sphère que l'on cherche à placer. Si au bout d'un certain nombre d'essais, il n'est toujours pas possible de trouver une place pour une nouvelle sphère, la surface de l'empilement est alors complètement recouverte. On incrémente alors la hauteur de notre zone de travail et l'on continue le procédé couche par couche jusqu'à ce que toutes les sphères soient placées ou que l'empilement de sphères atteigne la hauteur désirée.

L'algorithme modélise en quelque sorte une déposition des sphères sous gravité, ce qui cor-

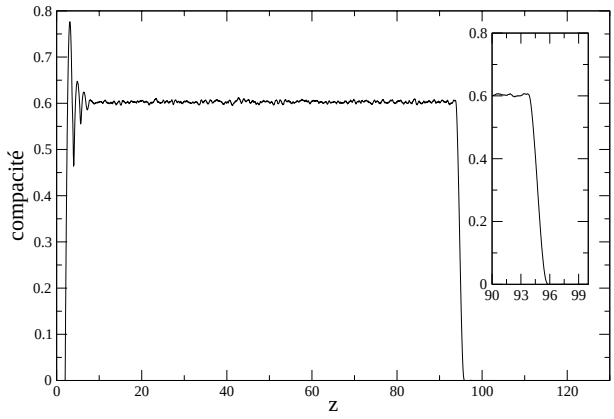


Figure 3.2: *Exemple de profil de compacité d'un empilement généré via l'algorithme de Powell. L'encart montre que la compacité décroît jusqu'à une valeur nulle sur une hauteur de l'ordre de deux diamètres de grains.*

respond assez bien à la technique utilisée pour la préparation des empilements utilisés dans nos expériences. Les empilements générés avec cette technique sont relativement denses. Pour éviter l'apparition d'ordre local, on introduit une légère dispersion de taille (20%). La figure 3.1 montre un exemple d'empilements obtenus par l'algorithme de Powell. La figure 3.2 présente un profil de compacité pour un empilement généré via l'algorithme de Powell. Avec cette technique, on obtient des empilements dont la compacité est voisine de 0,60. La méthode de construction par couches qu'utilise l'algorithme de Powell permet d'obtenir des empilements dont la surface est quasi plane. Ceci est illustré sur l'encart de la figure 3.2. La géométrie des empilements construits par cette méthode a été le sujet de nombreuses études (*Powell*, 1980; *Oger et al.*, 1986) et celles-ci ont montré l'équivalence avec les empilements réels de sphères.

3.4 Traitement de la partie dynamique par une méthode Event-Driven

3.4.1 Idées et motivations

Dans les systèmes où la durée typique d'une collision est petite devant le temps moyen entre deux collisions successives d'une même particule, les particules sont rarement en contact avec plus d'une particule. Ainsi, la plupart du temps, les particules se meuvent le long d'une trajectoire balistique, interrompue de temps à autre par des collisions de courte durée. Chaque collision, qui implique une paire de particules, peut être considérée comme un évènement instantané et être traitée indépendamment des autres collisions. Bien qu'une simulation de dynamique moléculaire basée sur un calcul des forces puisse être applicable dans de telles situations, ce genre de modélisation est, de par son principe, inefficace en raison du temps de calcul nécessaire. En effet, si l'on intègre les équations du mouvement

pour une paire isolée de particules qui entrent en collision, les vitesses après le choc peuvent directement être exprimées comme des fonctions des vitesses avant le choc. La connaissance des forces d'interaction n'est pas requise et l'on peut alors utiliser ces fonctions pour mettre au point une simulation de type dynamique moléculaire gérée par les évènements. Une telle technique est communément appelée Event-Driven ou modèle IHS (Inelastic Hard Sphere). L'hypothèse principale pour pouvoir utiliser une approche Event-Driven est donc qu'à n'importe quel instant, il ne peut y avoir dans le système au plus qu'une collision d'une durée infinitésimale. Autrement dit, si l'on note t_c la durée d'une collision et t_{vol} le temps entre deux collisions, on a $t_c \ll t_{\text{vol}}$ ce que l'on assimile à $t_c = 0$. Cette méthode possède l'avantage de ne pas nécessiter le calcul des trajectoires de toutes les particules. En effet, entre chaque collision, les particules se déplacent sur des trajectoires balistiques connues. On peut ainsi aisément calculer les positions et les vitesses des particules au moment de leurs prochaines collisions. Ceci entraîne un temps de calcul moindre par rapport à une méthode de dynamique moléculaire de sphères molles où l'on résout les équations de Newton. Une représentation spatio-temporelle d'une succession de collisions dans un modèle Event-Driven est donnée sur la figure 3.3.

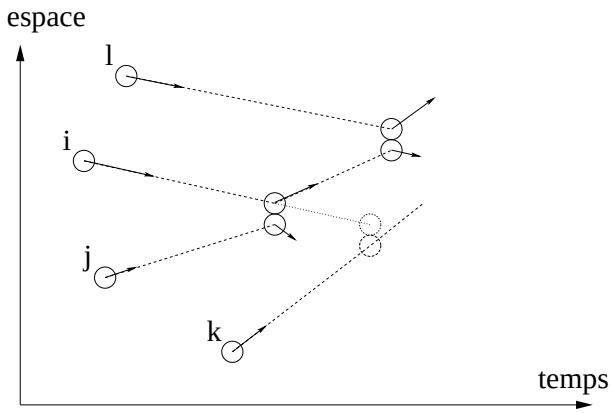


Figure 3.3: *Représentation de la gestion d'une succession d'évènements dans un modèle de type Event-Driven. Les particules sont en général à des dates différentes et leurs trajectoires sont déterministes entre deux collisions.*

3.4.2 Traitement d'une collision entre deux sphères dures

Avec l'approche du modèle IHS, les sphères sont considérées comme indéformables et les collisions sont considérées comme instantanées et binaires. Dans ce genre de modélisation, il n'y pas de forces de contact. Celles-ci sont remplacées par un opérateur de collision qui calcule les vitesses après un choc en fonction des positions, masses et vitesses avant l'impact. Cet opérateur de collision rend compte de l'inélasticité des chocs (*Dippel*, 1998). Considérons la collision entre deux sphères i et j comme représentée sur la figure 3.4. On peut alors définir un vecteur unitaire $\overrightarrow{n}$ dirigé selon la droite joignant les centres des deux

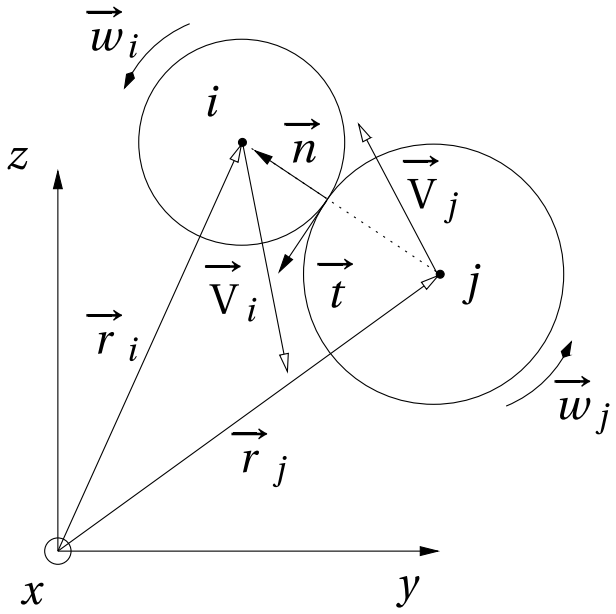


Figure 3.4: *Illustration d'une collision entre deux sphères dures i et j.*

particules i et j et pointant de la particule j vers la particule i,tel que :

$$\overrightarrow{n} = \frac{\overrightarrow{r}_i - \overrightarrow{r}_j}{\|\overrightarrow{r}_i - \overrightarrow{r}_j\|} \tag{3.1}$$

Il est commode de placer l'origine de ce vecteur au point de contact entre ces deux sphères. Avant la collision, les sphères i et j, de rayons respectifs R_i, R_j et de masses respectives m_i, m_j, ont pour vitesses translationnelles respectives $\overrightarrow{V}_i$ et $\overrightarrow{V}_j$. Si l'on note $\overrightarrow{w}_i$ et $\overrightarrow{w}_j$ les vitesses de rotations de chacune des particules, la vitesse relative $\overrightarrow{V}_{r_{ij}}$ de la particule i par rapport à la particule j au point de contact s'écrit :

$$\begin{aligned} \overrightarrow{V}_{r_{ij}} &= \left(\overrightarrow{V}_i - \overrightarrow{w}_i \wedge R_i \overrightarrow{n}\right) - \left(\overrightarrow{V}_j + \overrightarrow{w}_j \wedge R_j \overrightarrow{n}\right) \\ &= \overrightarrow{V}_{ij} - \left(R_i \overrightarrow{w}_i + R_j \overrightarrow{w}_j\right) \wedge \overrightarrow{n} \end{aligned} \tag{3.2}$$

avec $\overrightarrow{V_{\text{ij}}} = \overrightarrow{V_i} - \overrightarrow{V_j}$ et où R_i et R_j sont les rayons respectifs des particules.
Les vitesses relatives dans les directions normales et tangentielles s'écrivent alors :

$$\overrightarrow{V}^n_{r_{ij}} = \left(\overrightarrow{V}_{r_{ij}} \cdot \overrightarrow{n}\right) \overrightarrow{n} \tag{3.3}$$

$$\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} = -\overrightarrow{n} \wedge \left(\overrightarrow{n} \wedge \overrightarrow{V}_{r_{ij}}\right) \tag{3.4}$$

Dans la suite, toutes les grandeurs avec un prime désignent les grandeurs après le choc. Ainsi, $\overrightarrow{V}_i{}'$ et $\overrightarrow{V}_j{}'$ désignent les vitesses des particules i et j après la collision. Les vitesses

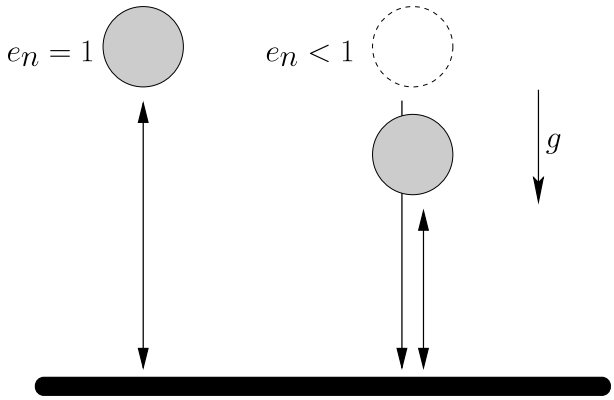


Figure 3.5: *Schéma illustrant l'action du coefficient de restitution dans la direction normale.*

relatives après la collision dans les directions normales et tangentielles sont reliées aux vitesses incidentes par le biais des coefficients de restitution e_n et e_t, qui sont respectivement les coefficients de restitution dans les directions normales et tangentielles[1].

$$\overrightarrow{V}^{n\ \prime}_{r_{ij}} = -e_n \overrightarrow{V}^{n}_{r_{ij}}, \text{ avec } \ 0 \leqslant e_n \leqslant 1 \tag{3.5}$$

$$\overrightarrow{V}^{t\ \prime}_{r_{ij}} = -e_t \overrightarrow{V}^{t}_{r_{ij}}, \text{ avec } \ -1 \leqslant e_t \leqslant 1 \tag{3.6}$$

L'action du coefficient de restitution dans la direction normale est représentée sur la figure 3.5. Ce coefficient traduit l'élasticité d'une collision. Lorsque $e_n = 1$, la collision est élastique. Dans les milieux granulaires, les collisions entre les grains sont dissipatives c'est pourquoi on choisit très souvent un coefficient de restitution e_n inférieur à l'unité. L'action du coefficient de restitution dans la direction tangentielle est, quant à elle, représentée sur la figure 3.6, dans le cas où l'on a un contact parfaitement glissant. Lorsque $e_t = 0$, la composante tangentielle de la vitesse relative au point de contact est nulle. L'énergie est dissipée. En revanche lorsque $e_t = \pm 1$, il n'y a pas de dissipation d'énergie. Si $e_t = 1$ la composante tangentielle de la vitesse relative de la particule au point de contact s'inverse au moment de la collision et la particule rebondit du côté opposé. La surface de contact entre les deux sphères étant très petite, aucune des forces agissant sur les particules n'entraîne de moment. En conséquence, il n'y a pas de transfert de moment entre les particules i et j. Dès lors, on peut écrire trois relations de conservation. La première d'entre elles exprime la conservation de la quantité de mouvement tandis que les deux autres traduisent la conservation des moments angulaires (cinétiques) pour chacune des particules. Dès lors, si

[1]Le coefficient de restitution tangentiel est introduit de manière heuristique. Il traduit la capacité ou l'incapacité à briser les microcontacts au moment du choc tangentiel. On définit l'angle d'impact comme l'angle entre la normale au contact et la vitesse relative de la particule i de telle sorte qu'il soit compris entre $\pi/2$ et π. Il existe un angle de contact seuil de part et autre duquel l'interaction peut être qualifiée d'interaction de glissement ou d'interaction de frottement (*Foerster et al.*, 1994; *Luding*, 1998b; *Duran*, 2000). La situation dans laquelle nous nous plaçons suppose que le contact est parfaitement glissant.

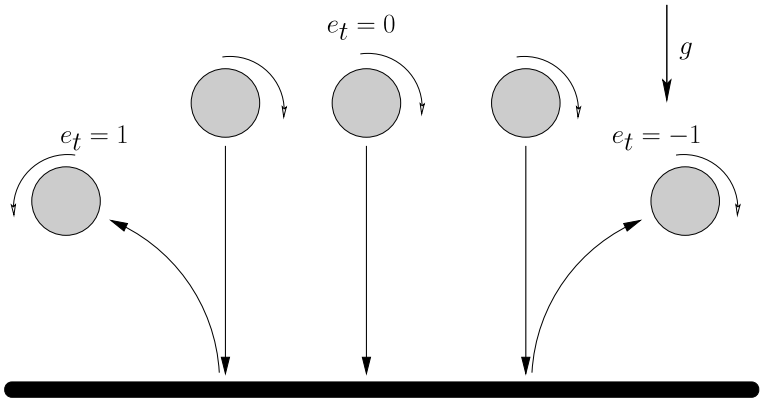


Figure 3.6: *Schéma illustrant l'action du coefficient de restitution dans la direction tangentielle.*

l'on note $\overrightarrow{J}$ la variation de quantité de mouvement de la particule i, appelée aussi vecteur impulsion, ces règles de conservation se résument de la façon suivante :

$$m_i\left(\overrightarrow{V}_i{}' - \overrightarrow{V}_i\right) = -m_j\left(\overrightarrow{V}_j{}' - \overrightarrow{V}_j\right) = \overrightarrow{J} \tag{3.7}$$

$$\frac{I_i}{R_i}\left(\overrightarrow{w}_i{}' - \overrightarrow{w}_i\right) = \frac{I_j}{R_j}\left(\overrightarrow{w}_j{}' - \overrightarrow{w}_j\right) = -\overrightarrow{n} \wedge \overrightarrow{J} \tag{3.8}$$

où I_i et I_j sont les moments d'inerties des sphères pleines et homogènes i et j, par rapport à leurs axes de rotation et tels que : $I_i = \frac{2}{5}m_i R_i^2$ et $I_j = \frac{2}{5}m_j R_j^2$.
L'impulsion s'écrit alors :

$$\overrightarrow{J} = -m_{ij}(1+e_n)\overrightarrow{V}^n_{r_{ij}} - m_{ij}\frac{\tilde{I}}{\tilde{I}+1}(1+e_t)\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \tag{3.9}$$

où $m_{ij}^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1}$ où $\tilde{I} = I_i/(m_i R_i^2) = I_j/(m_j R_j^2)$ est le moment d'inertie réduit égal à $\frac{2}{5}$. Il est alors possible d'exprimer les vitesses linéaires et angulaires après la collision en fonction de ces mêmes vitesses avant la collision.

$$\begin{cases} \overrightarrow{V}_i{}' = \overrightarrow{V}_i - \dfrac{m_{ij}}{m_i}(1+e_n)\overrightarrow{V}^n_{r_{ij}} - \dfrac{2}{7}\dfrac{m_{ij}}{m_i}(e_t+1)\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \\ \overrightarrow{V}_j{}' = \overrightarrow{V}_j + \dfrac{m_{ij}}{m_j}(1+e_n)\overrightarrow{V}^n_{r_{ij}} + \dfrac{2}{7}\dfrac{m_{ij}}{m_j}(e_t+1)\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \\ \overrightarrow{w}_i{}' = \overrightarrow{w}_i + \dfrac{2}{7}\dfrac{R_i}{I_i}m_{ij}(e_t+1)\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \\ \overrightarrow{w}_j{}' = \overrightarrow{w}_j + \dfrac{2}{7}\dfrac{R_j}{I_j}m_{ij}(e_t+1)\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \end{cases} \tag{3.10}$$

La connaissance des coefficients de restitution nous permet donc d'exprimer une règle de collision entre deux particules i et j.

3.4.3 Principe et implémentation de l'algorithme Event-Driven

A partir de la règle de collision (3.10), on construit un algorithme permettant de modéliser un ensemble de particules. Le principe d'un tel algorithme est le suivant :

1. Au début du programme, on attribut à chaque particule i une position $\overrightarrow{r_i}$, un vecteur vitesse $\overrightarrow{V_i}$ et une référence temporelle t_i que l'on initialise à la valeur zéro.
2. On recherche tous les évènements possibles et l'on détermine le temps $t^\star$, temps au bout duquel ces évènements vont se produire. On cherche ensuite le plus petit $t^\star$ parmi l'ensemble des évènements possibles, qui constitue l'instant t_e de la prochaine collision.
3. On détermine la position et la vitesse des particules impliquées dans la collision à l'instant t_e. Puis on calcule les nouvelles vitesses $\overrightarrow{V_i}'$ $\overrightarrow{V_j}'$ et $\overrightarrow{w_i}'$ $\overrightarrow{w_j}'$ des deux sphères impliquées. Ceci se fait en appliquant la règle de collision (3.10) définie précédemment.
4. On met à jour la date du système : $t = t_e$.
5. Enfin, on retourne à l'étape 2 pour procéder à la prochaine collision.

Nous avons donc implémenté un algorithme Event-Driven pour modéliser l'écoulement de particules dans un empilement de sphères plus larges. Nous allons détailler maintenant chacune des différentes phases de l'algorithme telles que nous les avons implémentées dans notre cas.

Comme toutes les sphères de notre système ne sont pas forcément mobiles, nous construisons deux classes de sphères : celles constituant le milieu poreux de diamètre moyen D et celles de diamètre d que l'on lâche au sommet du milieu poreux. Au départ du programme il nous faut initialiser les positions, vitesses et rayons de toutes les particules. Les positions des sphères du milieu poreux sont obtenues par l'algorithme de Powell décrit au paragraphe 3.3. Ces sphères sont immobiles, on leur attribue donc logiquement une vitesse initiale nulle. Nous générons ensuite un autre empilement de petites sphères de diamètre $d^\star = d + \epsilon$ de la même manière que précédemment. Puis nous réinitialisons tous les rayons des particules à une valeur égale à d. Cette dilatation initiale de l'empilement permet d'éviter que les particules soient en contact avant le début de la simulation. La valeur de ϵ reste très faible pour pouvoir affirmer que l'empilement de petites particules est stable et que cette dilatation n'a aucune influence sur la suite de la modélisation. Ceci nous permet d'éviter d'avoir des collisions à plus de deux particules à l'instant $t = 0$, ce qui n'est pas autorisé dans le principe même de la méthode Event-Driven. On place cet empilement de particules au sommet du milieu poreux. L'image 3.7 illustre le positionnement de cet empilement par rapport à l'empilement faisant office de milieu poreux. Les dimensions du petit empilement sont choisies de telle sorte qu'il soit de forme cubique. L'écart entre les deux empilements est égal au diamètre moyen D des grosses sphères et il reste constant dans toutes les simulations.

Dans la deuxième étape de l'algorithme, il est nécessaire de déterminer l'ensemble des évènements possibles. Si l'on considère les collisions entre 2 sphères i et j, la détection

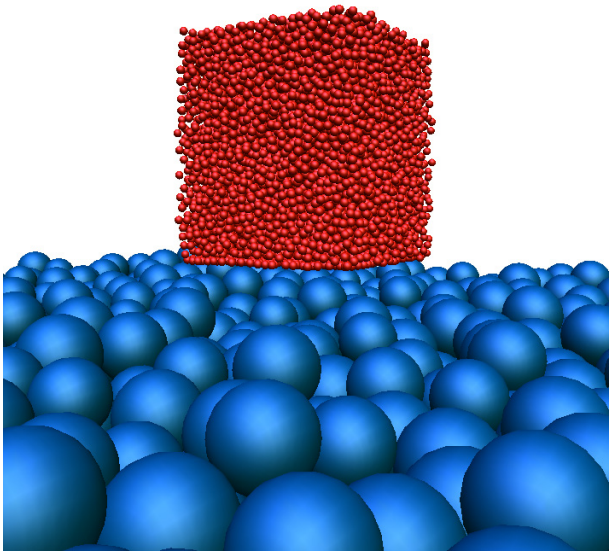


Figure 3.7: *Exemple d'empilement de* 20 000 *petites sphères généré avec l'algorithme de Powell.*

d'un évènement consiste à chercher l'éventuel temps $t^\star$ où les particules seront en contact. Ceci revient à résoudre l'équation :

$$\|\overrightarrow{r}_i(t^\star) - \overrightarrow{r}_j(t^\star)\| = R_i + R_j \tag{3.11}$$

On cherche donc l'ensemble des temps $t^\star$ pour tous les couples de particules i et j qui sont susceptibles d'entrer en collision. Nous avons mentionné dans la partie 3.3 que le milieu poreux était construit de manière périodique suivant les directions latérales. Autrement dit, une particule mobile qui sort du système d'un côté rentre dans le système par le côté opposé. Néanmoins, les collisions entre petites particules, contrairement aux collisions entre les particules et les sphères du milieu poreux, ne sont pas périodiques. Une particule sortant par la droite du système ne peut pas interagir avec une particule se situant près de la frontière gauche du système.
Une fois l'ensemble des évènements possibles connu, il nous faut connaître l'évènement le plus proche dans le futur par rapport à la date t_{syst} actuelle du système. Ceci est rendu possible par l'utilisation d'un arbre binaire qui, pour chaque particule i, permet d'accéder rapidement à la date du prochain évènement auquel elle sera soumise au temps $t^\star$. La date du prochain évènement t_e de notre système est alors déterminée via une méthode de tri rapide qui nous permet d'accéder aisément et rapidement au temps t_e minimum parmi l'ensemble des $t^\star$. On possède donc en permanence une liste chronologique de tous les évènements futurs qui sont susceptibles d'avoir lieu dans le système.

Une fois t_e connu, il est alors possible d'appliquer la règle de collision (3.10) à l'instant t_e pour les deux particules i et j sachant leurs positions et leurs vitesses aux instants t_i et t_j.

Dans notre programme, une légère modification est apportée par rapport à l'opérateur de collision (3.10). En effet, nous négligeons toutes rotations des particules. Cette hypothèse est souvent utilisée dans la théorie des gaz granulaires (*Grossman et al.*, 1997; *Du et al.*, 1995; *McNamara et Young*, 1996).
Une fois la collision entre i et j traitée, le système se trouve à la date $t_{\text{syst}} = t_e$. il faut cependant noter que seules les particules i et j impliquées dans la collision précédente se trouvent réellement à la date t_e. Les autres particules se situent à des positions pour des temps antérieurs à t_e. En toute logique, il est possible de calculer les positions de toutes ces sphères à l'instant t_e. Mais ce calcul n'est nullement nécessaire puisque leurs trajectoires jusqu'à t_e sont déterministes. Ainsi, bien que cela nous oblige à rechercher des contacts entre sphères qui n'ont pas les mêmes référentiels temporels, nous évitons une mise à jour complète du système ce qui apporte un gain de temps non négligeable lors de simulations d'un grand nombre de particules mobiles.
Pour finir, on retourne à la deuxième étape de l'algorithme. Il faut mettre à jour l'arbre binaire pour pouvoir détecter le prochain évènement. Pour ce faire, on cherche à nouveau le prochain évènement pour les particules i , j ainsi que pour toute particule k, où k est une sphère qui devait entrer en collision avec i ou j si l'évènement au temps t_e n'avait pas eu lieu. On procède ainsi jusqu'à ce que toutes les particules aient atteint une hauteur égale à leur rayon, soit le bas du milieu poreux.

3.4.4 Les limites de l'Event-Driven et leurs solutions

Comme dans toute simulation numérique, on se doit d'être vigilant quant à la manière de minimiser l'accumulation des erreurs dues à la précision limitée d'un ordinateur. Ces erreurs d'arrondis peuvent avoir des conséquences importantes lors de simulations numériques et en particulier dans le cas de la méthode Event-Driven, où l'on considère que la durée des collisions est très petite par rapport aux temps de vols des particules. Ces arrondis peuvent entraîner des recouvrements de particules, conduisant à l'apparition d'erreurs dans la détermination de la succession des évènements. Alors que la détection d'une collision entre deux particules mobiles conduit à la résolution d'une équation quadratique en t, la recherche d'une collision entre une sphère mobile et une autre appartenant au milieu poreux se ramène à la résolution d'une quartique. En effet, la condition (3.11) se résume dans le cas de deux sphères mobiles à :

$$(t^\star - t_i)^2 + 2(t^\star - t_i)\frac{\overrightarrow{r}_{ij}(t_i)\cdot\overrightarrow{V}_{ij}(t_i)}{\overrightarrow{V}^2_{ij}(t_i)} + \frac{\overrightarrow{r}^2_{ij}(t_i) - (R_i+R_j)^2}{\overrightarrow{V}^2_{ij}(t_i)} = 0 \qquad (3.12)$$

$$\text{avec } \overrightarrow{r}_{ij}(t_i) = \overrightarrow{r}_i(t_i) - \underbrace{\left(\frac{1}{2}(t_i-t_j)^2\overrightarrow{a} + \overrightarrow{V}_j(t_j) + \overrightarrow{r}_j(t_j)\right)}_{\overrightarrow{r}_{j(t_i)}}$$

$$\text{et } \overrightarrow{V}_{ij}(t_i) = \overrightarrow{V}_i(t_i) - \underbrace{\left((t_i-t_j)\overrightarrow{a} + \overrightarrow{V}_j(t_j)\right)}_{\overrightarrow{V}_{j(t_i)}}$$

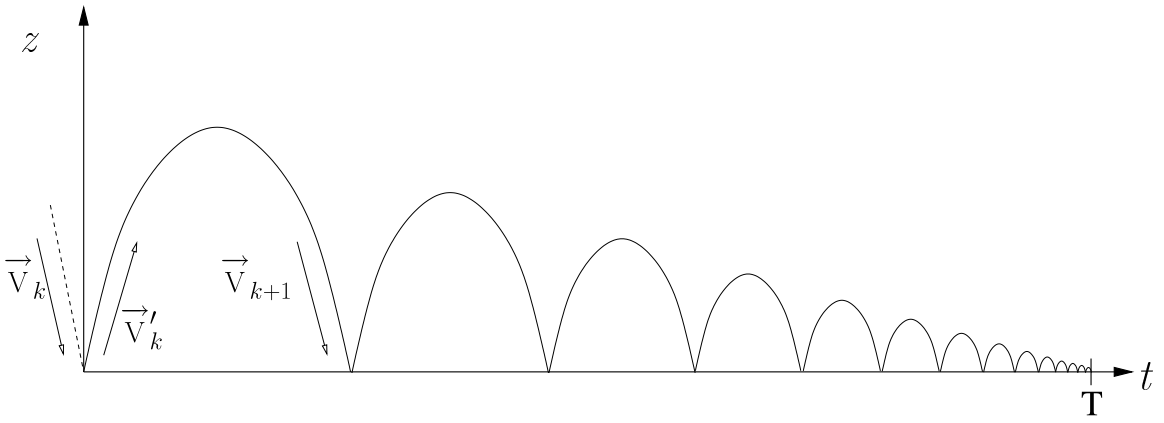


Figure 3.8: *Hauteur z d'une balle rebondissant sur un plan horizontal en fonction du temps.*

Lorsque la particule j ne peut pas bouger, cette même condition se traduit par l'équation quartique :

$$(t^\star - t_i)^4 + 4(t^\star - t_i)^3 \frac{\overrightarrow{a} \cdot \overrightarrow{V}_i(t_i)}{\overrightarrow{a}^2} + 4(t^\star - t_i)^2 \frac{\overrightarrow{a} \cdot \overrightarrow{r}_{ij}(t_i) + \overrightarrow{V}^2_i(t_i)}{\overrightarrow{a}^2} + 8(t_e - t_i) \frac{\overrightarrow{r}_{ij}(t_i) \cdot \overrightarrow{V}_i(t_i)}{\overrightarrow{a}^2} + 4 \frac{\overrightarrow{r}^2_{ij}(t_i) - (R_i + R_j)^2}{\overrightarrow{a}^2} = 0 \tag{3.13}$$

avec $\overrightarrow{r}_{ij}(t_i) = \overrightarrow{r}_i(t_i) - \overrightarrow{r}_j(t_i) = \overrightarrow{r}_i(t_i) - \overrightarrow{r}_j(t_j)$.
La recherche des évènements, et donc la résolution de ces équations, joue une part très importante dans la durée de la simulation. La résolution de ces quartiques est l'un des problèmes auxquels nous avons dû faire face. Les différentes méthodes de résolution de quartiques telles que les méthodes de Descartes, Ferrari et Neumark, ramènent le problème, par un changement de variable propre à chacune des méthodes, à la résolution d'une équation cubique. Néanmoins, aucune de ces techniques de résolution de quartiques n'est infaillible. En effet, lorsque les solutions sont de l'ordre de 10^{-4} à 10^{-6} seconde, l'une ou l'autre des méthodes peut ne pas trouver l'ensemble des solutions. Le changement de variable propre à chaque méthode introduit des erreurs qui se répercutent sur les solutions de la quartique. Ne pouvant se permettre d'oublier des évènements, l'algorithme que nous avons développé peut, s'il le juge nécessaire, combiner les résultats obtenus par les différentes méthodes. Les résultats, comme ceux obtenus lors de la recherche de contact entre deux particules mobiles, peuvent être ensuite optimisés par une méthode de type Newton-Raphson. Il faut donc en permanence choisir le bon compromis entre la précision et l'efficacité du calcul.

Lors de l'utilisation de la méthode Event-Driven, un artefact, connu sous le nom de collapse inélastique peut apparaître (*Shida et Kawai*, 1989). Prenons par exemple le cas d'une balle

soumise à l'accélération gravitationnelle et rebondissant sur un plan horizontal. La figure 3.8 représente la hauteur de cette balle en fonction de temps. Soit respectivement V_k et $V_k^{'}$ les vitesses avant et après la k-ième collision. On peut alors écrire que $\bar{V}_k^{'} = -e_n\bar{V}_k = -\bar{V}_{k+1}$. Soit $\bar{V}_{k+1} = e_n\bar{V}_k = e_n^{k+1}\bar{V}_0$ où V_0 est la vitesse initiale. Le temps entre deux collisions successives k et $k+1$ s'écrit alors :

$$t_{k+1} = 2V_{k+1}/g = 2e_n^{k+1}V_0/g \tag{3.14}$$

Ainsi le temps au bout duquel la particule a perdu la totalité de son énergie cinétique s'écrit :

$$T = \sum_{k=0}^{\infty} t_{k+1} = \frac{2V_0e_n}{g\,(1-e_n)} \tag{3.15}$$

$$k_{\max} = \frac{\log\left(\dfrac{gt_c}{2V_0}\right)}{\log(e_n)} \tag{3.16}$$

La particule reste alors en contact avec le plan horizontal. Mais ce comportement ne peut pas être décrit avec une méthode de type Event-Driven. Dès lors, un système de particules en interactions avec un coefficient de restitution constant et inférieur à l'unité peut être le siège de formations de clusters de particules. Par le biais de collisions inélastiques, les particules perdent la totalité de leur énergie cinétique relative et se regroupent en un cluster où elles évoluent toutes à la même vitesse. Les conditions pour qu'un collapse inélastique puisse avoir lieu ont été étudiées à une dimension (*McNamara et Young*, 1992) ainsi qu'à deux dimensions (*McNamara et Young*, 1994). Il a aussi été montré analytiquement (*Zhou et Kadanoff*, 1996), qu'un collapse de trois particules peut avoir lieu quelle que soit la dimension de l'espace dans lequel ces particules évoluent. Un collapse inélastique, même incomplet, entraîne dans une simulation de type Event-Driven une augmentation de la fréquence des collisions. Cela se traduit par une divergence du temps de calcul. Les particules sont sujettes à un très grand nombre de collisions pendant un temps très court, temps qui finit par être comparable à la limite de la précision numérique. Nous avons pu observer ce phénomène dans notre programme de simulation ce qui nous a conduit à nous intéresser aux moyens d'éviter cet artefact. Pour éviter l'apparition du collapse inélastique, plusieurs auteurs (*Grossman*, 1997; *Deltour et Barrat*, 1997) suggèrent l'ajout stochastique d'énergie translationnelle ou rotationnelle dès que celle-ci devient inférieure à une certaine valeur critique. De la même manière, une rotation, d'un angle inférieur à 5°, de la vitesse relative après le contact semble éviter l'apparition du collapse inélastique. En effet, les corrélations entre les collisions successives se trouvent ainsi atténuées. Néanmoins ces techniques pour éviter la formation de clusters de particules en raison de l'inélasticité des collisions n'ont aucune justification physique. De plus, elles ne peuvent assurer l'annihilation du collapse inélastique dans tous les cas de figure. Le collapse inélastique provient du fait que le coefficient de restitution dans la direction normale est considéré comme constant. Or cette hypothèse n'est pas en accord avec l'observation expérimentale. Dans les modèles de collisions plus réalistes, le coefficient de restitution n'est pas constant. Une technique fréquemment utilisée pour réduire la dissipation dans les systèmes où les vitesses sont faibles

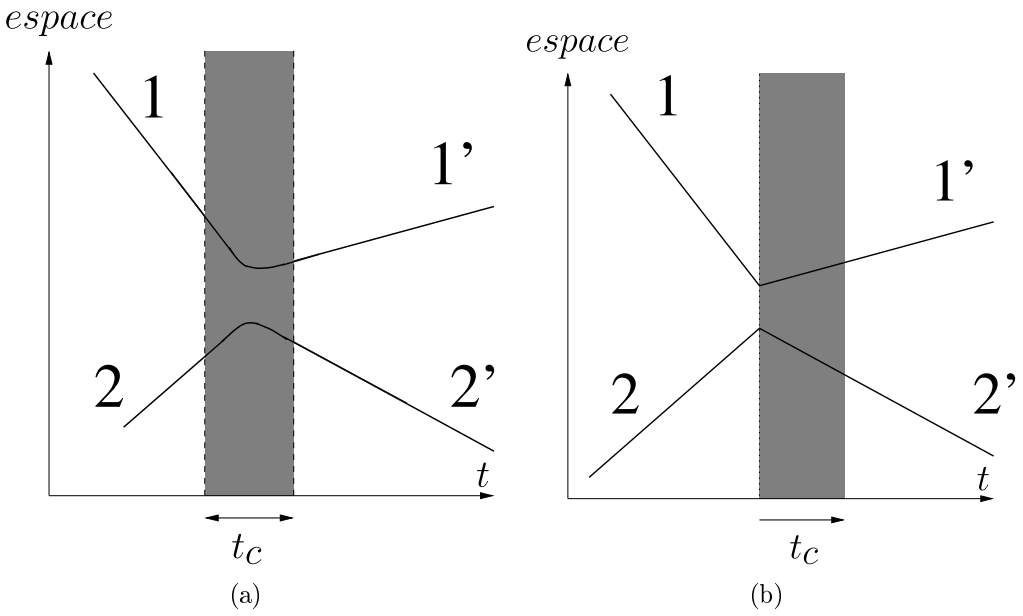


Figure 3.9: *Représentation schématique de la trajectoire de deux particules : (a) lors d'une collision dans le cas d'un modèle de sphères molles, (b) dans le cas d'un modèle de sphères dures.*

est de choisir un coefficient de restitution dépendant de la vitesse d'impact. Cette hypothèse est basée sur des contacts viscoélastiques (*Luding et al.*, 1994b; *Brilliantov et al.*, 1996) ou plastiques (*Thornton*, 1997; *Walton*, 1995). Cette dépendance du coefficient de restitution avec la vitesse a été observée expérimentalement (*Lifshitz et Kolsky*, 1964) et semble éviter l'apparition du collapse. Celui-ci augmente quand la vitesse d'impact décroît. Une manière élégante de remédier au collapse inélastique dans l'implémentation de la méthode Event-Driven est connue sous le nom de modèle TC (*Luding*, 1998a). Cette variante du modèle IHS offre la possibilité de remédier au collapse inélastique, il permet aussi de simuler des contacts à plus de deux particules. Les schémas de la figure 3.9 représentent des trajectoires de deux particules en collision dans le cas d'un modèle de sphères molles et dans le cas d'un modèle de sphères dures.

Lors de la collision entre deux sphères molles, celles-ci interagissent pendant un temps t_c. Cette durée de l'interaction entre les deux sphères est représentée par la zone grisée sur la figure 3.9(a). Dans le cas du modèle IHS, la collision est instantanée. Cependant, le modèle TC implique que, bien que cette collision reste instantanée, les particules qui entrent en collision s'influencent l'une et l'autre pendant un temps t_c après chaque collision comme illustré par la zone grisée du schéma 3.9(b). L'idée générale du modèle TC est de décider si une sphère qui entre en collision avec une voisine est toujours sous l'influence d'une collision précédente. En effet, cela n'a pas de sens de traiter des objets indépendamment les uns des autres si ceux-ci sont, à la précision numérique près, en contact. Dans le même genre d'idée, deux collisions ne peuvent pas être traitées comme deux évènements séparés si elles ont lieu pendant un intervalle de temps inférieur à t_c. Dans de telles situations, le

modèle TC annule la dissipation d'énergie en prenant un coefficient de restitution égal à l'unité (*Luding et al.*, 1996; *Luding*, 1997). Si l'on note t_k la durée depuis la collision $k-1$, le coefficient de restitution normal pour la $k^{\text{ième}}$ collision s'écrit :

$$e_{n_k}^{(i)} = \begin{cases} e_n & \text{pour } t_k^{(i)} \geqslant t_c \\ 1 & \text{pour } t_k^{(i)} < t_c \end{cases} \tag{3.17}$$

Ainsi, une collision devient élastique quand les collisions sont trop fréquentes. Il est possible de choisir une valeur de t_c dépendante de la vitesse relative ou des paramètres du matériau (*Luding et al.*, 1994b; *Brilliantov et al.*, 1996). Dans nos simulations, nous avons choisi une valeur $t_c = 1.0\ 10^{-6}$ s constante, c'est-à-dire de l'ordre de grandeur de la durée d'une collision entre deux grains.

3.5 Traitement de la partie dynamique par la méthode des sphères molles

3.5.1 Idées et motivations

La modélisation de notre expérience par une méthode Event-Driven est très bien adaptée aux systèmes peu denses. Néanmoins, comme nous l'avons vu précédemment, lorsque le nombre de particules est relativement élevé, la méthode devient inadaptée. Pour y remédier, nous avons développé un autre programme permettant la modélisation de notre expérience d'écoulement de petites sphères à l'intérieur d'un empilement de sphères plus grosses. Nous avons choisi pour cela d'implémenter un algorithme de type dynamique moléculaire de sphères molles. Dans cette approche, on considère que les sphères se « déforment » lors d'une collision et que les amplitudes de ces déformations sont petites par rapport aux rayons des sphères. La modélisation de la déformation réelle d'une sphère n'est pas aisée. En conséquence, on fait l'approximation que le contact se fait en un point et l'on relie alors la force d'interaction avec le recouvrement δ des deux particules qui entrent en collision.

3.5.2 Loi de contact entre deux sphères molles

Considérons deux sphères molles i et j, de rayons respectifs R_i et R_j. On suppose que ces deux sphères ont respectivement comme vecteurs vitesses $\overrightarrow{V}_i$ et $\overrightarrow{V}_j$ et des vitesses angulaires $\overrightarrow{w}_i$ et $\overrightarrow{w}_j$. Ces sphères, repérées par les vecteurs $\overrightarrow{r}_i$ et $\overrightarrow{r}_j$ entrent en collision comme représenté sur la figure 3.10. Les deux sphères sont en contact si la quantité δ, représentant le recouvrement entre les sphères i et j, définie par :

$$\delta = R_i + R_j - \left(\overrightarrow{r}_i - \overrightarrow{r}_j\right) \cdot \overrightarrow{n} \tag{3.18}$$

est positive. Comme dans le cas de la collision entre deux sphères dures, nous pouvons définir, par l'équation (3.1), un vecteur unitaire $\overrightarrow{n}$, comme illustré sur la figure 3.10. De même, en utilisant les relations (3.2), (3.3) et (3.4), on peut exprimer les composantes

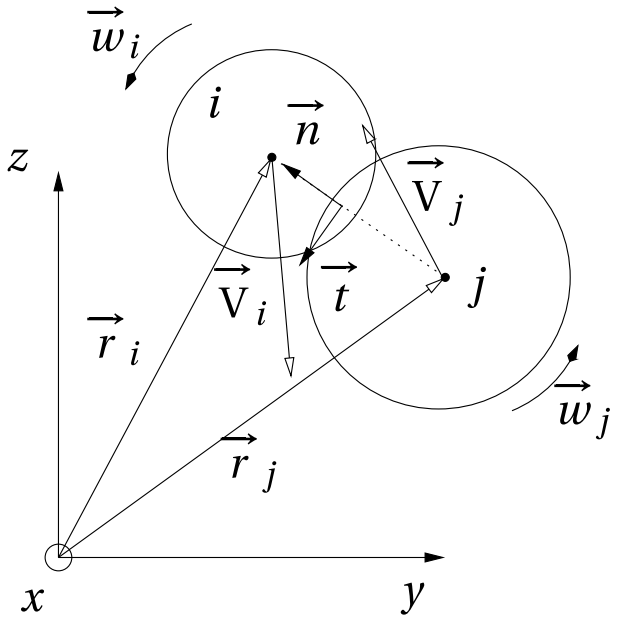


Figure 3.10: *Illustration d'une collision entre deux sphères déformables i et j.*

normale et tangentielle de la vitesse relative de la particule i par rapport à la particule j. Ce qui nous permet de définir un vecteur unitaire $\overrightarrow{t}$ dans la direction tangentielle.

$$\overrightarrow{t} = \frac{\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}}}{\|\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}}\|} \tag{3.19}$$

Dans ces conditions, on peut décomposer la force d'interaction $\overrightarrow{F}_{ji}$ d'une particule j sur une particule i en deux composantes.

$$\overrightarrow{F}_{ji} = \|\overrightarrow{F}^n_{ji}\|\overrightarrow{n} + \|\overrightarrow{F}^t_{ji}\|\overrightarrow{t} \tag{3.20}$$

Composante normale de la force d'interaction

Le calcul de la composante normale de la force $\overrightarrow{F}^n_{ji}$ d'interaction de la particule j sur la particule i est en liaison directe avec la valeur de δ. En 1982, Heinrich Hertz (*Hertz*, 1882) a établi, dans le cadre des petites déformations, une loi reliant la force qui s'exerce entre deux sphères déformables i et j en contact avec le recouvrement δ. Si l'on note E_i, E_j, ν_i et ν_j respectivement les modules d'Young et les coefficients de Poisson des deux sphères, la force qui s'exerce sur la particule i s'écrit (*Landau et Lifschitz*, 1967) :

$$F_{ij}^{Hertz} = \frac{4}{3}\left(\frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j}\right)^{-1}\sqrt{R_{\text{eff}}}\,\delta^{\frac{3}{2}} = k_n\sqrt{R_{\text{eff}}}\,\delta^{\frac{3}{2}} \tag{3.21}$$

avec $k_n = \frac{4}{3}\left(\frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j}\right)^{-1}$ et $R_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}\right)^{-1}$.
Cette force dépend donc du recouvrement entre les deux sphères i et j comme une loi de puissance 3/2. Lorsque les deux sphères i et j sont constituées du même matériau, il est possible de généraliser la loi de Hertz à des contacts viscoélastiques (*Brilliantov et al.*, 1996). La force normale d'interaction entre les deux particules i et j s'écrit alors :

$$F_n = \frac{2E_i\sqrt{R_{\text{eff}}}}{3\left(1-\nu_i^2\right)}\left(\delta^{\frac{3}{2}} + \zeta\sqrt{\delta}\dot{\delta}\right) \tag{3.22}$$

où ζ est une constante dissipative du matériau, fonction de la viscosité de celui-ci. Dans le cas d'un contact entre deux particules de matériaux différents, la partie dissipative de la force normale ne peut pas être résolue de manière simple comme pour la partie élastique.

Linear Spring Dashpot Model (LSD)

Une autre loi couramment utilisée pour le calcul de la composante élastique de la force normale, dans le cadre des faibles déformations, est la loi de Hooke. Si l'on note σ_n la contrainte normale exercée sur le matériau, on a :

$$\sigma_n = E\epsilon_n$$

où ϵ_n est la déformation dans la direction normale. On peut alors écrire que la partie élastique de la force normale est proportionnelle au recouvrement δ. Pour tenir compte de l'inélasticité des collisions, on ajoute un terme dissipatif. Ce genre de modèle est connu sous le nom de « Linear Spring Dashpot Model ». La force d'interaction entre deux particules est représentée sous la forme d'un oscillateur harmonique amorti. Bien qu'en réalité, l'utilisation d'un modèle de force basé sur l'équation (3.22) serait plus appropriée, le modèle de l'oscillateur amorti est couramment employé et les résultats qu'il fournit sont en accord avec les observations expérimentales. C'est ce modèle que nous avons choisi pour modéliser la composante normale de la force d'interaction entre deux particules i et j. Ce modèle présente l'avantage de posséder des solutions analytiques permettant de calculer diverses propriétés du contact. En considérant l'équation (3.18), on peut écrire que :

$$\ddot{\delta} \;= -\frac{\mathrm{d}\overrightarrow{V}^{n}_{r_{ij}}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\overrightarrow{F}^{n}_{i}}{m_i} + \frac{\overrightarrow{F}^{n}_{j}}{m_j} \tag{3.23}$$

avec $\overrightarrow{F}^{n}_{i} = m_i\frac{\mathrm{d}^2\overrightarrow{r}_i}{\mathrm{d}t^2}\cdot\overrightarrow{n}$ et $\overrightarrow{F}^{n}_{j} = m_j\frac{\mathrm{d}^2\overrightarrow{r}_j}{\mathrm{d}t^2}\cdot\overrightarrow{n}$. D'après la troisième loi de Newton, nous avons $\overrightarrow{F}^{n}_{i} = -\overrightarrow{F}^{n}_{j}$ ce qui nous donne :

$$\ddot{\delta} = -\frac{1}{m_{ij}}\overrightarrow{F}^{n}_{i} \tag{3.24}$$

Dans le modèle LSD, la force normale qui agit sur une particule i se décompose en une partie élastique, représentée comme la force exercée par un ressort de raideur k_n.

$$F^n_{\text{el}} = k_n\delta \tag{3.25}$$

Cette force est active quand le recouvrement est positif ($\delta \geqslant 0$). Pour introduire une dissipation dans le système, le modèle LSD utilise une dissipation de type visqueuse, c'est-à-dire une dissipation dépendante de la vitesse.

$$F^n_{\text{diss}} = \nu_n \dot{\delta} \tag{3.26}$$

La force normale d'interaction entre deux particules déformables s'écrit donc :

$$F^n_{\text{LSD}} = k_n \delta + \nu_n \dot{\delta} \tag{3.27}$$

En combinant les équations (3.24), (3.25) et (3.26), on obtient l'équation différentielle caractéristique d'un oscillateur harmonique amorti :

$$\ddot{\delta} + 2\eta\dot{\delta} + \omega_0^2 \delta = 0 \tag{3.28}$$

avec $\eta = \nu_n/(2m_{ij})$ et $\omega_0^2 = k_n/m_{ij}$
Si $\nu_n < 2\sqrt{m_{ij}k_n}$, la solution de (3.28) avec les conditions : $\delta(t=0) = 0$ et $\dot{\delta}(t=0) = V_0$, s'écrit :

$$\delta = V_0 \frac{t_c}{\pi} \exp\left(-\frac{\nu_n}{2m_{ij}}t\right) \sin\left(\frac{\pi}{t_c}t\right) \tag{3.29}$$

où t_c est le temps pendant lequel les particules restent en contact et vaut :

$$t_c = \pi \left(\frac{k_n}{m_{ij}} - \left(\frac{\nu_n}{2m_{ij}}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.30}$$

Le recouvrement maximal $\delta_{\max}$ est alors donné par :

$$\delta_{\max} < \frac{V_0 t_c}{\pi} \tag{3.31}$$

Il est possible ensuite d'exprimer le coefficient de restitution dans la direction normale au contact.

$$\begin{aligned} e_n &= \frac{\left|\dot{\delta}(t_c)\right|}{V_0} \\ &= \exp\left(\frac{-\nu_n t_c}{2m_{ij}}\right) \end{aligned} \tag{3.32}$$

Bien que ce modèle demeure simple et efficace, il peut parfois introduire un artéfact dans la simulation. Considérons la collision entre deux particules déformables comme l'illustre la série de croquis de la figure 3.11. Lorsque les particules sont en contact ($\delta > 0$) et qu'elles s'approchent l'une de l'autre ($\dot{\delta} > 0$), la force décrite par la loi (3.27) est répulsive. A partir d'un moment, sous l'action de cette force répulsive, les sphères finissent par s'éloigner les unes des autres. On a alors $\dot{\delta} < 0$ tout en ayant $\delta > 0$. Dans ces conditions, la force d'interaction est toujours répulsive mais il existe une valeur critique $\dot{\delta}_c$ du taux de déformation au-dessus de laquelle le signe de la force s'inverse. Ceci correspond à une force attractive, bien qu'il y ait toujours contact entre les particules. Ceci entraîne que les

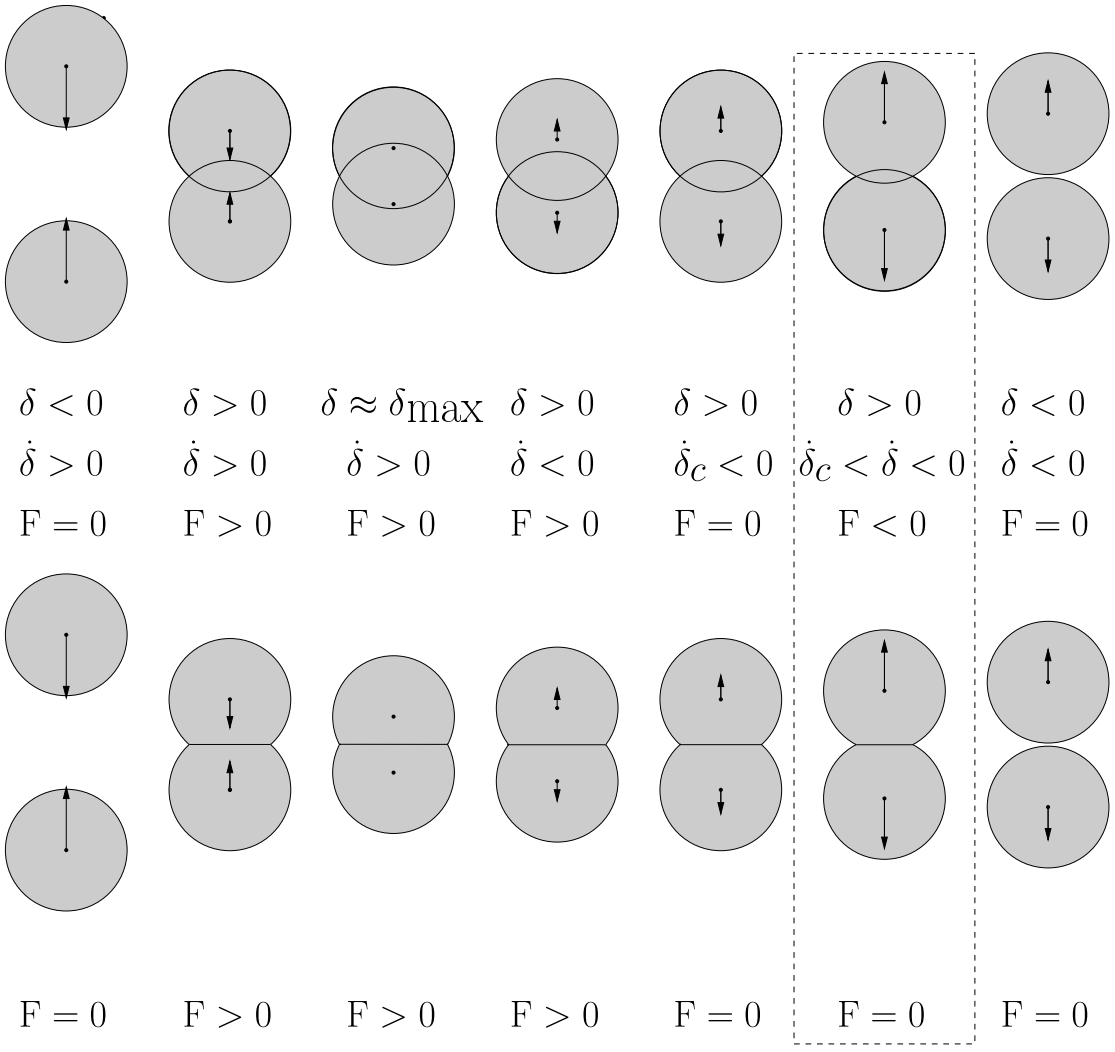


Figure 3.11: *Séquences de schémas d'une collision entre deux particules. La séquence du haut correspond au cas où les deux sphères se recouvrent pendant la collision, tandis que la séquence du bas correspond au cas où les sphères se déforment. Ces séquences illustrent l'artéfact donnant lieu à l'apparition d'une force d'interaction attractive (rectangle en pointillés).*

sphères se détachent avec une vitesse plus faible qu'elles ne le devraient. Ce phénomène n'a évidemment aucun sens physique et doit être traité avec soin dans les simulations de type dynamique moléculaire de sphères déformables. En réalité, il est possible de s'affranchir de cet artéfact. Pour cela, considérons à nouveau nos deux sphères en collisions mais représentons le contact entre nos deux particules de manière plus réaliste. Dans la réalité les sphères ne se recouvrent pas, elles se déforment. Ainsi, lorsque les deux sphères s'éloignent l'une de l'autre, elles retrouvent peu à peu leur forme sphérique. Néanmoins quand le terme $k_n\delta + \nu_n\dot{\delta}$ devient négatif, les centres des deux sphères s'éloignent trop rapidement l'un de l'autre pour pouvoir dire que leurs surfaces restent en contact pendant qu'elles retrouvent leurs formes. Ainsi, bien qu'il y ait recouvrement entre les sphères, on peut considérer les deux particules comme n'étant plus en contact. La force normale d'interaction est alors nulle. Pour éliminer cet artéfact, il est alors judicieux de remplacer la définition (3.27) par :

$$F_n = \max\left\{0, k_n\delta + \nu_n\dot{\delta}\right\} \tag{3.33}$$

Dans le même genre d'idée, *Oden et Martins* (1985) ont développé un modèle général de ressort avec amortissement non linéaire (*Oden et Martins*, 1985; *Luding et al.*, 1994a), néanmoins le modèle linéaire a été largement utilisé et validé par confrontation avec les expériences (*Cundall et Strack*, 1979; *Walton*, 1982; *Pöschel et Herrmann*, 1995).

Le modèle de Walton et Braun

Une autre approche, basée sur l'idée d'une déformation plastique a été développée par *Walton et Braun* (1986). Les auteurs utilisent des valeurs différentes des constantes de raideur suivant que les deux sphères s'approchent ou s'éloignent l'une de l'autre. Ainsi la force normale d'interaction entre deux sphères F^n_{WB} s'écrit :

$$F^n_{\mathrm{WB}} = \begin{cases} k_1\delta & \text{, lorsque } \dot{\delta} \geqslant 0 \\ k_2(\delta - \delta_0) & \text{, lorsque } \dot{\delta} < 0 \end{cases} \tag{3.34}$$

avec $k_1 < k_2$. La figure 3.12 représente la force en fonction du recouvrement entre les sphères. La raideur du ressort pendant la phase d'approche est plus grande que celle dans la phase de détachement. Lorsque le taux de déformation est positif, c'est-à-dire que les centres des particules se rapprochent, la force de répulsion est proportionnelle au recouvrement des deux particules avec comme constante de proportionnalité la constante de raideur k_1 (chemin (a) et (b)). Ceci a lieu tant que le recouvrement est inférieur au recouvrement maximal $\delta_{\max}$ Lorsque les particules se détachent, autrement dit quand le taux de déformation devient négatif (chemin (c)), la force de répulsion diminue jusqu'à atteindre une valeur nulle pour $\delta = \delta_0$. La valeur de δ_0 étant déterminée par l'équation de continuité de la force en $\delta_{\max}$. Avec ce modèle, la durée d'un contact s'écrit alors :

$$t_c = \frac{\pi}{2}\left(\sqrt{\frac{m_{ij}}{k_1}} + \sqrt{\frac{m_{ij}}{k_2}}\right) \tag{3.35}$$

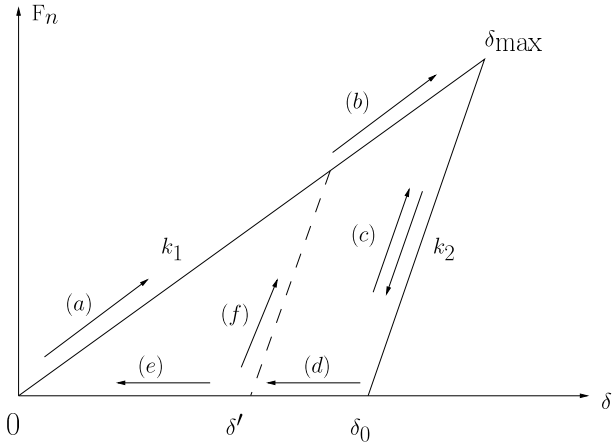


Figure 3.12: *Représentation schématique du modèle de Force de Walton et Braun (Walton et Braun, 1986).*

et le coefficient de restitution a pour expression : $e_n = \sqrt{k_1/k_2}$. Le contact, au sens mécanique du terme, se termine dès que le recouvrement est inférieur à δ_0. Si un autre chargement a lieu avant la fin du contact, la compression suit le chemin $k_2(\delta - \delta_0)$ (chemin (c)). Si ce nouveau chargement a lieu après la fin du contact précédent et avant la séparation complète des deux sphères, la force suit le chemin d'équation $k_2(\delta - \delta')$ (chemin (f)) jusqu'à l'intersection avec la droite $k_1\delta$ qu'elle suit pendant le reste de la phase de compression (chemin (b)). Si un autre contact a lieu après la séparation complète des deux sphères ($\delta < 0$), le chemin emprunté pendant la phase de compression est la droite d'équation $k_1\delta$. Ceci implique que l'on néglige la déformation plastique après la séparation totale des sphères en supposant que la sphère ne peut pas entrer de nouveau en collision exactement au même endroit que précédemment. Le diagramme déformation contrainte de ce modèle, bien que plus réaliste que celui du modèle LSD, ne représente pas correctement le cas réel. Le modèle de Walton et Braun suppose une phase de compression élastoplastique et une décompression plastique. Ce modèle peut être amélioré en incorporant une décompression élastoplastique. *Pournin et al.* (2001) ont ainsi développé un modèle à trois constantes de raideurs.
Le modèle de Walton est utilisé lorsque les déformations des sphères sont importantes. Il convient alors dans ce genre de situations de pouvoir rendre compte de l'histoire des contacts.
Après avoir vu les principaux modèles permettant de modéliser la force d'interaction entre deux particules dans la direction normale, nous allons voir maintenant comment nous pouvons modéliser la composante tangentielle de la force d'interaction.

Modélisation de la composante tangentielle

Une collision entre deux sphères induit généralement une force de cisaillement $\overrightarrow{F}^{t}_{ji}$ dans la direction tangentielle au contact. Ces forces dépendent des propriétés de surfaces des sphères impliquées (rugosité, humidité, adhésion, ...). Tout comme pour la modélisation

de la force normale $\overrightarrow{F}^n_{ji}$, il existe pour la force tangentielle $\overrightarrow{F}^t_{ji}$ différents modèles.

La loi de Coulomb

Le modèle de Coulomb est un modèle phénoménologique (*Coulomb*, 1781). La force dans la direction tangentielle f_F est proportionnelle à la force normale f_N et indépendante de la surface du contact. Supposons un bloc posé sur une surface plane et soumis à une force f dans la direction horizontale comme représenté sur le schéma 3.13. On définit

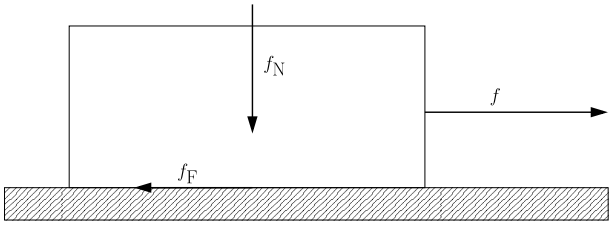


Figure 3.13: *Schéma représentant les forces agissant sur un pavé posé sur une surface plane.*

alors le coefficient de frottement $\mu = f_F/f_N$, qui est une constante sans dimension et dont la valeur est caractéristique du couple de matériau mis en jeu. En général, on se doit de distinguer entre le frottement statique et le frottement dynamique, ce qui impose de définir les coefficients de frottement statique μ_{statique} et dynamique $\mu_{\text{dynamique}}$. On a généralement $\mu_{\text{statique}} > \mu_{\text{dynamique}}$, mais l'approximation $\mu = \mu_{\text{statique}} = \mu_{\text{dynamique}}$ reste raisonnable. Quelques exemples de valeurs de coefficients de frottement pour différents couples de matériaux sont donnés en annexe D.
Dans le cadre du modèle de Coulomb, on peut donc écrire que :

$$\overrightarrow{F}^t_{ji} = -\psi\mu\|\overrightarrow{F}^n_{ji}\|\overrightarrow{t} \tag{3.36}$$

où $\psi = \pm 1$ suivant le sens de $\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}}$. Ce modèle pose inévitablement un problème d'indétermination lorsque la vitesse relative tangentielle est nulle. Nous allons voir dans les modèles suivants comment s'affranchir de cette indétermination.

Le modèle de Haff et Werner

La façon la plus simple de modéliser la force tangentielle est d'utiliser une force visqueuse (*Haff et Werner*, 1986) :

$$\overrightarrow{F}^t_{ji} = -\nu_t\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}} \tag{3.37}$$

La force de cisaillement étant limitée par la loi de Coulomb, La force tangentielle qu'exerce la particule i sur la particule j s'écrit :

$$\overrightarrow{F}^t_{ji} = -\psi\ \min\left(\nu_t\|\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}}\|, \mu\|\overrightarrow{F}^n_{ji}\|\right)\overrightarrow{t} \tag{3.38}$$

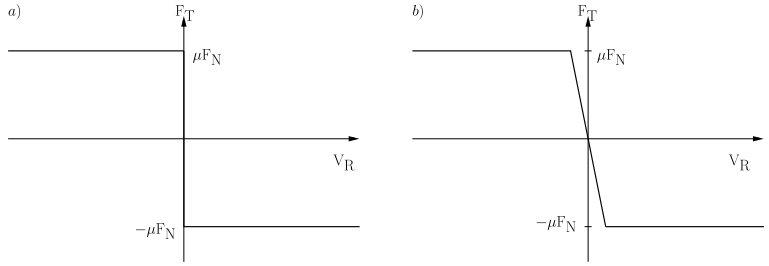


Figure 3.14: *a) Loi de Coulomb, b) loi de Coulomb régularisée par un segment de droite de pente* $-\nu_t$.

Cette méthode revient à régulariser la loi de Coulomb comme illustré sur la figure 3.14(b). Ce genre de modèle de force est couramment utilisé dans la modélisation de système dynamique et donne des résultats fiables. En revanche, en raison du fait qu'il ne prend pas en compte la friction statique, ce modèle n'est pas adapté à la modélisation de systèmes quasi-statiques. Ce modèle fait intervenir la constante ν_t, mais la valeur de celle-ci ne peut être rattachée à aucune propriété du matériau mesurable expérimentalement. La valeur de cette constante doit donc être déterminée a posteriori par confrontation des résultats obtenus par simulations avec ceux obtenus par l'expérience.

Le modèle de Cundall et Strack

Cundall et Strack (1979) ont proposé d'utiliser une loi similaire à la loi de Hooke. Pour cela, ils définissent le recouvrement tangentiel φ :

$$\varphi = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} \overrightarrow{t} \cdot \mathrm{d}\overrightarrow{\ell} \tag{3.39}$$

où t_α et t_β sont respectivement les dates où les sphères entrent en contact et se séparent. $\mathrm{d}\overrightarrow{\ell}$ est le déplacement infinitésimal comme illustré par la figure 3.15.
De la même manière que pour le modèle de Haff et al, on peut définir la force $\overrightarrow{F}^t_{ji}$ par :

$$\overrightarrow{F}^t_{ji} = -\psi \, \min\left(|k_t\varphi| \, , \mu \|\overrightarrow{F}^n_{ji}\|\right) \overrightarrow{t} \tag{3.40}$$

où le terme $\nu_t\|\overrightarrow{V}^t_{r_{ij}}\|$ de (3.38) est remplacé par le terme $|k_t\varphi|$. Tout comme la constante ν_t, il n'y pas de justification théorique pour l'utilisation d'un modèle avec un ressort de raideur k_t. Ce modèle a néanmoins l'avantage, par rapport au modèle de dissipation visqueuse, de prendre en considération l'histoire du contact. C'est pourquoi ce modèle a été souvent utilisé (*Tsuji et al.*, 1992; *Zhang et Campbell*, 1992; *Lee*, 1994; *Risto et Herrmann*, 1994).

Le modèle de Walton et Braun

Une autre manière réaliste de modéliser la force d'interaction tangentielle est le modèle de *Walton et Braun* (1986). Ce modèle est basé sur les résultats de *Mindlin et Deresiewicz*

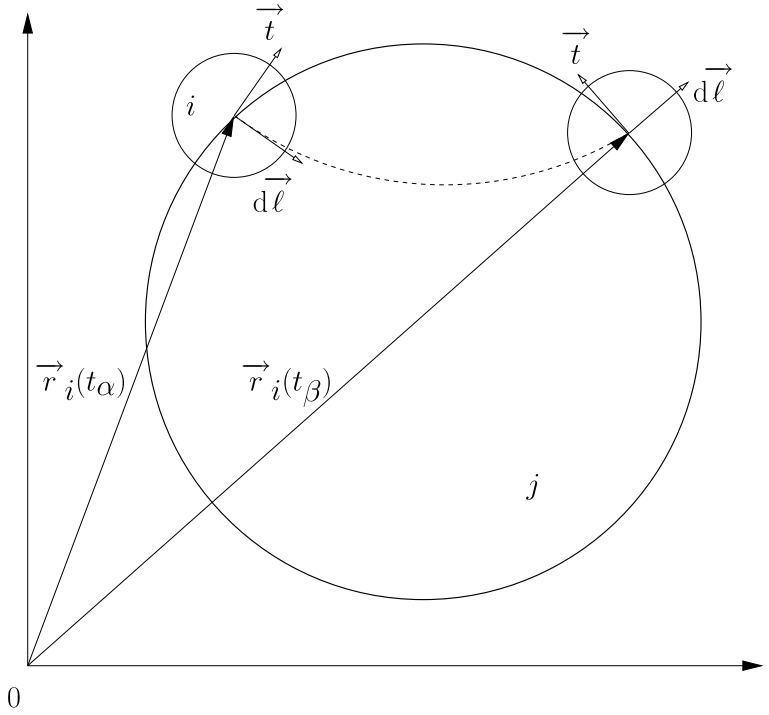


Figure 3.15: *Dans le modèle de Cundall et Strack, on définit le recouvrement tangentiel de la particule i lors de la collision entre deux particules i et j par la relation (3.39).*

(1953) qui considéraient une force normale constante et une force tangentielle pouvant varier. Pour cela, Walton et Braun font l'hypothèse que la force normale varie peu entre deux pas de temps successifs, de manière à ne pas influencer la composante tangentielle de la force. Si l'on note $\overrightarrow{F}^t_{ji}(t-\mathrm{d}t)$, la force tangentielle entre deux particules i et j à l'instant $t-\mathrm{d}t$ et que l'on suppose que les sphères glissent l'une contre l'autre pendant une durée $\mathrm{d}t$, alors la force à l'instant t est donnée par :

$$F^t_{ji}(t) = F^t_{ji}(t-\mathrm{d}t) + \kappa_t \Delta\varphi \tag{3.41}$$

où $\Delta\varphi$ est le déplacement tangentiel relatif de la surface des deux particules. κ_t n'est pas une constante du matériau comme dans le modèle de Cundall et Strack. La valeur de κ_t dépend de la force tangentielle :

$$\kappa_t = \begin{cases} k^0_t \left(1 - \dfrac{F^t_{ji}(t-\mathrm{d}t) - F^\star_t}{\mu F^n_{ji} - F^\star_t}\right)^\gamma & \text{, si } F^t_{ji} \text{ augmente} \\ -k^0_t \left(1 - \dfrac{F^\star_t - F^t_{ji}(t-\mathrm{d}t)}{\mu F^n_{ji} + F^\star_t}\right)^\gamma & \text{, si } F^t_{ji} \text{ diminue,} \end{cases} \tag{3.42}$$

avec γ qui est une constante numérique. k^0_t est la raideur initiale. $F^\star_t$ est la valeur de la force tangentielle lors de la dernière inversion du sens de glissement et elle est initialement nulle. Pour être en accord avec la théorie de Mindlin la valeur de γ vaut généralement 1/3.

Nous avons vu ici les principaux modèles pour implémenter la force tangentielle d'interaction entre deux sphères. Cette liste n'est pas exhaustive et il est tout à fait possible d'utiliser d'autres modèles. On peut par exemple utiliser le modèle LSD pour modéliser la force tangentielle (*Silbert et al.*, 2001). Pour une analyse comparative entre ces différents modèles, le lecteur pourra se reporter à la référence suivante : *Schäfer et al.* (1996).

3.5.3 Principe de l'algorithme

Nous allons maintenant présenter le principe de l'algorithme de dynamique moléculaire de sphères molles.

- initialisation du système
- calcul des forces
- intégration des équations du mouvement
- sauvegarde des positions, vitesses ...

Initialisation du système

Dans un premier temps, nous initialisons le système. Pour ce faire, nous donnons à chaque sphère i une position $\overrightarrow{r}_i$, une vitesse $\overrightarrow{V}_i$ et une masse m_i. Comme dans notre programme utilisant la méthode Event-Driven, les sphères constituant le milieu poreux sont fixes et ont donc une vitesse nulle. D'une manière générale, les sphères qui sont destinées à être lâchées dans le milieu poreux ont également une vitesse initiale nulle. Le système est discrétisé dans le temps par un pas de temps dt pris tel que d$t = t_c/100$.

Calcul des forces

Dans un second temps, nous calculons les forces qui s'appliquent sur chacune des sphères en mouvement (force de pesanteur et forces d'interaction). Pour ce faire, nous avons implémenté quelques-uns des modèles de forces vus à la section 3.5.2
De manière plus précise, nous avons mis en place un modèle de type « Linear Spring Dashpot » pour la force normale. Nous avons donc défini deux constantes de raideurs : $k_{n_{pg}}$ pour les collisions entre une particule et une sphère du milieu poreux et $k_{n_{pp}}$ pour les collisions entre deux particules mobiles. Typiquement, les valeurs choisies sont $k_{n_{pg}} = 2 \times 10^5$ Nm^{-1} et $k_{n_{pp}} = 5 \times 10^5$ Nm^{-1}. Nous donnons ensuite comme paramètres d'entrée du programme les coefficients de restitution dans la direction normale e_{pg} et e_{pp} suivant le type de collision. A partir des équations (3.30) et (3.32), on peut exprimer t_c par :

$$t_c = \left(\frac{\pi^2 + (\log e_n)^2}{k_n} m_{ij} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.43}$$

En combinant ensuite (3.43) et (3.32) on peut en déduire la constante visqueuse ν_n :

$$\nu_n = \frac{2\sqrt{k_n m_{ij}} \log e_n}{\sqrt{(\log e_n)^2 + \pi^2}} \tag{3.44}$$

Pour modéliser la force de friction, nous avons choisi le modèle de Cundall et Strack présenté au paragraphe 3.5.2 avec une dissipation visqueuse comme l'ont fait auparavant *Silbert et al.* (2001). Si l'on considère l'ensemble des équations (3.10), il est possible d'écrire une équation différentielle pour φ de manière identique à (3.23). On a ainsi :

$$\ddot{\varphi} = \frac{\mathrm{d}\overrightarrow{V}^{t}_{r_{ij}}}{\mathrm{d}t} = \frac{7}{2}\left(\frac{\overrightarrow{F}^{t}_{i}}{m_i} - \frac{\overrightarrow{F}^{t}_{j}}{m_j}\right) = \frac{1}{m_{ij}}\frac{7}{2}\overrightarrow{F}^{t}_{i} \tag{3.45}$$

De manière analogue à la résolution du modèle LSD dans la direction normale, on peut exprimer la durée τ du contact dans la direction tangentielle.

$$\tau = \left(\frac{\pi^2 + (\log e_t)^2}{k_t}\frac{2}{7}m_{ij}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.46}$$

Pour assurer la restitution correcte de l'énergie lors d'une collision, il doit y avoir égalité entre les relations (3.46) et (3.43) qui se traduit par :

$$k_t = \frac{2}{7}\left(\frac{\pi^2 + (\log e_t)^2}{\pi^2 + (\log e_n)^2}\right)k_n \tag{3.47}$$

En effet, si tel n'est pas le cas, une partie de l'énergie peut résider dans un des ressorts au moment du détachement. Après avoir fixé k_t par l'équation (3.47), on fixe la valeur de ν_t par une loi similaire à (3.44) en remplaçant k_n par k_t.

Intégration des équations du mouvement

Après avoir calculé l'ensemble des forces, nous devons calculer les nouvelles positions et vitesses de toutes les particules. Il existe de nombreuses méthodes pour intégrer des équations différentielles (*Press et al.*, 1992). Cependant, nous allons présenter les deux techniques les plus couramment utilisées : l'algorithme de Verlet et l'algorithme de Gear.

L'algorithme de Verlet

L'algorithme de Verlet est l'un des algorithmes les plus simples ainsi que l'un des plus efficaces (*Frenkel et Smit*, 1996). Largement utilisé en dynamique moléculaire (*Silbert et al.*, 2001), cette technique d'intégration est connue en Mathématique sous le nom de la méthode de Störmer. Il utilise les positions aux instants t et $t - dt$ ainsi que la force f qui s'exerce sur la particule. Si l'on écrit le développement de Taylor pour la coordonnée x aux instants $t + dt$ et $t - dt$, on a :

$$x(t + \mathrm{d}t) = x(t) + \frac{\partial x(t)}{\partial t}\mathrm{d}t + \frac{f}{m}\frac{\mathrm{d}t^2}{2} + \frac{\partial^3 x(t)}{\partial t^3}\frac{\mathrm{d}t^3}{3!} + o(\mathrm{d}t^4) \tag{3.48}$$

$$x(t - \mathrm{d}t) = x(t) - \frac{\partial x(t)}{\partial t}\mathrm{d}t + \frac{f}{m}\frac{\mathrm{d}t^2}{2} - \frac{\partial^3 x(t)}{\partial t^3}\frac{\mathrm{d}t^3}{3!} + o(\mathrm{d}t^4) \tag{3.49}$$

La somme de ces équations donne :

$$x(t-\mathrm{d}t)+x(t+\mathrm{d}t)=2\,x(t)+\frac{f}{m}\mathrm{d}t^2+o(\mathrm{d}t^4) \tag{3.50}$$

On peut alors exprimer la nouvelle position $x(t+\mathrm{d}t)$ en utilisant les positions à t et $t-\mathrm{d}t$.

$$x(t+dt)=2\,x(t)-x(t-dt)+\frac{f}{m}\,\mathrm{d}t^2 \tag{3.51}$$

La précision sur la nouvelle position est de l'ordre de $\mathrm{d}t^2$ (*Henrici*, 1962). Cet algorithme n'utilise pas la vitesse pour calculer les nouvelles positions. On peut néanmoins calculer cette dernière par :

$$V_x(t)=\frac{x(t+\mathrm{d}t)-x(t-\mathrm{d}t)}{2\,\mathrm{d}t}+o(\mathrm{d}t^2) \tag{3.52}$$

Pour la vitesse, la précision n'est que de l'ordre de $\mathrm{d}t^2$. Cependant, ceci ne constitue pas un réel handicap car, comme nous venons de le dire, la vitesse n'est pas utilisée dans l'algorithme d'intégration.

Les algorithmes d'ordre plus élevé ont tendance à fournir une dynamique aux temps courts de meilleure qualité. Cependant, l'énergie totale du système tend à ne pas rester constante aux temps longs. Au contraire, l'algorithme de Verlet possède la vertu de conduire à une dérive énergétique faible aux temps longs.

La symétrie par renversement du temps contenue dans les équations de Newton est satisfaite par l'algorithme de Verlet. En effet, si l'on change $\mathrm{d}t$ en $-\mathrm{d}t$, l'équation (3.50) reste inchangée. La conséquence de cette propriété est que, si à un instant t de la simulation, on inverse la flèche du temps, la trajectoire de la dynamique moléculaire revient sur ses pas. Évidemment, les erreurs d'arrondi accumulées pendant la simulation limitent la réversibilité, surtout quand le nombre de pas de calcul devient important. La technique du renversement du temps peut être mise en oeuvre pour mesurer l'importance des erreurs d'arrondi dans l'algorithme. Il faut bien noter qu'avec cette technique d'intégration, il est nécessaire de connaître les positions à l'instant précédent. C'est pourquoi l'implémentation de cette technique nécessite d'initialiser les positions à l'instant $t=-\mathrm{d}t$.

L'algorithme de Gear

Un autre algorithme couramment utilisé pour intégrer les équations de Newton est l'algorithme de Gear (*Gear*, 1967, 1971; *Ristow*, 1992; *Luding et al.*, 1994b). Cet algorithme se déroule en deux étapes. Dans un premier temps, on prédit les positions et leurs $n^{\text{ième}}$ dérivées temporelles à l'instant $t+\mathrm{d}t$, par un développement de Taylor. Par soucis de clarté, nous allons présenter uniquement l'intégration des degrés de liberté de translation.

Le principe reste le même pour intégrer la vitesse angulaire des particules.

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{r}_i^{\,\mathrm{pred}} &= \overrightarrow{r}_i(t) + \mathrm{d}t\,\overrightarrow{V}_i(t) + \frac{\mathrm{d}t^2}{2!}\ddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + \frac{\mathrm{d}t^3}{3!}\dddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + \frac{\mathrm{d}t^4}{4!}\ddddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + o(\mathrm{d}t^4) \\
\overrightarrow{V}_i^{\,\mathrm{pred}} &= \overrightarrow{V}_i(t) + \ddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\mathrm{d}t + \dddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\frac{\mathrm{d}t^2}{2!} + \ddddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\frac{\mathrm{d}t^3}{3!} + o(\mathrm{d}t^4) \\
\ddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} &= \ddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + \dddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\mathrm{d}t + \ddddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\frac{\mathrm{d}t^2}{2!} + o(\mathrm{d}t^4) \\
\dddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} &= \dddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + \ddddot{\overrightarrow{r}}_i(t)\mathrm{d}t + o(\mathrm{d}t^4) \\
\ddddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} &= \ddddot{\overrightarrow{r}}_i(t) + o(\mathrm{d}t^4)
\end{aligned}$$

Une fois ces valeurs estimées, on peut calculer la force s'exerçant sur la particule. En effet, celle-ci dépend de $\overrightarrow{r}_i^{\,\mathrm{pred}}$ et de $\overrightarrow{V}_i^{\,\mathrm{pred}}$. Cette simple prédiction conduit inévitablement à des erreurs. L'erreur introduite $\Delta\ddot{\overrightarrow{r}}_i$ peut être mesurée en calculant l'écart entre l'accélération prédite et celle calculée à partir de la force précédemment calculée.

$$\Delta\ddot{\overrightarrow{r}}_i = \frac{\overrightarrow{F}(\overrightarrow{r}_i^{\,\mathrm{pred}}, \overrightarrow{V}_i^{\,\mathrm{pred}})}{m_i} - \ddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} \tag{3.53}$$

La deuxième phase de l'algorithme de Gear permet de corriger les valeurs prédites en ajoutant un nombre proportionnel à l'erreur introduite. Ainsi les valeurs corrigées s'expriment comme :

$$\begin{pmatrix} \overrightarrow{r}_i^{\,\mathrm{corr}} \\ \overrightarrow{V}_i^{\,\mathrm{corr}} \\ \ddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{corr}} \\ \dddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{corr}} \\ \ddddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{corr}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overrightarrow{r}_i^{\,\mathrm{pred}} \\ \overrightarrow{V}_i^{\,\mathrm{pred}} \\ \ddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} \\ \dddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} \\ \ddddot{\overrightarrow{r}}_i^{\,\mathrm{pred}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1\dfrac{1}{\mathrm{d}t} \\ C_2\dfrac{2}{\mathrm{d}t^2} \\ C_3\dfrac{3}{\mathrm{d}t^3} \\ C_4\dfrac{4}{\mathrm{d}t^4} \end{pmatrix} \frac{\mathrm{d}t^2}{2}\Delta\ddot{\overrightarrow{r}}_i$$

où la valeur des coefficients C_n dépend de l'ordre de l'algorithme utilisé et du type de l'équation différentielle (*Allen et Tildesley*, 1989). Ainsi, pour une équation différentielle

du second ordre, les coefficients C_n valent :

	C_0	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
algorithme d'ordre 3	0	1	1			
algorithme d'ordre 4	1/6	5/6	1	1/3		
algorithme d'ordre 5	19/120	3/4	1	1/2	1/12	
algorithme d'ordre 6	3/20	251/360	1	11/18	1/6	1/60

Après cette phase de correction, le système se trouve à l'instant $t + \mathrm{d}t$. Cet algorithme, de part son principe de fonctionnement, est aussi appelé algorithme prédicteur correcteur.

3.6 A la recherche des contacts entre particules

Dans un système de N particules, rechercher les collisions possibles revient à effectuer $N \times (N-1)/2$ tests entre paires de particules à chaque étape de l'algorithme de modélisation. Quelle que soit la technique utilisée cette étape est nécessaire. La recherche des couples de particules pouvant entrer en collision (voir section 3.4), ou étant en collision (voir section 3.5), prend une part importante du temps alloué à la réalisation d'une étape de l'algorithme de simulation. Pour des interactions entre particules de courtes portées, la grande majorité de ces tests est inutile car les particules sont trop éloignées les unes des autres pour avoir une chance d'entrer en collision d'ici quelques pas de temps. Prenons par exemple un système de $N = 2\,000$ particules. Pour procéder à une étape de l'algorithme de simulation, il nous faut réaliser $N \times (N-1)/2 \approx 2\,000\,000$ tests. Pour un système de particules monodisperses, chaque sphère peut avoir au plus 6 contacts. Le nombre de tests réellement nécessaire est donc de $3N = 6\,000$. L'efficacité d'un algorithme de simulation est donc grandement déterminé par l'implémentation d'une technique rapide de recherches des collisions. Il convient alors de trouver des techniques permettant de déterminer parmi les $N \times (N-1)/2$ paires de particules celles qui ont le plus de chances de conduire à une collision entre particules. Nous allons présenter dans cette partie les différentes techniques que nous avons mises en oeuvre pour optimiser le temps de calcul de nos algorithmes de simulations et ceci conjointement pour les deux méthodes de simulation utilisées.

3.6.1 La liste de Verlet

La méthode de la liste de *Verlet* (1967) est basée sur l'hypothèse que le voisinage d'une particule ne change pas de manière brutale. L'idée de cette méthode est donc de créer une liste des particules pouvant interagir et de la conserver pendant un certain temps. Ainsi, pour construire une liste de Verlet, on définit une distance que l'on note L^{Verlet} permettant de fixer (voir figure 3.16) une distance limite au-delà de laquelle on considère qu'une interaction avec la particule i n'est pas envisageable. Cette liste cesse d'être valable quand une particule j s'est déplacée d'une distance supérieure à $\Delta r = 1/2L^{\mathrm{Verlet}} - R_{\max}$ où $R_{\max}$ est le plus grand rayon des particules. En pratique, ce critère de mise à jour de

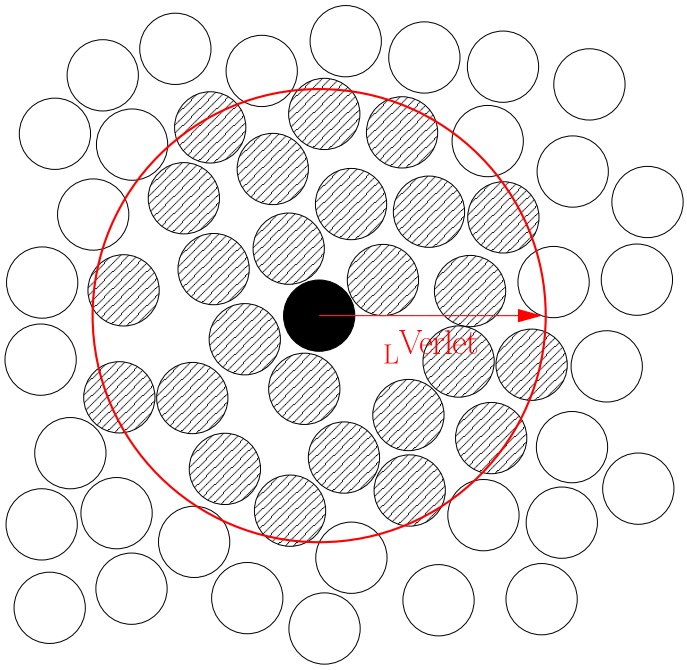


Figure 3.16: *Représentation à deux dimensions du principe de la liste de Verlet. Seules les particules se trouvant à moins d'une distance de L^{Verlet} de la sphère noire ont une chance d'interagir avec elle. Les numéros de ces sphères sont donc stockés dans une liste que l'on appelle liste de Verlet.*

la liste de Verlet est trop strict. En effet, il correspond au cas très improbable qui réunit tous les critères suivants :

- au moment de la construction de la liste de Verlet, les particules i et j sont séparées d'une distance à peine plus grande que L^{Verlet},
- ces particules s'approchent l'une de l'autre suivant la même direction,
- ces deux particules sont les plus rapides du système,
- elles ont la même vitesse leur permettant de se déplacer d'une distance de $L^{\text{Verlet}}/2$.

Comme le coût de la mise à jour de la liste de Verlet est proportionnel à N^2, il est possible d'utiliser un critère de mise à jour moins restrictif. On peut par exemple choisir de mettre à jour la liste de Verlet dès que la particule la plus rapide du système a parcouru une distance supérieure à $1/2L^{\text{verlet}}$ depuis la dernière mise à jour de la liste de Verlet. Il existe un grand nombre de critères pour mettre à jour la liste de Verlet (*Chialvo et Debenedetti*, 1990). La plupart d'entre eux sont basés sur la distance maximale de déplacement d'une sphère.

3.6.2 La méthode des cellules

La méthode la plus simple pour minimiser le nombre de candidats à rechercher pour une éventuelle collision est de diviser l'espace en cellules. Si l'on prend soin de choisir la taille des cellules de telle sorte qu'une sphère peut être incluse entièrement dans une cellule, tous les candidats possibles pour interagir avec cette sphère ne peuvent se trouver que dans les 26 cellules contiguës à la cellule où se trouve cette sphère. L'inconvénient de cette méthode est que l'on se doit de conserver pour chacune des cellules les numéros des sphères qui s'y trouvent. Lors de l'utilisation de cette méthode, il faut donc veiller au choix de la taille des cellules. En effet, il faut faire un compromis sur la taille des cellules. Plus les cellules sont petites, plus la recherche des collisions est rapide. Il y a alors très peu de sphères dans chacune des cellules. En revanche, l'utilisation de cellules trop petites entraîne une utilisation abusive de mémoire. Cette méthode est très facile à mettre en place. Il faut également noter que son utilisation dans un algorithme de type Event-Driven oblige à considérer tout franchissement de cellule par le centre d'une particule comme un évènement pour cette particule. On doit alors déterminer le temps $t^\star$ pour lequel ce changement de cellule intervient et l'inclure dans l'arbre des évènements (voir paragraphe 3.4.3).

3.6.3 La méthode des cellules liées

Pour pallier la consommation excessive de mémoire, il existe une variante de la méthode des cellules appelée la méthode des cellules liées ou bien encore méthode des listes liées. Cette méthode repose sur l'utilisation simultanée de deux listes. Dans une première liste, on stocke le numéro de la particule qui est à la tête de chaque cellule, autrement dit, le numéro de la dernière particule identifiée dans cette cellule. Dans une seconde liste, on stocke les numéros des particules qui se trouvent dans la même cellule. Cette seconde liste établit donc des liens entre les particules d'une même cellule. L'annexe E fournit un exemple de

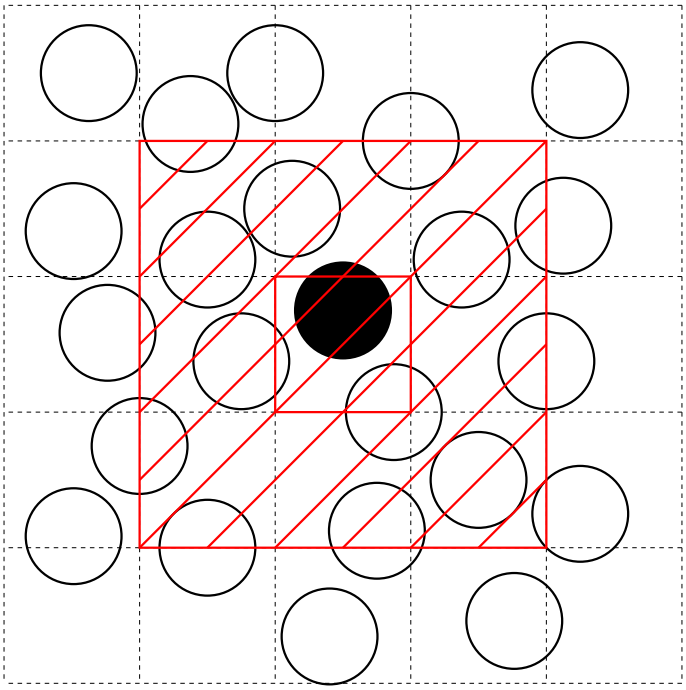


Figure 3.17: *Représentation à deux dimensions de la méthode des cellules. La particule noire ne peut interagir qu'avec les particules dont les centres se trouvent dans la zone hachurée.*

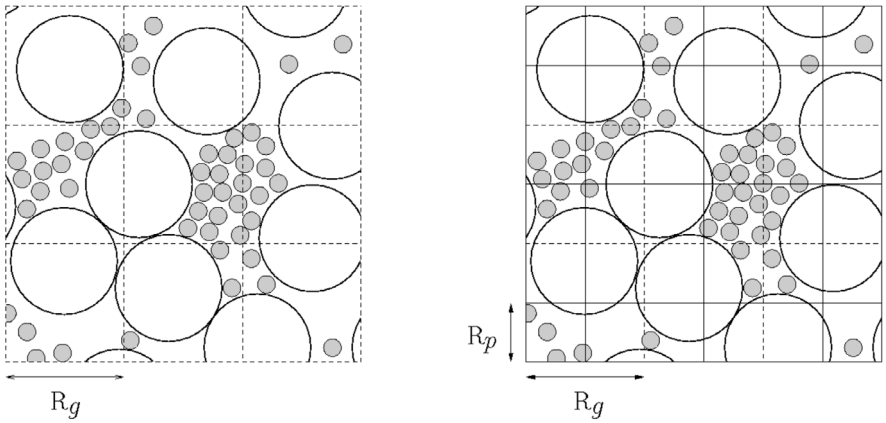


Figure 3.18: *a)Illustration de l'inefficacité d'un simple réseau dans un système bidisperse. b)Illustration de l'utilisation d'un réseau à mailles fines.*

création et d'utilisation des listes intervenant dans cette méthode. Cette variante de la méthode des simples cellules présente l'avantage d'être peu gourmande en mémoire.

3.6.4 Un algorithme à maillage fin

Les techniques vues au paragraphe 3.6.2 et 3.6.3 ont la particularité que la taille des cellules doit être supérieure au plus grand diamètre des sphères. Lorsque les sphères constituant le système étudié ont une grande dispersion de taille, un réseau de taille fixe n'est pas adapté.

Pour fixer les idées, considérons le cas auquel nous nous sommes intéressés dans ce travail de thèse, c'est-à-dire un système constitué principalement de deux tailles de grains. La figure 3.18(a) montre clairement que le choix de la taille des cellules ne convient pas à la recherche des collisions entre petites sphères. Mais la largeur de ces cellules ne peut pas être diminuée sans perdre des informations sur la position des grosses sphères. Dans ce genre de situation, on peut, moyennant quelques précautions, autoriser les sphères à être contenues dans plusieurs cellules et appliquer les méthodes de cellules simples vues précédemment. Néanmoins, ce genre de technique peut poser problème si la taille des cellules R_p est trop petite. En effet, la construction des listes de particules peut entraîner une consommation excessive de mémoire. Ce genre de technique est également mal adaptée avec l'emploi d'une technique de listes liées. En effet, à partir du moment où chaque sphère n'est plus censée être contenue dans une unique cellule, l'identification des sphères à la tête de chacune des cellules et la construction des listes liées avec un lien unique sont compromises.

On peut aussi envisager de conserver le mode d'identification de l'appartenance d'une sphère à une cellule unique (par la position de son centre), mais de changer la manière

de procéder pour identifier les cellules contenant les éventuelles partenaires de collision. Si l'on considère le cas de la figure 3.18(b), le plus grand diamètre des sphères peut couvrir au plus $n_k = (int)(R_g/R_p) + 1$ cellules dans chacune des directions. Ceci peut être aisément implémenté dans un algorithme de type dynamique moléculaire de sphères déformables. On remarque que les cellules contenant les éventuels partenaires pour une collision avec une sphère dont le centre se situe dans la cellule d'indice (I, J) sont les cellules d'indices $(I + k, J + l)$ avec $k, l = \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm n_k$. Évidemment une telle méthode n'est pas adaptée pour la recherche de collisions entre deux petites sphères où $k, l \pm 1$ suffit. Il est donc possible, en prenant soin de différencier les collisions entre sphères de différents rayons, d'améliorer cette méthode en faisant varier n_k selon le type de collisions.

3.6.5 Un algorithme à deux maillages

La remarque précédente sur l'utilisation d'un n_k variable, permet également d'envisager un algorithme à deux maillages. En effet, il est possible, lorsque le système présente plusieurs tailles caractéristiques, d'utiliser plusieurs réseaux de tailles différentes comme schématisé sur la figure 3.19. On utilise un réseau de cellules de taille R_g pour les grosses sphères et un autre réseau de taille R_p pour les sphères de tailles plus petites. Pour pouvoir mettre en place la technique des cellules liées avec ces deux réseaux, il nous faut tout d'abord identifier la position de chaque petite sphère dans chacun des deux réseaux et la position des grosses sphères dans le réseau de taille R_g. On applique ensuite la méthode des cellules liées à chacun des deux réseaux. On obtient alors une liste de liens pour chaque type de particule et deux listes nous donnant le numéro de la dernière sphère identifiée dans chacun des deux réseaux. Connaissant les cellules contenant une petite sphère dans chacun des deux réseaux, il est alors possible d'utiliser les deux listes de liens selon le type de collision recherché.
Pour illustrer ceci, prenons le cas représenté sur la figure 3.19. On cherche à lister les sphères pouvant interagir avec la petite sphère noire. L'utilisation d'une méthode de cellules liées classique comme présentée au paragraphe 3.6.3 nous amènerait à effectuer trente-trois tests de recouvrement dans la zone représentée en bleue sur la figure 3.19. Sept tests de recouvrement avec les grosses sphères et vingt-six tests avec les petites. Si l'on prend soin de mettre en place une liste par type de particule, on peut scinder l'étape de recherche des collisions en deux. Une recherche des recouvrements avec les grosses sphères (appartenant aux cellules bleues) suivi d'une recherche avec les petites sphères (appartenant aux cellules rouges), soit quatorze tests de recouvrement.

3.6.6 Une méthode des cellules à doubles liens

Avant de refermer cette partie sur les méthodes d'optimisation de la recherche des collisions, revenons sur la technique des cellules liées. D'une manière générale, plus la taille des cellules est petite, moins il y a de sphères dans chacune des cellules et donc plus la recherche des collisions est rapide. Cependant ces listes de liens entre sphères cessent d'être valables dès qu'une sphère change de cellule. Ainsi, plus les cellules sont petites, et plus la mise à jour des listes de liens sera longue. En effet, le temps t^{update} nécessaire à la mise à jour est tel

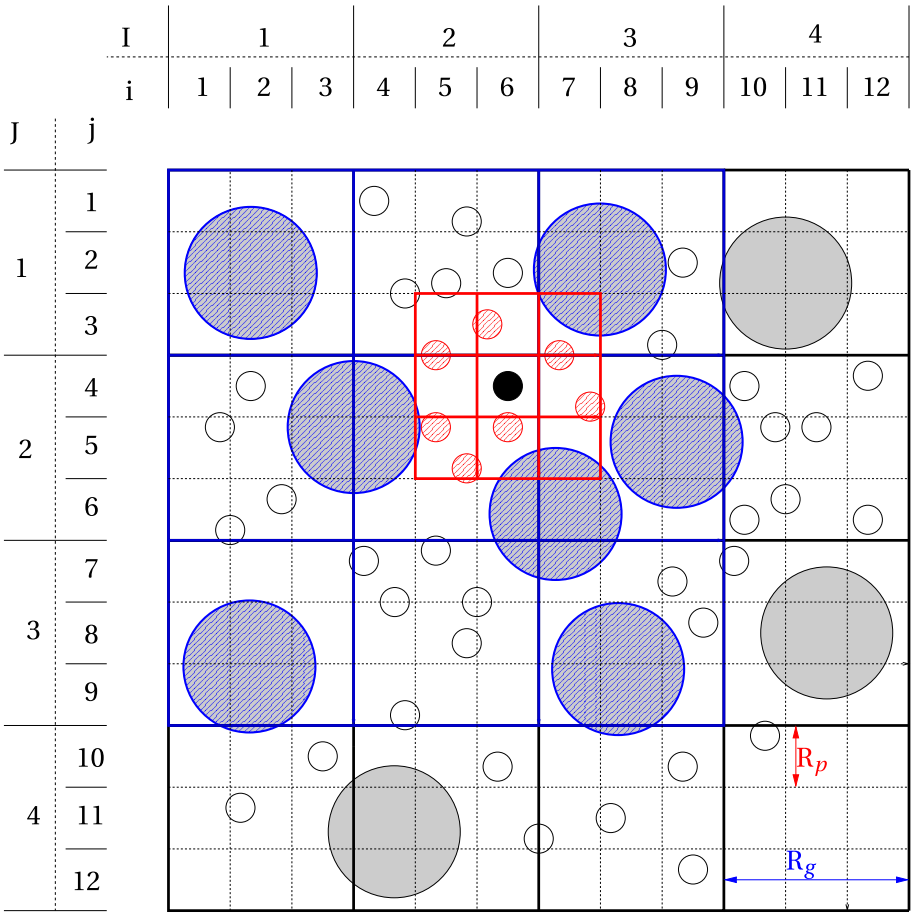


Figure 3.19: *Illustration du principe de la recherche des collisions via deux maillages de tailles différentes.*

que :

$$t^{\text{update}} \propto \underbrace{N_{\text{cell}} + N_{\text{ptc}}}_{\text{réinitialisation}} + \underbrace{N_{\text{ptc}}}_{\text{création}}$$

où N_{cell} est le nombre de cellules et N_{ptc} est le nombre total de particules. Dans le même genre d'idée, la fréquence de ces mises à jour dépend également de N_{ptc} car plus il y a de particules et plus des franchissements de parois de cellules vont avoir lieu. Ceci laisse entrevoir un problème lorsque que le nombre de particules est important et que l'on désire conserver des cellules de petites tailles. Bien que la mise à jour des listes ne soit pas vraiment coûteuse en temps de calcul, on peut atteindre un régime de fonctionnement où les listes de liens doivent être mises à jours à chaque pas de temps. En effet, à chaque pas de temps, au moins une des particules change de cellule. Ce mode de fonctionnement peut être gênant lorsque le nombre de particules est de l'ordre de plusieurs dizaines de milliers. La solution à ce problème serait d'augmenter la taille des cellules. Mais ceci se ferait au détriment de l'efficacité de l'algorithme de recherche des collisions. Pour remédier à ce problème, nous avons mis au point une technique permettant de s'affranchir de la mise à jour des listes de liens. Pour cela nous utilisons une liste à liens doubles et nous la combinons avec la méthode du double maillage vue au paragraphe précédent. Un exemple d'utilisation de cette méthode est présentée dans l'annexe F. L'utilisation de liens doubles permet d'éviter la reconstruction totale de la liste de liens.

Au moyen de la méthode Event-Driven et de la méthode de dynamique moléculaire des sphères molles, nous avons pu reproduire numériquement notre expérience de percolation spontanée d'un grand nombre de grains dans un empilement de sphères plus larges. Nous allons présenter, dans le chapitre suivant, les résultats obtenus.

Chapitre 4 *Résultats numériques*

4.1 Introduction

Les simulations présentées dans le chapitre 3, nous permettent de reproduire numériquement l'expérience du transport de particules à travers un empilement de sphères plus larges. Comme nous l'avons dit précédemment, l'utilisation de la modélisation numérique permet, en plus de pouvoir faire varier aisément différents paramètres de l'expérience, d'accéder à l'intérieur du milieu poreux. Par exemple, la série de clichés présentés sur la figure 4.1 illustre le lâcher d'un empilement de $N = 20\,000$ particules dans un empilement de sphères plus grosses. Nous allons présenter dans ce chapitre les résultats obtenus à la fois par l'approche de type Event-Driven et par l'approche de type dynamique moléculaire de sphères molles. Nous parlerons alors parfois de la méthode ED pour désigner la méthode Event-Driven, et de méthode MD pour désigner la dynamique moléculaire de sphères molles. Nous comparerons ainsi les résultats numériques avec ceux obtenus expérimentalement, que nous avons présentés au chapitre 2, lorsque ces derniers nous le permettront. Les résultats propres aux simulations numériques, c'est-à-dire ceux qui ne pourront être vérifiés par l'expérience bénéficieront ainsi d'une confrontation entre les deux techniques de simulations mises au point au cours de cette thèse.

4.2 Une zone de thermalisation des vitesses

4.2.1 Nature de cette zone

La figure 4.2 montre l'évolution de l'altitude moyenne d'un paquet de 5 000 particules en fonction du temps pour $H/D = 86$, obtenue par la méthode ED. Comme nous l'avons vu dans la partie expérimentale, nous observons que l'écoulement se fait avec une vitesse moyenne de percolation constante, représentée sur cette figure par un ajustement linéaire en traits pleins. On remarque également que, dans la partie haute de l'empilement, le paquet de particules a besoin d'un certain laps de temps pour atteindre une vitesse moyenne de percolation constante. En effet, le nuage de particules subit une décélération en en-

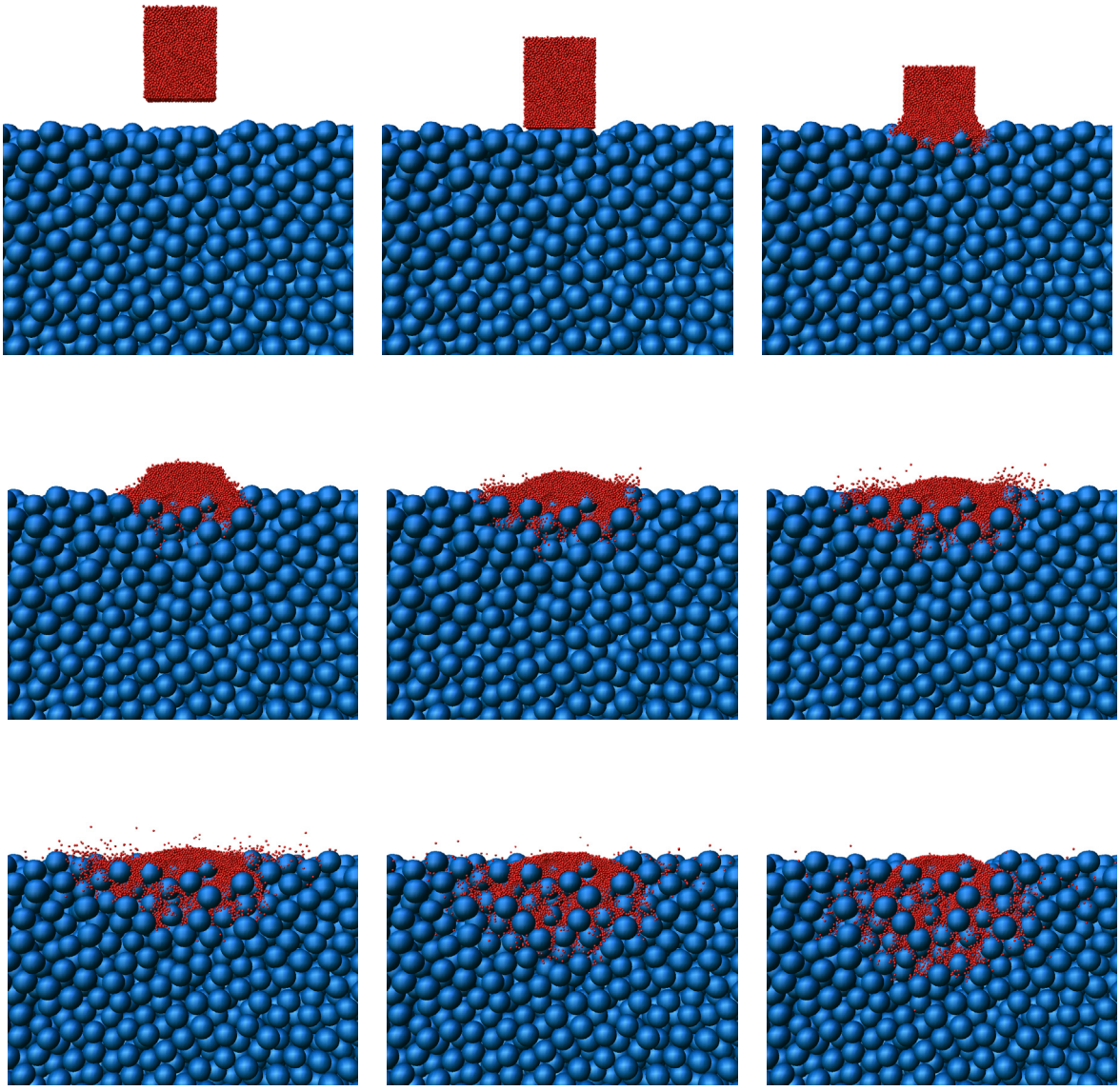


Figure 4.1: *Série de clichés pris à différents instants illustrant la pénétration et l'écoulement de particules dans un milieu poreux via l'utilisation de la modélisation numérique. Pour permettre une visualisation convenable, seulement la moitié du milieu poreux est représentée. Ces illustrations ont été obtenues par la méthode de dynamique moléculaire de sphères molles.*

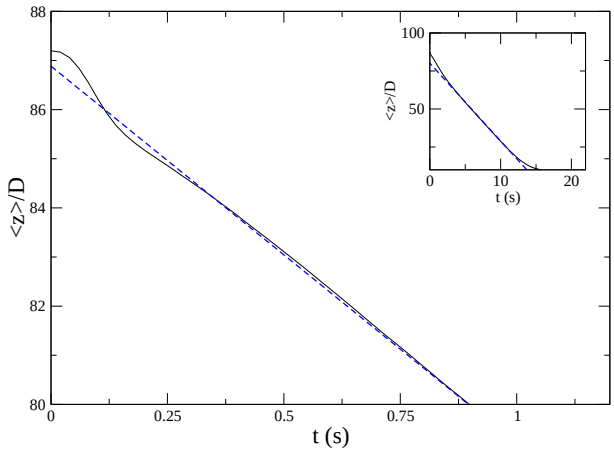


Figure 4.2: *Évolution de l'altitude moyenne d'un empilement de* 5 000 *particules en écoulement en fonction du temps pour* $H/D = 86$. *Ces résultats ont été obtenus par la méthode ED.*

trant dans le milieu poreux puis, via des chocs avec les sphères du milieu poreux ou avec d'autres particules, les particules perdent une fraction de leur énergie et finissent toutes par atteindre une même valeur d'énergie cinétique. Cette zone de l'empilement où les vitesses des particules s'équilibrent traduit bien l'existence d'un régime transitoire dans l'écoulement de petites particules à travers un milieu poreux. Celui-ci est situé dans la partie haute de l'empilement. L'insert de la figure 4.2 représente cette même évolution pour des temps plus longs. Là aussi, il est possible de déterminer une vitesse moyenne de percolation constante correspondant à la vitesse moyenne d'écoulement de particules isolées.

La figure 4.3 montre l'évolution de la vitesse d'écoulement du paquet de 5 000 particules fonction de $t - t_0$, où t_0 est le temps au bout duquel le paquet de particules pénètre dans le milieu poreux. On observe sur la figure 4.3 que le paquet de particules subit une phase d'accélération puis une phase de décélération pour demeurer avec une vitesse moyenne de percolation V_{stat} constante correspondant à la vitesse d'une particule isolée. La présence d'une zone de décélération a déjà été mise en évidence par *Samson* (1997) dans le cas de l'écoulement d'une bille sur un plan incliné à fond rugueux. Cette décroissance exponentielle de la vitesse peut se justifier par le modèle de Langevin. En effet dans ce modèle, l'action d'un fluide sur une particule brownienne peut être modélisée par une force de frottement visqueux caractérisée par un temps de relaxation τ et une force fluctuante, appelée force de Langevin $F(t)$, représentant les collisions entre la particule brownienne et les autres molécules du fluide. Ainsi, si nous raisonnons à une dimension, l'équation du mouvement pour la position de la particule brownienne libre de masse unitaire est donnée par la loi de Newton :

$$\frac{\mathrm{d}V(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\tau} + F(t) \tag{4.1}$$

Si nous supposons que le fluide est dans un état stationnaire, la force de Langevin est une force aléatoire stationnaire ce qui nous permet d'écrire que $\langle F(t) \rangle = 0$. Dans ces conditions,

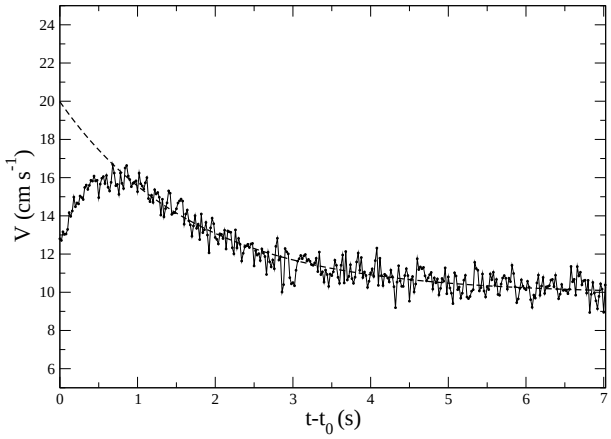


Figure 4.3: *Évolution de la vitesse d'écoulement d'un paquet de* 5 000 *particules en fonction du temps. L'origine des temps* t_0 *est prise au moment où le paquet de particules entre dans le milieu poreux. On constate dans un premier temps une phase d'accélération puis dans un second temps on observe un phénomène de relaxation. Cette relaxation suit une loi exponentielle représentée en pointillés. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type Event-Driven avec* $H/D = 86$.

la solution de l'équation (4.1) s'écrit :

$$V(t) = V_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \int_0^t F(t') \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau}\right) \mathrm{d}t' = V_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \tag{4.2}$$

où V_0 est la vitesse initiale de la particule.

4.2.2 Distribution des temps de passage à une profondeur de l'ordre de 2 tailles de grains

Contrairement au dispositif expérimental, les résultats numériques nous permettent de quantifier et de dissocier l'effet de cette zone de thermalisation du reste de l'écoulement. Pour cela, nous allons définir une hauteur H_{init} correspondant à une profondeur de deux tailles de gros grains à partir du haut de l'empilement. Ainsi, lorsque les particules en écoulement atteignent cette hauteur, nous pouvons affirmer avec certitude qu'elles ont bien pénétré dans le milieu poreux. La figure 4.4 illustre la distribution des temps de passages, que nous notons t_{init}, à la hauteur H_{init} pour un lâcher de 5 000 particules. Nous y mentionnons également les valeurs des coefficients de restitution utilisés. Le coefficient de restitution d'une collision entre une particule et une sphère du milieu poreux est noté e_{pg} (entre « Petite » et « Grosse »). Le coefficient de restitution d'une collision entre deux particules est noté e_{pp} (entre « Petite » et « Petite »). La figure 4.4 traduit un étalement des t_{init} vers les temps longs. Cet étalement provient du fait que toutes les particules ne peuvent franchir simultanément les pores d'entrée qui se trouvent en dessous du point de lâcher. Cet étalement est également nettement visible sur la figure 4.1.

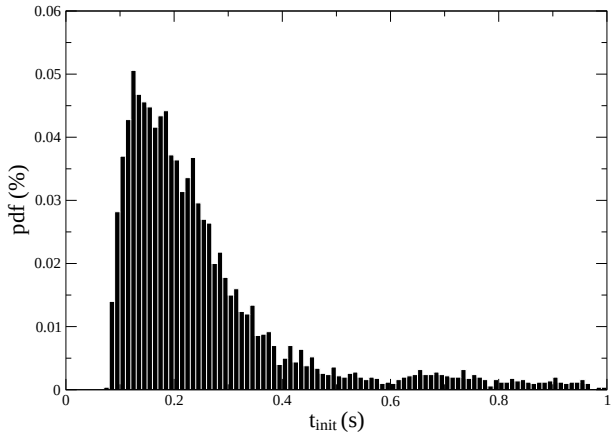


Figure 4.4: *Distribution des t_{init} pour un lâcher de 5 000 particules avec $D/d = 10$, $e_{pg} =$ 0,84, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD.*

4.2.3 Variation du temps moyen de passage à H_{init} en fonction de divers paramètres.

Nous allons voir maintenant comment les différents paramètres tels que le nombre N de particules en écoulements, le rapport de taille D/d ..., influencent la valeur moyenne $\langle t_{\text{init}} \rangle$ de ces temps de passage.

Influence du nombre de particules en écoulement

Nous avons procédé à plusieurs séries d'expériences en faisant varier le nombre de particules lâchées au-dessus du milieu poreux. La figure 4.5 montre l'évolution du temps moyen de transit, moyennée sur plusieurs simulations, en fonction du nombre de particules. On

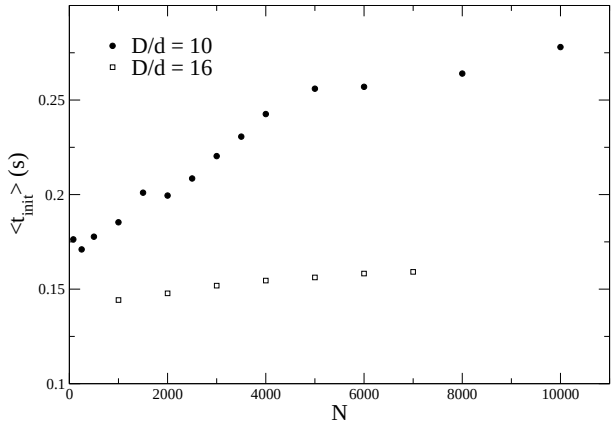


Figure 4.5: *Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du nombre de particules pour deux rapports de taille D/d obtenue par la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

remarque que d'une manière générale, le temps moyen $\langle t_{\text{init}} \rangle$ augmente avec le nombre de particules. Ceci peut aisément se comprendre. En effet, comme les pores d'entrée ont un volume constant, on comprend bien qu'en augmentant le nombre de particules à l'entrée du milieu poreux, on retarde leur injection dans le milieu poreux. Ceci est par exemple visible sur la figure 4.6 qui montre la dispersion des t_{init} pour $N = 500$, $N = 5\,000$ et $N = 8\,000$. La figure 4.5 permet également de distinguer, en plus de cet effet d'encombrement croissant

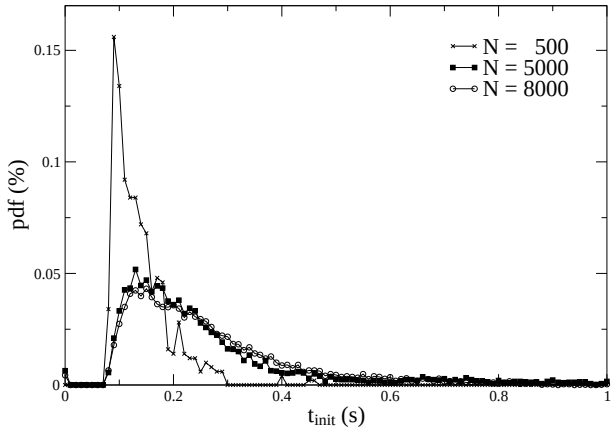


Figure 4.6: *Distribution des t_{init} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement dans la structure poreuse. Ces résultats ont été obtenus avec la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

avec le nombre de particules, deux autres phénomènes bien distincts. Tout d'abord, quand le nombre de particules injectées est de l'ordre de quelques centaines, nous pouvons distinguer une légère diminution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} lorsque nous augmentons le nombre de particules. Ceci peut s'expliquer par le fait que lorsque le volume de petites sphères injectées est faible devant celui des pores, une augmentation du nombre de particules facilite leur entrée dans le milieu poreux en favorisant une perte d'énergie cinétique. Ceci a pour effet de restreindre l'exploration latérale des particules lors de leurs rebonds sur la surface du milieu poreux. Le second phénomène que l'on peut observer est que l'augmentation de $\langle t_{\text{init}} \rangle$ avec N semble ralentir et tendre vers une saturation quand le nombre de particules qui transitent dans la structure devient relativement important. Lorsque les pores sont complètement obstrués, les particules vont alors former un tas sur le haut de l'empilement et en s'écoulant à la surface de ce tas, elles vont tomber dans les pores situés plus à la périphérie. La figure 4.5 permet également de remarquer que la valeur de $\langle t_{\text{init}} \rangle$ est plus faible pour un rapport $D/d = 16$ que pour un rapport $D/d = 10$. Cela traduit une meilleure pénétration dans le milieu poreux pour une même quantité de grains, c'est à dire N_p plus petit.

Influence du rapport de taille

Dans une autre série d'expériences, nous avons étudié l'influence du rapport de taille D/d sur les propriétés de l'écoulement. Pour cela, nous avons fait varier le diamètre des particules

percolantes. La figure 4.7 représente l'évolution du temps moyen de passage à la hauteur H_{init} en fonction du rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N. On remarque que $\langle t_{\text{init}} \rangle$ décroît quand le rapport de taille D/d augmente. Plus les sphères en écoulement ont un diamètre faible, plus le nombre d'entre elles pouvant passer simultanément par les mêmes pores est grand. Ceci explique alors pourquoi le temps moyen de passage à la profondeur t_{init} diminue quand le rapport D/d augmente. Comme ce temps moyen de

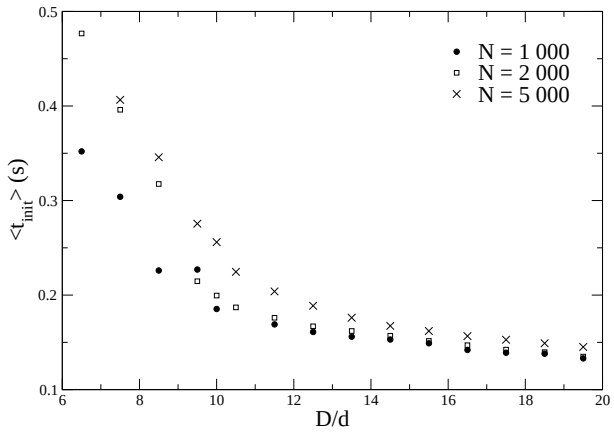


Figure 4.7: *Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du rapport de taille D/d. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

passage dépend de l'encombrement des particules au sein des pores, il peut paraître plus adéquat de représenter l'évolution de $\langle t_{\text{init}} \rangle$ en fonction de $(D/d)^{-3}$. Une telle représentation est visible sur la figure 4.8. Elle montre clairement que le temps moyen de passage à la profondeur H_{init} croît avec le rapport de taille $(D/d)^{-3}$.

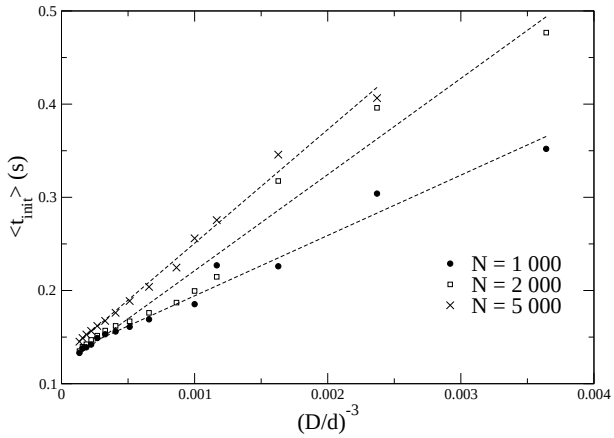


Figure 4.8: *Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction de $(D/d)^{-3}$. Des ajustements linéaires sont également représentés. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

Influence des coefficients de restitution

Il est également intéressant d'observer comment varie le temps moyen $\langle t_{\text{init}} \rangle$ lorsque l'on fait varier la dissipation d'énergie. Pour ce faire, nous avons procédé à une série d'expériences en changeant la valeur des coefficients de restitution. Lorsque des grains transitent dans l'empilement de sphères plus grosses, deux types de collisions interviennent. Nous avons tout d'abord les collisions entre les particules en écoulement et les sphères constituant le milieu poreux, caractérisées par le coefficient de restitution e_{pg}. Le second type de collisions qui peuvent avoir lieu sont des collisions entre deux petites particules. Le coefficient caractéristique de ce type de collisions est le coefficient e_{pp}.

Influence du coefficient de restitution e_{pg}

La figure 4.9 montre l'évolution du temps moyen $\langle t_{\text{init}} \rangle$ en fonction du coefficient de restitution e_{pg} caractéristique de la collision entre une particule en écoulement et une sphère constituant le milieu poreux. Nous constatons que le temps moyen $\langle t_{\text{init}} \rangle$ augmente lorsque la dissipation d'énergie lors d'une collision entre une particule et une sphère du milieu poreux diminue, autrement dit lorsque le coefficient de restitution augmente. Quand le coefficient de restitution est élevé, la thermalisation du système se fait moins rapidement qu'avec un coefficient de restitution faible. Cela explique pourquoi les particules mettent en moyenne plus de temps à atteindre la profondeur H_{init} lorsque la dissipation d'énergie est plus faible.

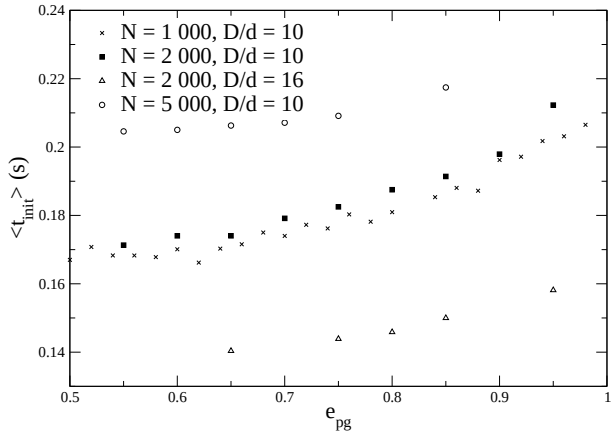


Figure 4.9: *Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement et pour deux rapports de tailles D/d. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{pp} = 0{,}99$.*

Influence du coefficient de restitution e_{pp}

La figure 4.10 montre l'évolution du temps moyen $\langle t_{\text{init}} \rangle$ en fonction du coefficient de restitution e_{pp}. On constate que $\langle t_{\text{init}} \rangle$ est à peu près constant et ne dépend donc pas de la

valeur du coefficient de restitution e_{pp}.

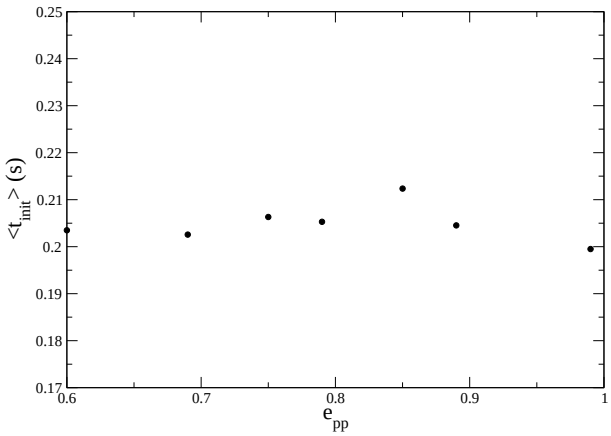


Figure 4.10: *Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du coefficient de restitution e_{pp} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{pg} = 0{,}84$.*

4.3 Le temps moyen de transit

Comme dans le cas du dispositif expérimental, il est possible d'étudier numériquement l'influence de divers paramètres sur le temps moyen de transit. Cependant, comme nous venons de le voir, il est possible de définir pour chaque particule un temps t_{init} correspondant au temps mis par la particule pour atteindre une profondeur H_{init}. La définition de ce temps t_{init} va nous permettre de faire abstraction de la phase de rebond des particules sur la surface du milieu poreux, en définissant le temps de transit de chaque particule comme le temps qu'elle met pour atteindre le bas de l'empilement auquel on soustrait le temps qu'elle met pour atteindre la profondeur H_{init}. Il faut remarquer que cette manière de procéder n'élimine en rien la contribution du régime transitoire des particules dans la partie haute du milieu poreux, et que cette séparation entre la phase de rebond et le reste de l'écoulement n'est pas possible expérimentalement. Les résultats numériques présentés ci-après font donc abstraction de la phase de rebond des particules sur la surface du milieu poreux par le biais de cette méthode.

4.3.1 Influence du nombre de particules

Le temps moyen de transit dépend du nombre de particules N injectées dans la structure poreuse. En réalité, de manière plus évidente, il dépend plus du volume occupé par le paquet de particules en écoulement que du nombre de particules qu'il comprend. Il est donc souvent commode de substituer le nombre de particules N par la grandeur équivalente en volume N_p définie dans la partie 1.3.2. Dans un premier temps, nous avons étudié l'influence du

nombre de particules sur le temps moyen de transit avec notre algorithme de type Event-Driven. La figure 4.11 montre l'évolution du temps moyen de transit en fonction de N_p

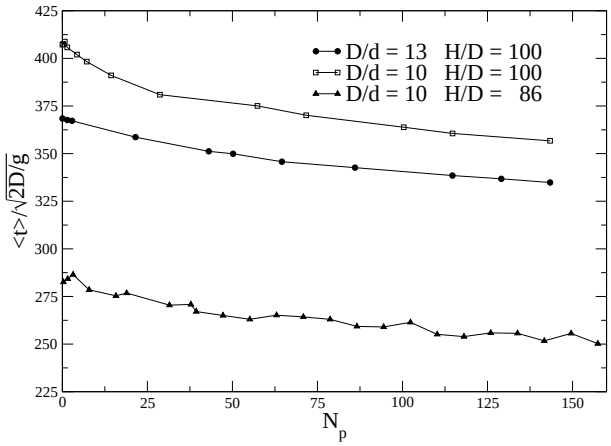


Figure 4.11: *Évolution du temps moyen de transit avec N_p pour différentes hauteurs H. Ces résultats ont été obtenus par la méthode de type Event-Driven avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

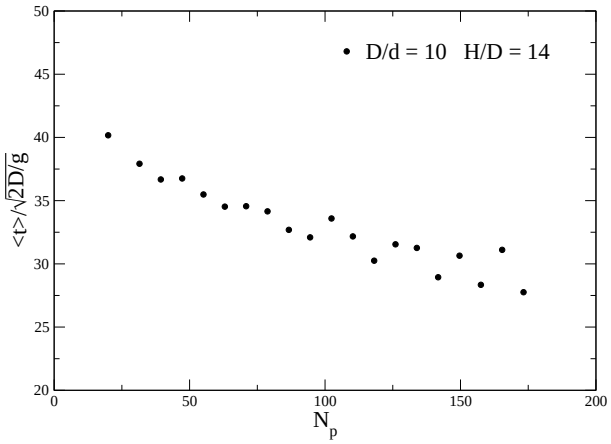


Figure 4.12: *Évolution du temps moyen de transit avec N_p pour $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode de type Event-Driven avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

pour plusieurs valeurs de la hauteur H. Nous observons sur la figure 4.11 que le temps moyen de transit décroît avec le paramètre N_p et qu'il n'est pas possible, contrairement au cas expérimental, de distinguer plusieurs régimes d'écoulements. Cependant, comme nous l'avons dit précédemment, lorsque la hauteur de l'empilement est très grande, comme c'est le cas pour les résultats de la figure 4.11, la mesure du temps moyen de transit des particules intègre plus une mesure du temps moyen de transit de particules isolées que celle de particules en interactions les unes avec les autres. Pour éviter que le paquet de particules ne soit complètement dilué, nous nous sommes donc restreints à des hauteurs telles que

$H/D = 14$, ce qui correspond aux hauteurs utilisées expérimentalement. La figure 4.12 montre l'évolution du temps moyen de transit en fonction de N_p pour $H/D = 14$. Comme sur la figure 4.11, on n'observe pas sur la figure 4.12 plusieurs régimes d'écoulements. Cependant, pour des raisons propres à la méthode Event-Driven il n'a pas été possible de poursuivre cette étude pour des nombres de particules importants et donc pour des valeurs de N_p supérieures à 175. En effet, une des hypothèses de base de la technique Event-Driven est de considérer les collisions comme binaires et instantanées. Nous avons donc développé un autre algorithme de simulation basé sur une technique de type dynamique moléculaire de sphères molles, présentée précédemment à la section 3.5. La figure 4.13 montre donc quant à elle les résultats obtenus par l'algorithme de type dynamique moléculaire de sphères molles. Les résultats présentés sur la figure 4.13 sont à rapprocher des résultats expérimentaux de

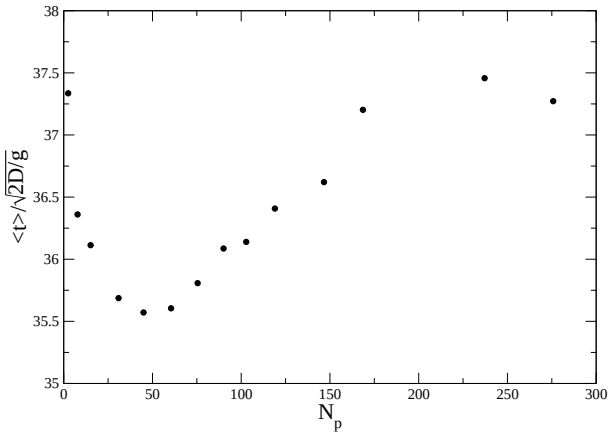


Figure 4.13: *Évolution du temps moyen de transit avec le paramètre N_p. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$.*

la figure 2.14 où l'on observe sensiblement la même évolution du temps moyen de transit en fonction du paramètre N_p. Sur la figure 4.13, les trois régimes d'écoulement mis en évidence expérimentalement sont également observés. Lorsque N_p est inférieur à 40, les particules ont peu de voisines. Lorsque l'on augmente le volume de billes en écoulement, leur voisinage devient plus important. Les particules subissent alors un plus grand nombre de collisions entre elles et il s'ensuit une perte d'énergie cinétique plus importante. Les particules ont alors moins tendance à rebondir latéralement. Lorsque $N_p \approx 50$ les particules en écoulement tombent presque directement dans les pores sous-jacents sans rebondir latéralement. On observe alors le second régime d'équilibre où le temps moyen de transit ne dépend quasiment plus du nombre de particules en écoulement et donc de N_p. Dans ce régime, l'écoulement se comporte comme un écoulement sous gravité. Ce second régime est observable entre $N_p \approx 40$ et $N_p \approx 75$. Lorsque N_p dépasse la valeur de 75, on observe que le temps moyen de transit augmente avec le nombre de particules. Cela caractérise le troisième régime d'écoulement où des effets d'obstructions, provoqués par le nombre important de particules transitant en même temps dans la structure poreuse, apparaissent. Lorsque la valeur de N_p dépasse 200, on observe alors une saturation du temps moyen de transit caractéristique d'un effet « bouchon » dans le milieu poreux. Les particules ne peuvent pas descendre dans

les pores des couches sous-jacentes tant que celles-ci ne sont pas libérées par les particules qui franchissent ses pores en nombre important. Le système se trouve alors complètement obstrué. La légère diminution du temps moyen de transit que l'on observe pour $N_p = 275$ provient d'un manque de données ne permettant pas une bonne statistique. Cette valeur est donc à considérer avec précaution.

4.3.2 Influence du rapport de taille

Comme dans le cas expérimental, nous utilisons, pour nos simulations numériques, un rapport de taille au-dessus du seuil de capture géométrique $D/d \geqslant 6{,}5$. Pour tester l'influence de ce paramètre, nous l'avons fait varier dans une gamme allant de 6,5 à 20 et ce avec les deux techniques de simulations développées au cours de ce travail de thèse. La figure 4.14 présente l'évolution du temps moyen de transit en fonction du rapport de taille D/d obtenue en utilisant une approche de type Event-Driven. La figure 4.15 quant à elle, représente cette même évolution obtenue par une simulation de type dynamique moléculaire de sphères molles. Quelle que soit la technique utilisée, la similitude des résultats entre les

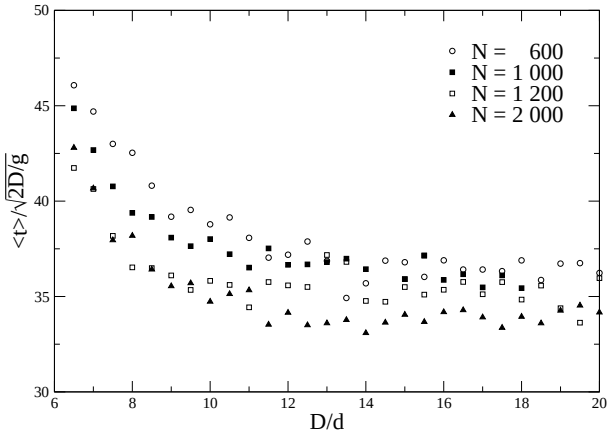


Figure 4.14: *Évolution du temps moyen de transit avec le rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N avec $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus en utilisant la méthode ED avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

courbes 4.14 et 4.15 montre que le comportement est assez général. Plus les particules sont petites, plus elles atteignent rapidement le bas du milieu poreux. Ceci est à rapprocher des résultats expérimentaux présentés sur la figure 2.16. Pour l'expliquer, nous allons considérer la figure 4.16 qui représente l'évolution de la vitesse moyenne de l'écoulement obtenue dans l'état stationnaire en fonction du rapport de taille D/d par les deux techniques de simulations. D'une manière générale, plus les particules sont petites et plus elles descendent rapidement dans le milieu poreux. En effet, la vitesse obtenue dans l'état stationnaire augmente avec le rapport de taille D/d et semble saturer. Cette décroissance des temps moyens de passage avec le rapport D/d a lieu dès la mise en équilibre du nuage de particules dans les premières couches du milieu poreux (voir figure 4.7), et cet effet s'accentue au fur et à mesure que le paquet de particules s'écoule. Néanmoins comme nous le verrons dans la

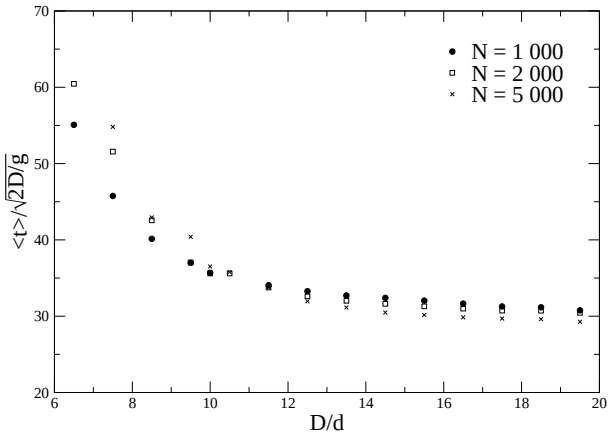


Figure 4.15: *Évolution du temps moyen de transit avec le rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N avec $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus en utilisant la méthode de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

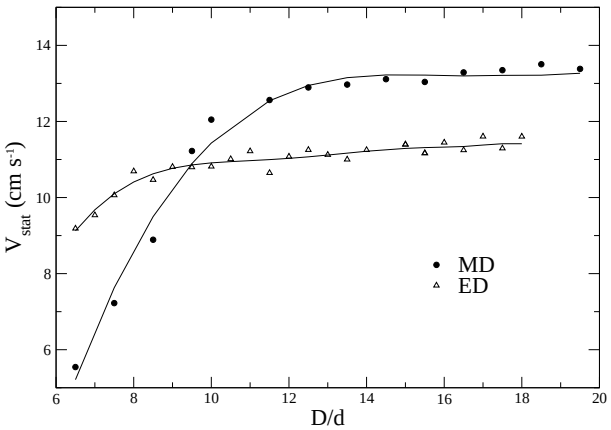


Figure 4.16: *Évolutions de la vitesse moyenne de percolation atteinte dans l'état stationnaire en fonction du rapport de taille D/d pour $N = 1\,000$, $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

suite, le fait de diminuer la taille des particules percolantes favorise également leur dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Ainsi, lorsque la taille des particules est suffisamment petite, un équilibre s'installe entre l'écoulement dans la direction longitudinale et l'étalement dans la direction transversale. Ceci explique pourquoi, sur les figures 4.14 et 4.15 le temps moyen de transit est de moins en moins dépendant du rapport D/d quand celui-ci dépasse un certain seuil. Pour les mêmes raisons qui nous avaient poussés à représenter $\langle t_{\text{init}} \rangle$ en fonction de $(D/d)^{-3}$, nous avons tracé la dépendance du temps moyen de transit, obtenue par la technique MD, en fonction de $(D/d)^{-3}$. Ceci est représenté sur la figure 4.17. Nous pouvons constater que le temps moyen de transit augmente de manière quasi linéaire lorsque l'encombrement augmente.

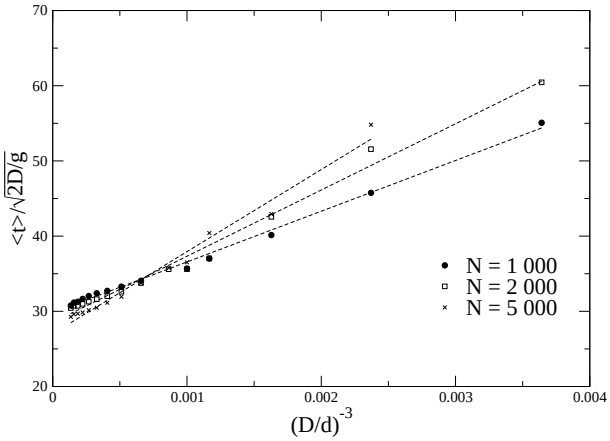


Figure 4.17: *Évolution du temps moyen de transit en fonction de $(D/d)^{-3}$ pour différentes valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

4.3.3 Influence des coefficients de restitution

Nous avons ensuite procédé à une série d'expériences en faisant varier les valeurs des coefficients de restitution e_{pg} et e_{pp}, qui sont respectivement les coefficients de restitution d'une collision entre une sphère en écoulement et une sphère constituant le milieu poreux, et celui d'une collision entre deux petites sphères en écoulement.

Influence du coefficient de restitution e_{pg}

Nous présentons donc l'évolution du temps moyen de transit en fonction du coefficient de restitution e_{pg}. Les résultats obtenus par notre programme de simulation utilisant la méthode ED sont présentés sur la figure 4.18 tandis que ceux obtenus par la méthode des sphères molles sont présentés sur la figure 4.19. Les figures 4.18 et 4.19 montrent que les résultats sont similaires quelle que soit la technique de simulation utilisée. Lorsque le coefficient de restitution e_{pg} caractéristique de la collision entre une particule en écoulement

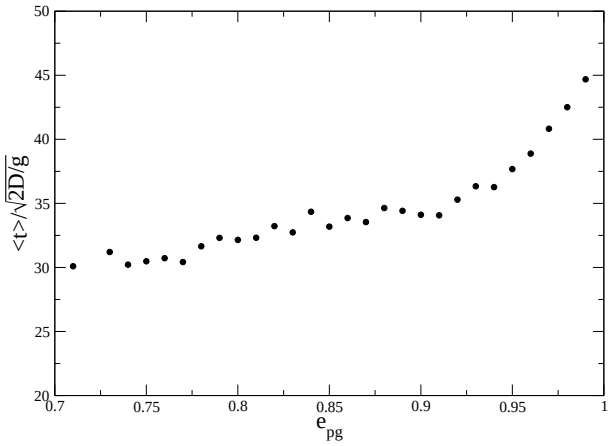


Figure 4.18: *Évolution du temps moyen de transit avec le coefficient de restitution e_{pg} obtenue par une simulation de type Event-Driven avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

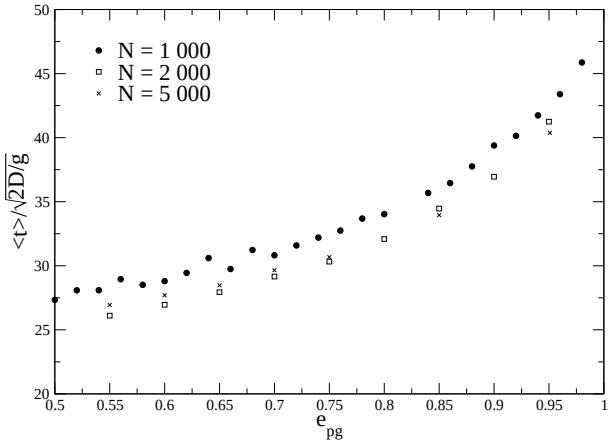


Figure 4.19: *Évolution du temps moyen de transit avec le coefficient de restitution e_{pg} obtenue par la simulation de type MD. Nous présentons les résultats pour différents nombres de particules N avec $H/D = 14$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $D/d = 10$.*

et une sphère du milieu poreux augmente, le temps moyen de transit du paquet de particules augmente. Comme pour les raisons évoquées précédemment, lors de l'étude du temps moyen de passage à une profondeur $\langle t_{\text{init}} \rangle$, plus la dissipation d'énergie est faible et plus les particules sont amenées à explorer latéralement l'empilement. Ceci explique pourquoi le temps moyen de transit augmente avec e_{pg}. La figure 4.20 montre l'évolution du temps

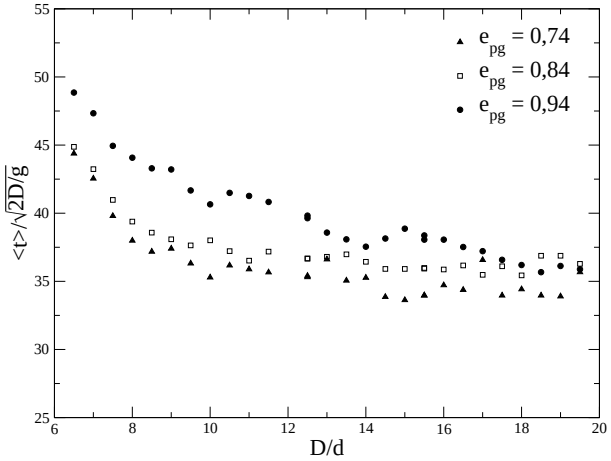


Figure 4.20: *Évolution du temps moyen de transit en fonction du rapport de taille pour différentes valeurs du coefficient de restitution e_{pg}. Ces résultats ont été obtenus avec l'algorithme de type Event-Driven pour un écoulement de $N = 1\,000$ particules avec $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

moyen de transit en fonction du rapport de taille D/d obtenus par la méthode Event-Driven et ce pour différentes valeurs du coefficient de restitution e_{pg}. Il est important de noter que l'augmentation du temps moyen de transit avec e_{pg} semble moins nette pour les valeurs de D/d proche de 20 que pour les rapports de tailles de l'ordre de 10. La figure 4.21 montre l'évolution de la vitesse mesurée dans l'état stationnaire en fonction de $(1-e_{\text{pg}})^{1/4}$. On constate alors que l'évolution est linéaire. Ceci est en accord avec les résultats observés précédemment par *Wilkinson et Edwards* (1982), et présentés au chapitre 1 dans la partie 1.6.2, dans le cas d'un écoulement d'une seule particule. Ceci étend donc la validité de l'évolution linéaire de la vitesse moyenne de percolation avec $(1 - e_{\text{pg}})^{1/4}$, dans le cas de l'écoulement simultané de plusieurs particules.

Influence du coefficient de restitution e_{pp}

La variation de la vitesse moyenne d'écoulement mesurée dans l'état stationnaire avec e_{pp} par la méthode Event-Driven est présentée sur la figure 4.22. Les résultats obtenus par la méthode de dynamique moléculaire de sphères molles sont quant à eux représentés sur la figure 4.23. Les figures 4.22 et 4.23 montrent que plus le coefficient de restitution e_{pp} est grand, plus la vitesse moyenne de percolation mesurée dans l'état stationnaire diminue. La figure 4.22 qui illustre cette dépendance pour $N = 1\,000$ et $N = 2\,000$ montre que cette dernière dépend également du nombre particules qui transitent dans la structure. En effet,

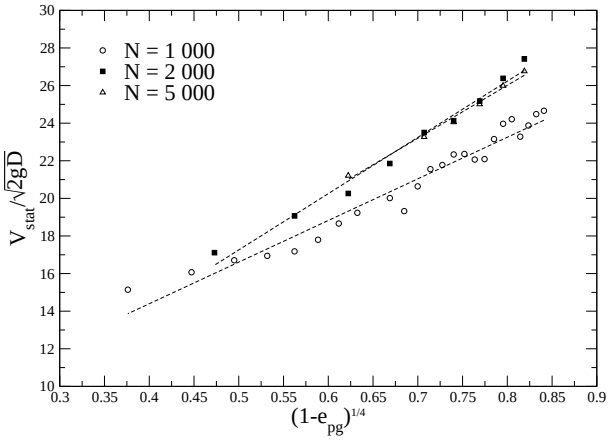


Figure 4.21: *Évolution de la vitesse moyenne adimensionnée, mesurée dans la partie stationnaire, en fonction de* $(1 - e_{pg})^{1/4}$ *pour différentes valeurs de* N *avec* $e_{pp} = 0{,}99$, $H/D = 14$ *et* $D/d = 10$. *Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD.*

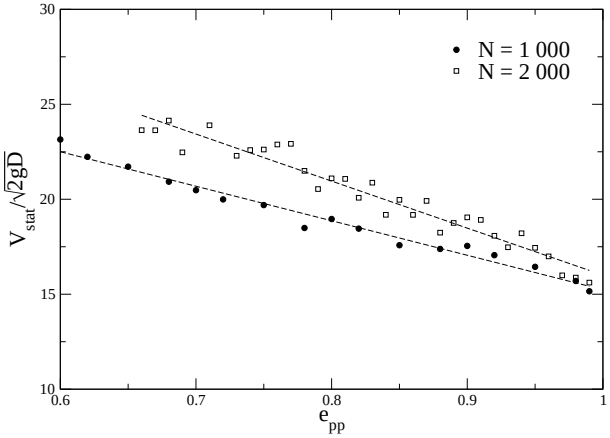


Figure 4.22: *Évolution de la vitesse moyenne de percolation adimensionnée, mesurée dans l'état stationnaire, en fonction du coefficient de restitution* e_{pp} *pour* $N = 1\,000$ *et* $N = 2\,000$ *via la méthode ED avec* $H/D = 14$, $D/d = 10$ *et* $e_{pg} = 0{,}84$.

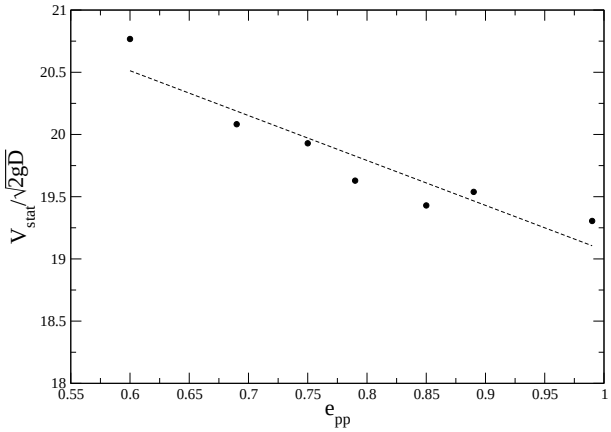


Figure 4.23: *Évolution de la vitesse moyenne de percolation adimensionnée, mesurée dans l'état stationnaire, en fonction du coefficient de restitution e_{pp} via la méthode de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$, $N = 2\,000$ et $D/d = 10$.*

plus le nombre de particules qui transitent dans la structure est grand, plus le nombre de collisions entre deux particules est important et donc plus l'influence du coefficient de restitution e_{pp} se fait sentir. C'est pourquoi, on remarque sur la figure 4.22 que la décroissance de la vitesse moyenne dans l'état stationnaire avec e_{pp} est moins prononcée pour $N = 1\,000$ que pour $N = 2\,000$.

4.4 Dispersion des billes au sein de l'empilement

Contrairement au dispositif expérimental, la simulation numérique nous permet d'avoir accès à la position des particules à l'intérieur du milieu poreux. Il est donc possible de suivre le déplacement des particules au cours de l'écoulement. Nous nous sommes intéressés à la dispersion de ces dernières dans le milieu poreux et nous allons maintenant présenter les résultats que nous avons obtenus.

4.4.1 Allure de la distribution de positions des particules dans l'empilement

La figure 4.24 montre la dispersion des particules au cours du temps. On observe qu'au début du processus, la tache de dispersion présente une queue dirigée vers le haut de l'empilement traduisant un retard d'une certaine quantité de particules. Cela s'explique par le fait que lors du lâcher, la majorité des particules transitent par les mêmes pores. Le volume des pores étant assez faible, comparativement au volume de particules en écoulement, elles doivent passer les unes après les autres. Au bout d'un certain temps, cette queue disparaît et la tache de dispersion devient uniforme. Sur la figure 4.24, on voit la disparition de la queue pour $t > 3{,}8$ s. La figure 4.25 et la figure 4.26 illustrent respectivement la fonction de densité de probabilité de la position des particules dans les directions longitudinale et transversale.

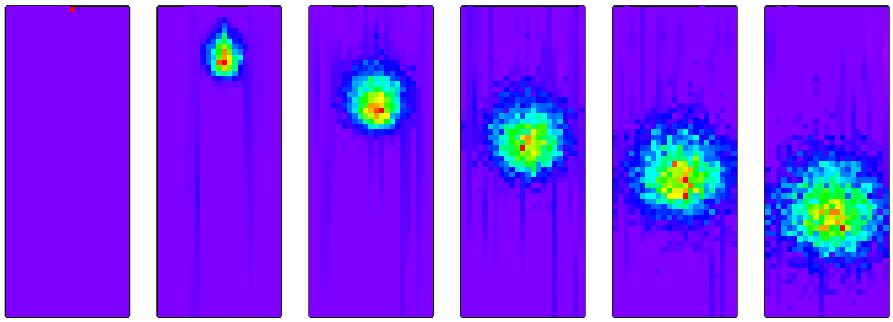


Figure 4.24: *Allure de la dispersion de* 4 000 *particules dans la direction de l'écoulement (*$t = 0$, $t = 1{,}8$ s, $t = 3{,}8$ s, $t = 5{,}8$ s, $t = 7{,}8$ s *et* $t = 9{,}8$ s*).*

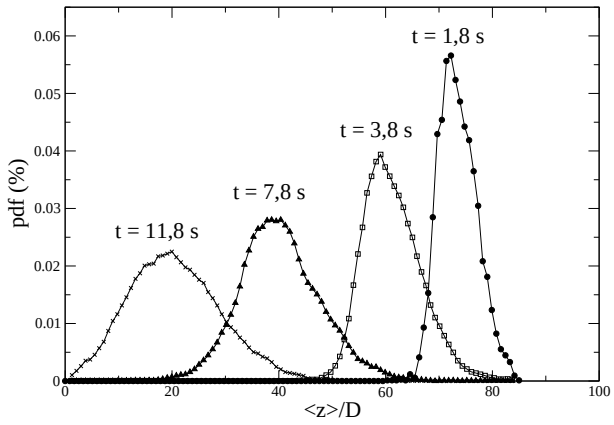


Figure 4.25: *Distribution des particules dans la direction de l'écoulement. Ces résultats ont été obtenus via l'utilisation de la méthode ED avec* $N = 8\,000$, $H/D = 86$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$ *et* $e_{pp} = 0{,}99$.

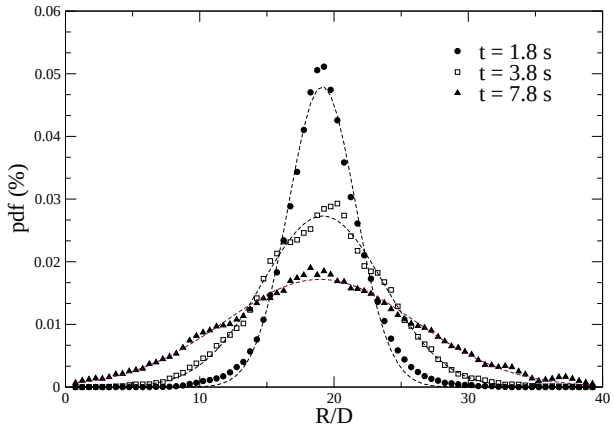


Figure 4.26: *Distribution des particules dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Ces résultats ont été obtenus via l'utilisation de la méthode ED avec* $N = 8\,000$, $H/D = 86$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$ *et* $e_{pp} = 0{,}99$. *Des ajustements gaussiens sont également représentés.*

4.4.2 Détermination du coefficient de dispersion

La simulation numérique nous permet d'accéder aux positions des particules à l'intérieur du milieu poreux et ce à chaque instant. Si l'on note R_k la position d'une particule k dans le plan de l'écoulement telle que $R_k^2 = x_k^2 + y_k^2$, où x_k et y_k sont les positions de la particule k dans chacune des deux directions du plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement, on peut calculer la variance de la distribution des positions des N particules dans le plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement par la somme :

$$\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(R_k - \langle R \rangle \right)^2 \tag{4.3}$$

où $\langle R \rangle = \dfrac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} R_k$.

De la même manière, si l'on note z_k la position d'une particule dans la direction de l'écoulement, on a :

$$\left\langle (\Delta z)^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(z_k - \langle z \rangle \right)^2 \tag{4.4}$$

avec $\langle z \rangle = \dfrac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} z_k$.

La figure 4.27 montre l'évolution temporelle de la variance des positions dans la direction perpendiculaire à l'écoulement pour un paquet de 8 000 particules. La figure 4.28 présente quant à elle celle de $\langle (\Delta z)^2 \rangle$, obtenue dans les mêmes conditions que la figure 4.27. Des ajustements linéaires sont également représentés sur les figures 4.27 et 4.28. La linéarité de la variance avec le temps est caractéristique d'un phénomène diffusif. L'écart observé avec un tel ajustement pour les grandes valeurs de t provient du fait que pour ces valeurs de

temps, des particules ont déjà atteint le bas de l'empilement et les calculs de $\langle(\Delta R)^2\rangle$ et $\langle(\Delta z)^2\rangle$ sont alors biaisés. L'écart avec l'ajustement linéaire que l'on peut observer pour les faibles valeurs de t, aussi bien sur la figure 4.27 que la figure 4.28, traduit le laps de temps nécessaire au système pour atteindre un comportement diffusif.
On montre que pour un phénomène diffusif, la variance permet de remonter à la valeur des coefficients de diffusion. En effet, on a :

$$\left\langle(\Delta R)^2\right\rangle = 4D_{\perp}t \tag{4.5}$$

et

$$\left\langle(\Delta z)^2\right\rangle = 2D_{//}t \tag{4.6}$$

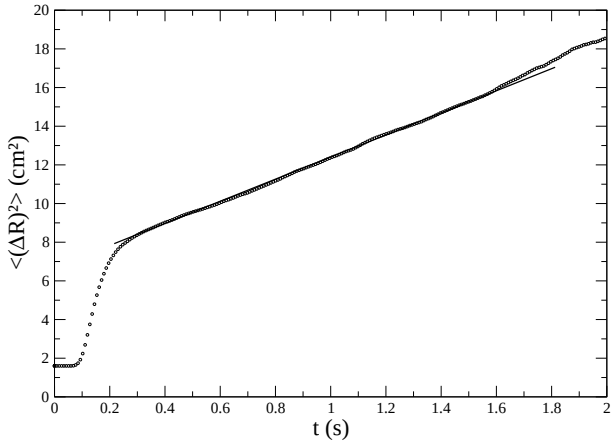


Figure 4.27: *Évolution de $\langle(\Delta R)^2\rangle$ avec t obtenue via la méthode MD avec $N = 8\,000$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$.*

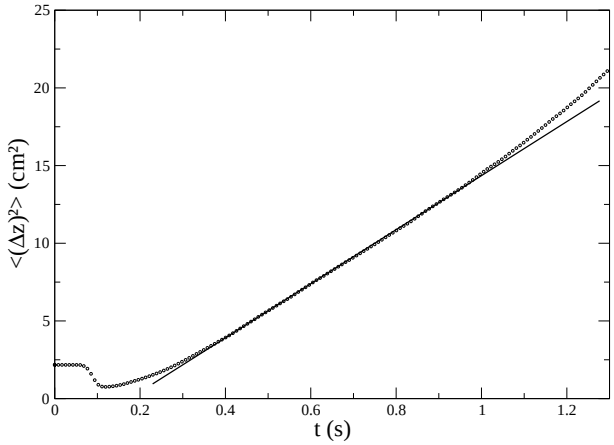


Figure 4.28: *Évolution de $\langle(\Delta z)^2\rangle$ avec t obtenue via la méthode MD avec $N = 8\,000$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$.*

4.4.3 Évolution des coefficients de dispersion en fonction du nombre de particules

En suivant la méthode présentée au paragraphe précédent, nous avons déterminé les coefficients $D_{//}$ et $D_{\perp}$ pour différents nombres de particules injectées dans l'empilement de sphères plus grosses, exprimés en terme de volume via le paramètre N_p. La figure 4.29 présente les résultats obtenus en utilisant notre modèle de sphères molles. La figure 4.29

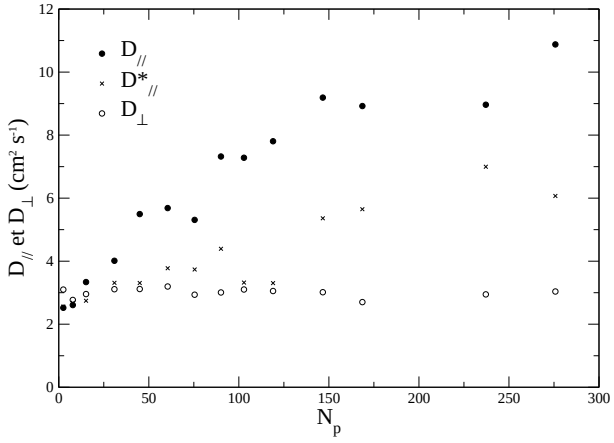


Figure 4.29: *Évolution des coefficients de dispersion en fonction de N_p pour un rapport de taille $D/d = 10$. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

révèle que le coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement est très peu dépendant du nombre de particules injectées. En revanche, on constate que le coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement augmente lorsque le nombre de particules augmente. Nous avons également représenté, sur la figure 4.29, le coefficient de dispersion dans la direction longitudinale obtenu en utilisant un ajustement des courbes d'élutriation par la loi (2.2). Nous avons reproduit la même série d'expériences avec un rapport de taille $D/d = 16$. Les résultats obtenus dans cette configuration, plus proche de la configuration expérimentale que la configuration précédente, sont présentés sur la figure 4.30. A la différence des résultats présentés sur la figure 4.29, on constate très nettement une augmentation de la valeur du coefficient de dispersion $D_{\perp}$ avec N_p. Ceci est à rapprocher des résultats expérimentaux présentés sur la figure 2.24. Néanmoins, pour que la concordance avec ces résultats soit complète, une étude avec de plus amples valeurs de N_p pour $D/d = 16$ est nécessaire. Comme nous venons de le voir en comparant les figures 4.29 et 4.30, la dispersion des particules dépend donc directement du rapport de taille D/d.
Nous allons maintenant présenter, dans la partie suivante, l'influence de ce rapport de taille sur la dispersion des particules.

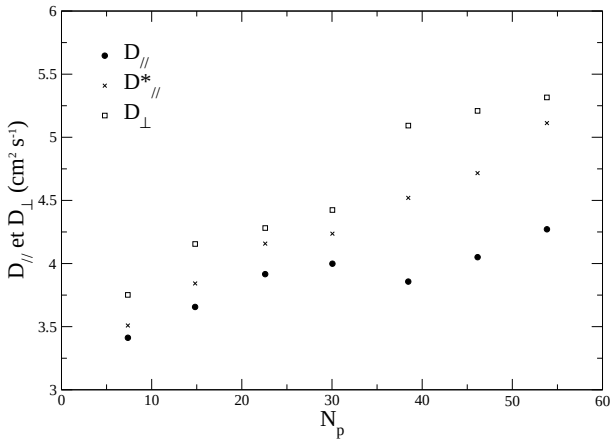


Figure 4.30: *Évolution des coefficients de dispersion en fonction de N_p pour un rapport de taille $D/d = 16$. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

4.4.4 Évolution des coefficients de dispersion en fonction du rapport de taille D/d

La figure 4.31 représente l'évolution des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du rapport de taille D/d, obtenue par la méthode MD pour différentes valeurs du nombre N de particules qui transitent dans le milieu poreux. La figure 4.31 montre que le coefficient de dispersion $D_\perp$ augmente lorsque le rapport de

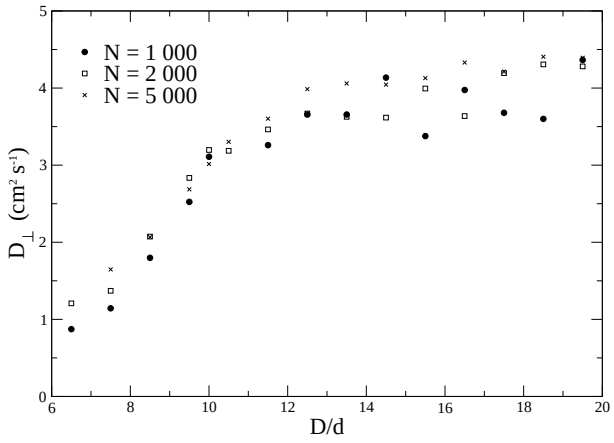


Figure 4.31: *Évolution des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

taille augmente jusqu'à une valeur de $D/d \approx 12$. Plus les particules sont petites, plus elles peuvent parcourir de longues distances latérales sans entrer en collision avec les sphères

du milieu poreux. Lorsque le rapport de taille est supérieur à 12, on remarque que cette augmentation est moins marquée et que le coefficient de dispersion $D_\perp$ semble saturer à une valeur de l'ordre de 4 $\mathrm{cm^2 s^{-1}}$. La figure 4.31, comme la figure 4.29, permet également de constater que le coefficient $D_\perp$ dépend peu du nombre de particules en écoulement.
La figure 4.32 illustre l'évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du rapport de

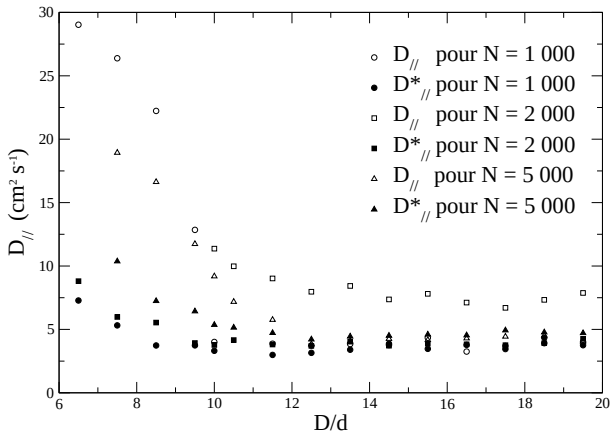


Figure 4.32: *Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du rapport de taille D/d pour plusieurs valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. Le coefficient de dispersion $D^*_{//}$ obtenu par un ajustement avec la loi (2.2) est également représenté.*

taille D/d. Nous présentons en parallèle le coefficient de dispersion obtenu par l'ajustement avec l'équation (2.2). On remarque que le coefficient de dispersion décroît lorsque le rapport de taille augmente, et que pour $D/d < 10$, un écart important entre le coefficient de dispersion obtenu par la loi d'ajustement et celui issu du calcul de la variance des positions des particules. En réalité, pour $D/d < 10$, il n'est pas évident de déterminer avec précision la pente de la courbe $D_{//} = f(t)$. Les erreurs sur ces mesures sont donc importantes. Néanmoins la loi d'ajustement, qui reproduit bien l'évolution de $D_{//}$ en fonction de D/d pour des rapports de tailles plus grands, permet d'estimer correctement le coefficient de dispersion dans la direction longitudinale pour des rapports de tailles inférieurs à 10.

4.4.5 Évolution des coefficients de dispersion en fonction des coefficients de restitution

Le coefficient de restitution e_{pg}

La figure 4.33 montre les valeurs du coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement pour différents nombres de particules. On remarque que le coefficient de dispersion $D_\perp$ dépend très peu du coefficient de restitution e_{pg}. La figure 4.34 montre l'évolution du coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement avec le coefficient de restitution e_{pg}. Nous avons également représenté sur cette figure les coefficients de dispersion $D^*_{//}$ obtenus via l'équation (1.31). Le coefficient de dispersion diminue lorsque le

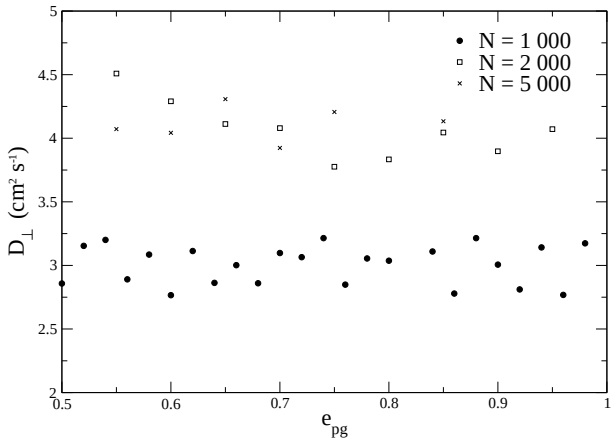


Figure 4.33: *Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour $N = 1\,000$, $N = 2\,000$ et $N = 5\,000$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$.*

coefficient de restitution entre les particules en écoulement et les sphères du milieu poreux augmente. Ceci peut être expliqué si l'on considère que pour franchir un pore, une particule doit être dans l'alignement de celui-ci. Si ce n'est pas le cas elle va rebondir sur les sphères qui forment ce pore. Plus la dissipation d'énergie est faible plus elles vont avoir des difficultés à franchir ce pore. La dispersion longitudinale des particules est donc plus difficile lorsque le coefficient de restitution augmente.

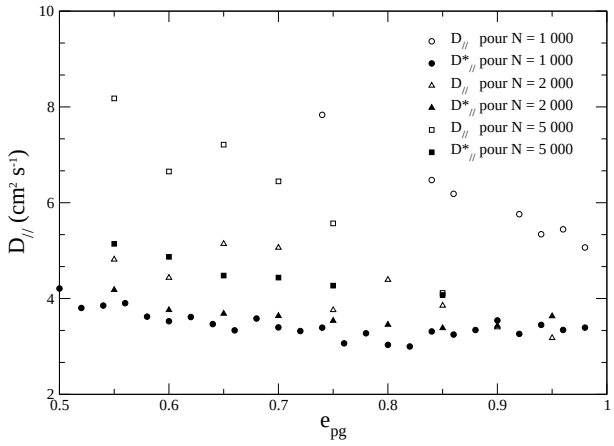


Figure 4.34: *Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour $N = 1\,000$, $N = 2\,000$ et $N = 5\,000$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$. Le coefficient de dispersion $D^*_{//}$ obtenu par un ajustement avec la loi (2.2) est également représenté.*

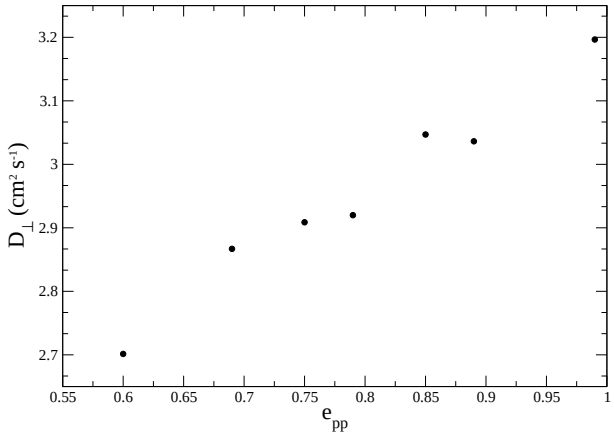


Figure 4.35: *Évolution du coefficient de dispersion $D_\perp$ en fonction du coefficient de restitution e_{pp}. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pg} = 0{,}84$.*

Le coefficient de restitution e_{pp}

Nous avons ensuite étudié l'influence du coefficient de restitution entre deux particules sur la dispersion du paquet de particules. La figure 4.35 montre la variation du coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du coefficient de restitution e_{pp}.

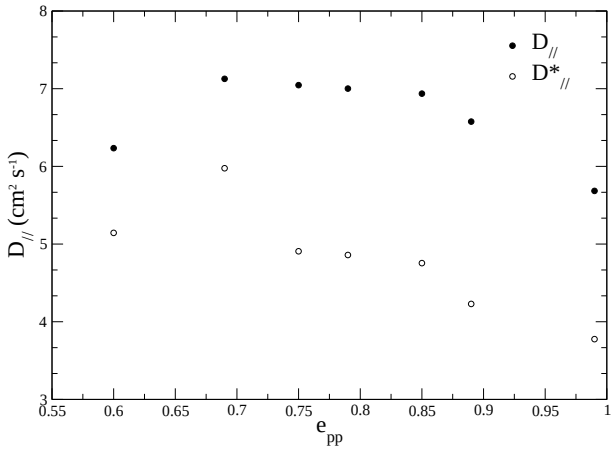


Figure 4.36: *Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pp}. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pg} = 0{,}84$.*

On constate que plus le coefficient de restitution e_{pp} est grand, plus les particules se dispersent latéralement. En revanche, si l'on considère la figure 4.36 qui représente l'évolution du coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement lorsque le coefficient de restitution varie, on remarque le comportement inverse. C'est-à-dire que plus le coefficient e_{pp}

est grand et moins les particules se dispersent dans la direction de l'écoulement.

Dans ce chapitre, nous venons de caractériser l'influence des différents paramètres intervenant dans notre expérience sur les propriétés de l'écoulement d'un paquet de particules. Nous allons maintenant présenter dans le cinquième et dernier chapitre une application du phénomène de percolation spontanée au mélange de particules.

Chapitre 5 *Application au mélange de particules*

Durant ce travail de thèse, nous nous sommes également intéressés au mélange de particules. Grâce à notre programme de simulation basé sur la méthode de dynamique moléculaire de sphères molles, nous avons donc voulu étudier la possibilité d'utiliser le phénomène de percolation spontanée à travers un empilement de sphères pour réaliser un mélangeur. Contrairement à de nombreux mélangeurs, tels que ceux présentés dans la partie 1.2, un tel dispositif ne nécessiterait pas l'apport d'énergie extérieure autre que l'énergie potentielle. Un tel mélangeur, que l'on pourrait classer dans la catégorie des mélangeurs statiques (voir paragraphe 1.2.3), constituerait donc un mélangeur peu coûteux et facile à mettre en place.

5.1 Réalisation du mélangeur

Nous avons essayé de mélanger des particules de tailles différentes par percolation spontanée à travers un empilement de sphères plus grosses. Pour cela, nous avons injecté deux paquets de particules monodisperses au-dessus du milieu poreux comme représenté sur la figure 5.1. Nous noterons d_2 le diamètre des plus petites particules. Dans la suite, nous parlerons alors de particules de type 2 pour désigner ces particules. Nous avons vu précédemment que le temps moyen de transit d'un paquet de particules monodisperses variait avec le rapport de taille D/d. Nous avons choisi ici d'utiliser un rapport $D/d = 10$ et un rapport d/d_2 tel que :

$$1 \leqslant \frac{d}{d_2} \leqslant 2 \tag{5.1}$$

Les deux paquets de particules sont initialement séparés d'une distance l_{sep}. Ils sont lâchés simultanément au-dessus du milieu poreux et les deux types de particules transitent donc simultanément dans l'empilement de sphères. Nous avons choisi de travailler à volume de particules constant. Autrement dit, il y a égalité entre les masses totales de particules de chacune des deux espèces. La figure 5.2 montre la distribution des deux paquets de particules dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. La figure 5.3 montre quant à elle la distribution des deux espèces de billes à la sortie de l'empilement. Cette figure illustre le fait qu'à la sortie du milieu poreux, les particules sont mélangées. Cependant, pour

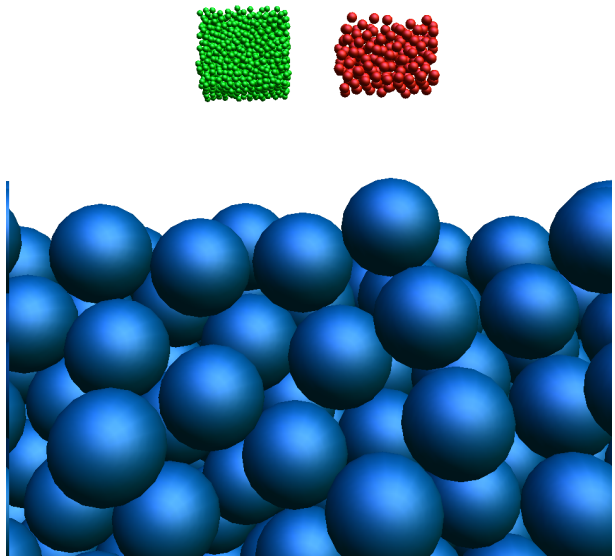


Figure 5.1: *Illustration du lâcher de deux paquets de particules au-dessus du milieu poreux.*

pouvoir quantifier l'état du mélange, un critère de mélange est nécessaire. Avant de définir un tel critère permettant de quantifier l'état de mélange dans la direction perpendiculaire à l'écoulement, nous allons regarder le comportement des deux paquets de particules dans la direction de l'écoulement. La figure 5.4 illustre l'évolution de la vitesse mesurée dans l'état stationnaire pour chaque type de particules en fonction du rapport de taille d/d_2. Nous observons que la vitesse d'écoulement des particules de type 2 augmente avec le rapport d/d_2. Deux phénomènes sont responsables de cette augmentation.
Tout d'abord, une augmentation du rapport de taille d/d_2 implique une augmentation du rapport de taille entre le diamètre des particules de type 2 et les billes du milieu poreux. Cette augmentation du rapport D/d_2 équivaut donc à une augmentation du rapport de taille D/d dans le cas d'un écoulement monotaille. Ces résultats sont donc comparables avec ceux de la figure 4.16. Comme nous travaillons à volume constant de particules de chaque espèce, l'augmentation du rapport d/d_2 implique également une augmentation du nombre N_2 de particules de type 2. À titre indicatif, le tableau 5.1 présente le nombre de particules de chaque espèce utilisé dans ces simulations. Le second phénomène expliquant cette augmentation de la vitesse d'écoulement avec le rapport de taille d/d_2 est que pour de telles valeurs de N_p, la vitesse croît avec le nombre de particules en écoulement (voir figure 4.13). La figure 5.4 montre également que la vitesse d'écoulement des particules de type 1 évolue très peu avec le rapport de taille d/d_2. Les particules de type 1, dont le nombre reste constant au cours des différentes simulations, sont donc peu perturbées par la présence des particules de type 2.

Il peut également être intéressant d'observer la dispersion des particules au cours de l'écoulement. La figure 5.5 illustre la dépendance des coefficients de dispersion dans la direction

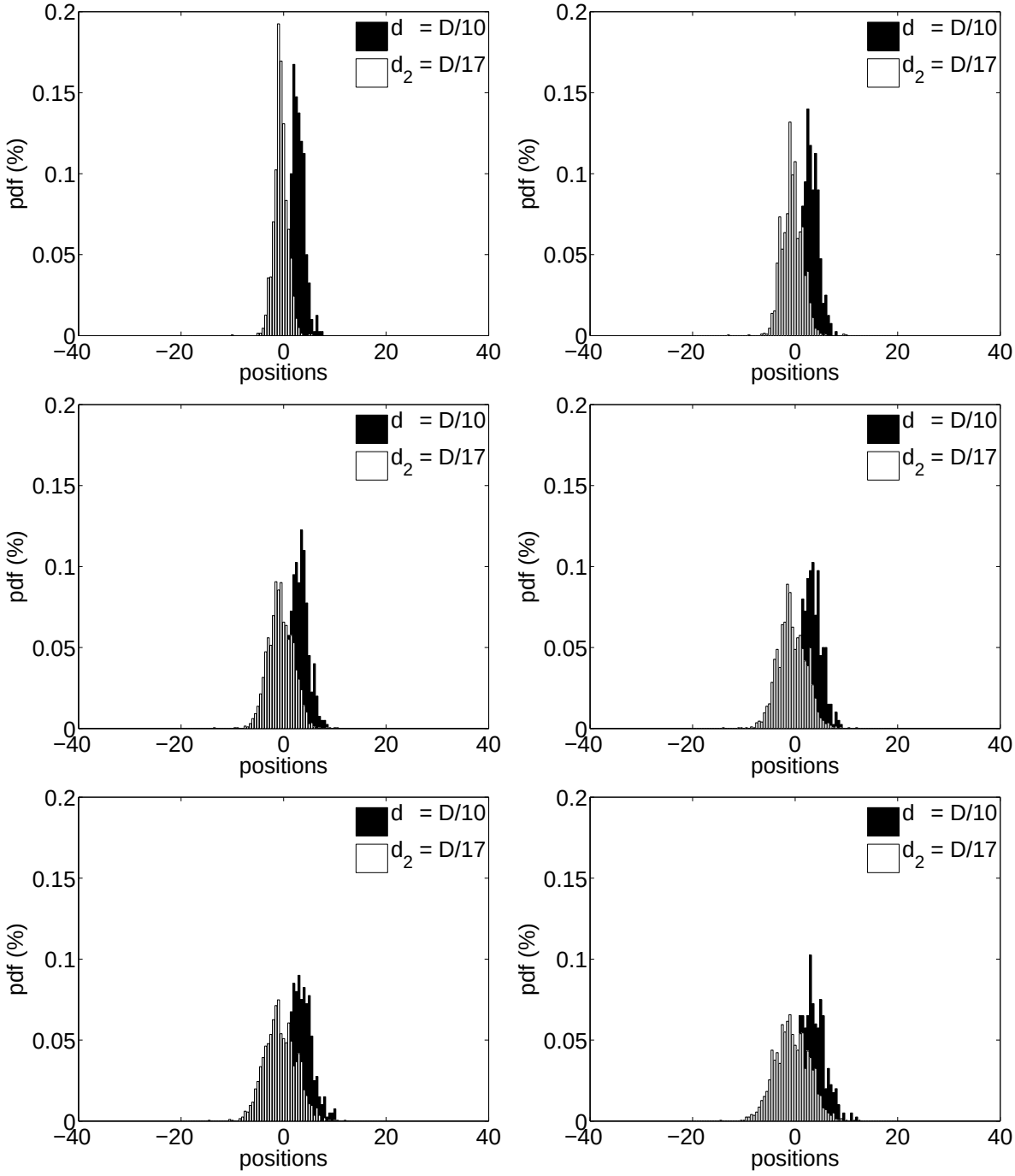


Figure 5.2: *Distribution des particules de chaque espèce dans la direction perpendiculaire à l'écoulement à différents instants qui sont respectivement :* $t = 0{,}22$ s, $t = 0{,}43$ s, $t = 0{,}65$ s, $t = 0{,}87$ s, $t = 1{,}09$ s, $t = 1{,}30$ s.

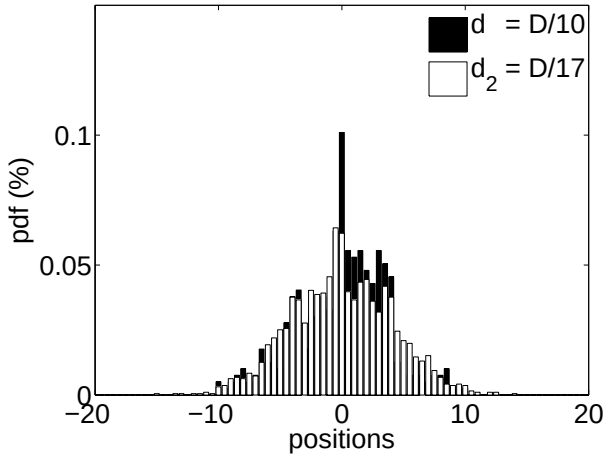


Figure 5.3: *Distribution, dans une direction perpendiculaire à l'écoulement, de la position des particules de chaque espèce à la sortie de l'empilement.*

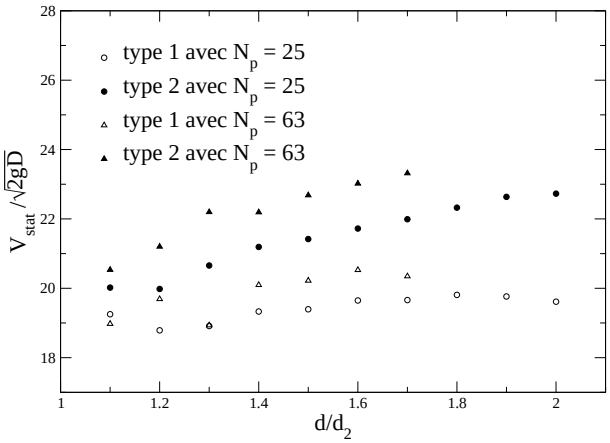


Figure 5.4: *Évolution de la vitesse d'écoulement pour chaque type de particules pour deux valeurs de N_p.*

d/d_2	$N_p = 25$		$N_p = 63$	
	N	N_2	N	N_2
1,1	400	531	1 000	1 330
1,2	400	691	1 000	1 727
1,3	400	877	1 000	2 195
1,4	400	1 096	1 000	2 742
1,5	400	1 350	1 000	3 375
1,6	400	1 638	1 000	4 095
1,7	400	1 964	1 000	4 913
1,8	400	2 331	1 000	x
1,9	400	2 743	1 000	x
2,0	400	3 200	1 000	x

Tableau 5.1: *Tableau indiquant le nombre de particules de chaque espèce utilisées dans nos simulations. Le volume total de particules est fixé à la valeur de N_p. Lorsque nous changeons le rapport d/d_2, le nombre N_2 de particules de type 2 varie de telle sorte que le volume de particules de type 2 soit égal au volume de particules de type 1.*

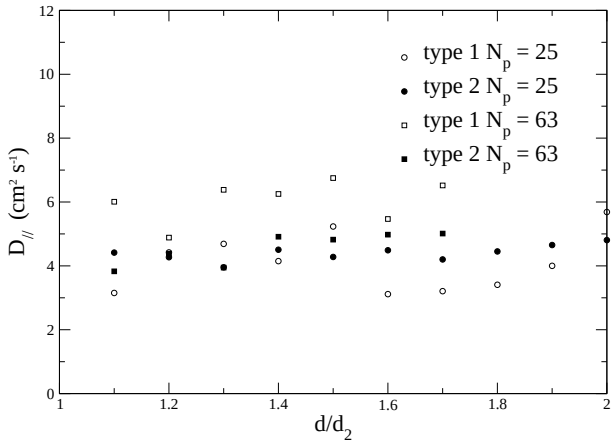


Figure 5.5: *Évolution des coefficients de dispersion mesurés dans la direction de l'écoulement en fonction du rapport de taille d/d_2.*

de l'écoulement en fonction du rapport de taille d/d_2 et ce pour chaque type de particules. Elle met en évidence le fait que la dispersion longitudinale est peu dépendante du rapport de taille d/d_2 pour la gamme de rapport de taille D/d et D/d_2 utilisée. La figure 5.6 montre l'évolution des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction de ce même rapport d/d_2. Tandis que le coefficient de dispersion $D_\perp$ des particules

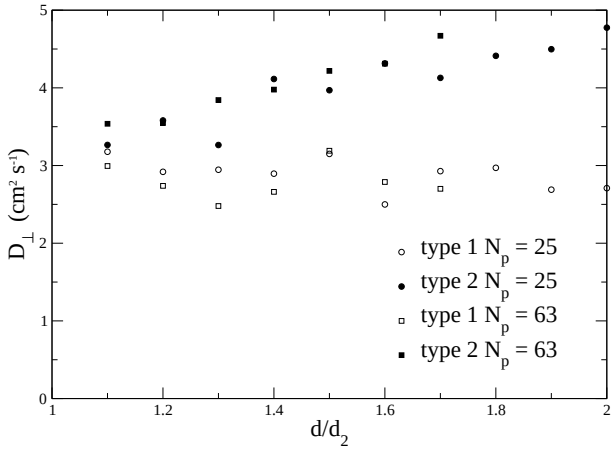


Figure 5.6: *Évolution des coefficients de dispersion mesurés dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du rapport de taille d/d_2.*

de type 1 est indépendant de d/d_2, la figure 5.6 permet de remarquer que la dispersion des particules de type 2 augmente avec le rapport de taille d/d_2. Cette augmentation de $D_\perp$ avec d/d_2 peut aussi être expliquée par le nombre croissant de billes de type 2 ainsi que par l'augmentation du rapport de taille D/d_2. En effet, ceci est en accord avec les résultats présentés précédemment dans le cas monotaille, et en particulier sur les figures 4.30 et 4.31.

L'analyse des résultats précédents montre que les deux types de particules, de part leurs différences de taille et de nombre, se comportent différemment. La réalisation d'un mélangeur de particules en utilisant l'écoulement de particules par percolation spontanée à travers un empilement de sphères plus grosses devra donc se faire par injection d'un flux continu de particules de chaque type. En supposant cette condition sur la réalisation du mélangeur, il nous reste à mesurer le degré de mélange des particules dans la direction perpendiculaire à l'écoulement pour déterminer si un mélangeur par percolation spontanée constitue une méthode efficace pour mélanger des particules.

5.2 L'état de mélange

5.2.1 Un indice de mélange

Danckwerts (1953) a proposé que le degré de mélange de poudres soit défini par deux termes :

- l'échelle de ségrégation qui décrit l'état de subdivision des groupes de particules, ce terme peut être obtenu par des techniques d'autocorrélation,
- l'intensité de ségrégation qui est exprimée en termes de variance de composition.

L'intensité de ségrégation est le terme le plus couramment utilisé pour quantifier l'homogénéité d'un mélange. La variance expérimentale est souvent reliée à des valeurs limites permettant ainsi d'évaluer le niveau d'homogénéité du mélange. Pour déterminer la première de ces limites, considérons un mélange totalement ségrégé de deux types de particules. Si l'on note n le nombre de particules et n_A le nombre de particules de type A, on a $n_B = (n - n_A)$ particules de type B. Si l'on note respectivement f_A et f_B les teneurs moyennes des deux constituants dans la totalité du mélange, on a $n_A = f_A n$ et $n_B = f_B n$. Si l'on note s_i la composition du constituant choisi dans l'échantillon i, on peut exprimer la variance de la composition du mélange totalement ségrégé, où chaque échantillon ne contient qu'une seule espèce de particule (*Lacey*, 1954). Si on considère que chaque échantillon ne contient qu'une particule, on a :

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[s_i - \langle s\rangle\right]^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(s_i - f_A\right)^2 \tag{5.2}$$

$$= \frac{1}{n}\left[\sum_{i=1}^{n_A}\left(1 - f_A\right)^2 + \sum_{i=n_A}^{n}\left(0 - f_A\right)^2\right] \tag{5.3}$$

$$= \frac{1}{n}\left[n_A\left(1 - f_A\right)^2 + \left(n - n_A\right)\left(0 - f_A\right)^2\right] \tag{5.4}$$

$$= \frac{1}{n}\left[n f_A\left(1 - f_A\right)^2 + n\left(1 - f_A\right) f_A^2\right] \tag{5.5}$$

$$= \frac{1}{n}\left[n f_A\left(1 - f_A\right)\right] = f_A\left(1 - f_A\right) \tag{5.6}$$

Dans ces conditions, nous avons alors $f_A = f_B = 1/2$ soit $\sigma_0^2 = 1/4$. La deuxième limite permettant d'évaluer le niveau d'homogénéité du mélange est celle du mélange totalement aléatoire σ_R. Si l'on suppose que le mélange est constitué de deux espèces qui diffèrent uniquement par leur couleur, le mélange aléatoire suit une loi de distribution binomiale et l'on montre (*Lacey*, 1954; *Fan et al.*, 1970; *Massol-Chaudeur*, 2000) que la variance de la composition du mélange s'exprime comme :

$$\sigma_R^2 = \frac{f_A f_B}{N} = \frac{f_A\left(1 - f_A\right)}{N} \tag{5.7}$$

où N est le nombre total de particules. σ_R est la l'écart type minimal que l'on peut obtenir dans un mélange non ordonné. En effet, si le mélange est parfaitement ordonné, le mélange est idéal et la variance de la composition est nulle. Dans tous les cas, la variance de la composition σ_m^2 est telle que :

$$\sigma_R^2 < \sigma_m^2 < \sigma_0^2 \tag{5.8}$$

Dans les systèmes réels, la présence d'une distribution de taille des particules vient compliquer la notion de nombre de particules par échantillon utilisé dans la définition précédente

de σ_R car celle-ci s'appuie sur un nombre constant de particules dans les échantillons. De nouvelles définitions de l'écart type limite pour des mélanges polydisperses ont alors été données par différents auteurs (*Stange*, 1954; *Poole et al.*, 1964; *Buslik*, 1973; *Crooks et Ho*, 1975). A partir des définitions de σ_0 et σ_R, de nombreux indices de mélanges ont été proposés dans la littérature (*Lacey*, 1954; *Smith*, 1955; *Gayle et al.*, 1958; *Herdan*, 1960; *Miles et al.*, 1960; *M.H.Wesmacott et Linehan*, 1960; *Chudikiewicz*, 1961; *Miles*, 1962; *Poole et al.*, 1964; *Rose et Robinson*, 1965; *Valentin*, 1967). D'autres auteurs (*Fan et al.*, 1970; *Massol-Chaudeur*, 2000) ont listé ces différents indices de mélange, le lecteur intéressé pourra s'y reporter.

La concentration des particules de l'espèce a à la position x à la sortie du milieu poreux est donnée par :

$$c_a(x) = \frac{m_a(x)}{m_a(x) + m_b(x)} = \frac{\dfrac{m_a(x)}{M_a}}{\dfrac{m_a(x)}{M_a} + \dfrac{m_b(x)}{M_a}} \tag{5.9}$$

où $m_a(x)$ et $m_b(x)$ sont respectivement les masses des espèces a et b à la position x et où M_a est la masse totale de particules de l'espèce a injectées dans le milieu poreux. Comme, dans notre cas, la masse totale de particules de l'espèce b est telle que $M_b = M_a$, il vient alors :

$$c_a(x) = \frac{f_a(x)}{f_a(x) + f_b(x)} \tag{5.10}$$

La concentration de l'espèce b est telle que $c_b(x) = 1 - c_a(x)$. Pour un mélange parfaitement homogène, tel que nous avons $m_a(x) = m_b(x)$ quel que soit x, alors $c_a(x) = c_b(x) = 1/2$. Cette définition de la concentration prend en compte la proportion de particules d'une espèce en un point donné de l'espace. On peut étendre cette définition à une région de largeur Δx centrée autour d'un point x_0. On pourrait donc être tenté d'utiliser la variance de $c_a(x)$ pour calculer la variance de la composition du mélange et de pouvoir ainsi calculer un indice de mélange. Néanmoins cette approche ne peut être utilisée car la masse totale de particules $m_a(x) + m_b(x) = M_a(f_a(x) + f_b(x))$, contenue dans une région de largeur Δx, n'est pas constante avec x. De tels échantillons ne sont donc pas équivalents entre eux. Pour pallier ceci, nous avons choisi, comme l'a fait *Bruno* (2002) auparavant, de subdiviser notre système en échantillon de masse m_0 avec :

$$m_{\text{disque}} < m_0 < M_a \tag{5.11}$$

où m_{disque} est la plus petite masse des particules. Pour cela, nous ramenons notre distribution bidimensionnelle des particules à une distribution unidimensionnelle via le calcul de $l = \sqrt{x^2 + y^2}$, rayon de demi-cercles centrés sur l'axe central du milieu poreux. L'utilisation de demi-cercles évite de surimposer un mélange qui n'a pas lieu d'être lorsque les particules se trouvent de part et d'autre du plan de symétrie du système. Le $k^{\text{ième}}$ échantillon est donc défini par la réunion de n_k régions consécutives de telle sorte que :

$$m_0 = \sum_{i=n_{k-1}+1}^{n_k} m(l_i) \tag{5.12}$$

avec $n_0 = 0$. Les différents n_k ne sont pas forcément égaux entre eux. La concentration de l'espèce a dans l'échantillon k s'exprime alors comme :

$$c_a(l_k) = \frac{m_a(l_k)}{m_0} \tag{5.13}$$

La variance σ_m s'écrit alors :

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\left(c_a(l_k) - \frac{1}{2}\right)^2 \tag{5.14}$$

où $K = \dfrac{2M_a}{m_0}$ est le nombre d'échantillons.
A partir du calcul de σ_m, il est alors possible de calculer un indice de mélange. Comme *Bruno* (2002), nous avons choisi d'utiliser l'indice de *Rose et Robinson* (1965) (*Harnby et al.*, 1992; *Wang et Fan*, 1976), défini par :

$$M = 1 - \frac{\sigma_m^2}{\sigma_0^2} \tag{5.15}$$

5.2.2 Qualité du mélange de particules par percolation spontanée

La figure 5.7 représente l'évolution de M en fonction du temps. Nous pouvons observer sur la figure 5.7 que l'indice M augmente peu à peu et semble atteindre une valeur limite. Il est important de préciser que l'indice a été calculé alors que toutes les particules étaient encore mobiles. C'est-à-dire qu'aucune sphère n'a atteint le bas de l'empilement. Pour illustrer ceci,

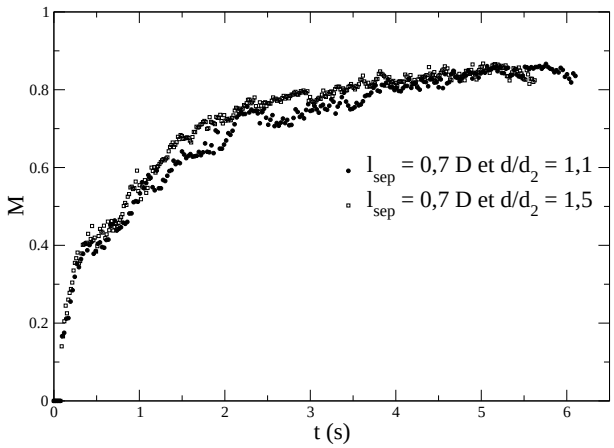


Figure 5.7: *Évolution de l'indice de mélange de Rose (équation (5.15)) en fonction du temps avec $l_{sep} = 0{,}7D$ et $N_p = 25$.*

la figure 5.8 montre la valeur de l'indice de mélange suivant la profondeur atteinte par le paquet de particules. La présence de cette valeur stationnaire est donc caractéristique du mélangeur et dépend donc peu de la hauteur de l'empilement.

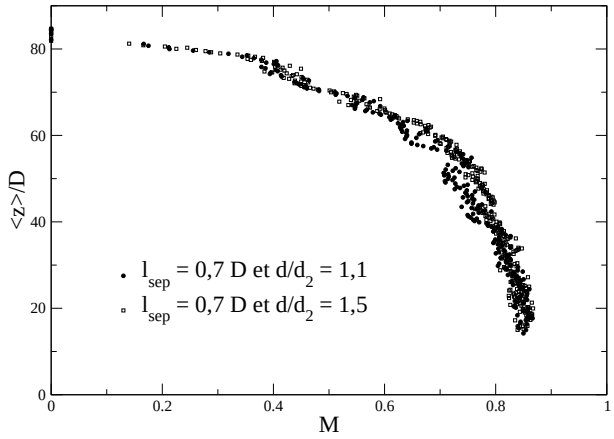


Figure 5.8: *Évolution de l'indice de mélange de Rose (équation (5.15)) en fonction de la profondeur atteinte par le paquet de particules, avec $l_{sep} = 0{,}7D$ et $N_p = 25$.*

Nous avons également représenté sur la figure 5.7 cette évolution pour deux valeurs du rapport de taille d/d_2. La dépendance de cette valeur stationnaire, que nous notons M_∞, avec le rapport de taille ne semble pas évidente. Nous avons fait une série de mesures en faisant varier le rapport de taille d/d_2 entre 1,1 et 2,0. La dépendance de M_∞ obtenue est illustrée sur la figure 5.9. On constate que le rapport de taille entre les deux types de particules a peu d'influence sur la qualité du mélange. L'indice M_∞ reste constant à une valeur de l'ordre de 0,8. Les résultats précédents montre que le phénomène de percolation

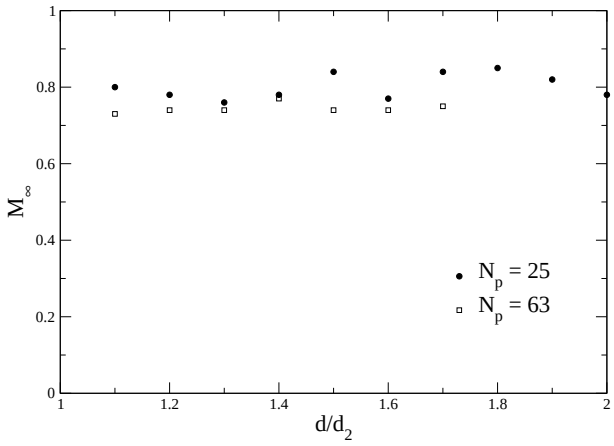


Figure 5.9: *Évolutions de l'indice de mélange M_∞ en fonction du rapport de taille d/d_2 pour des lâchers de deux paquets de particules de volume identique. Deux évolutions pour deux valeurs de N_p sont représentées avec $l_{sep}/D = 1$.*

spontanée constitue un bon mécanisme permettant d'assurer le mélange de particules dont le rapport de taille est inférieur à 2. Bien que nous n'ayons pas réalisé d'expérience de mélange pour $d/d_2 > 2$, il est raisonnable de penser que la qualité du mélange reste assurée pour de telles valeurs.

La figure 5.10 montre l'évolution de l'indice de mélange M en fonction du temps pour différentes valeurs de la distance qui sépare les deux paquets de particules au moment du largage. On constate que la valeur stationnaire est plus rapidement atteinte lorsque $l_{\text{sep}} = 0{,}3D$ que lorsque $l_{\text{sep}} = 0{,}5D$ ou $l_{\text{sep}} = 0{,}7D$.

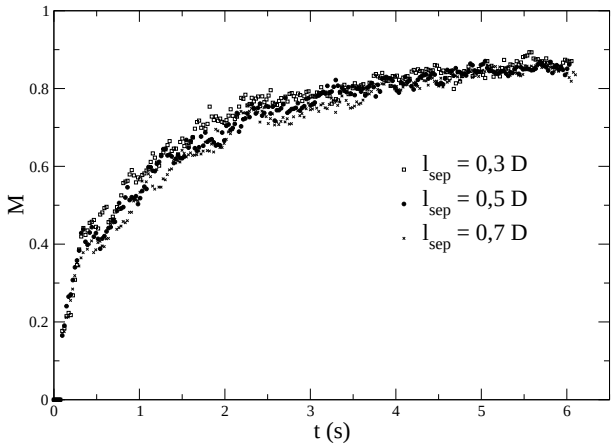


Figure 5.10: *Évolution de l'indice de mélange M en fonction du temps pour différentes valeurs de l_{sep} avec $N_p = 25$ et $d/d_2 = 1{,}1$.*

L'évolution de M_∞ en fonction de l_{sep} est présentée sur la figure 5.11. Bien que nous puissions remarquer une légère diminution de M_∞ lorsque l_{sep} varie entre $0{,}2D$ et $1D$, la valeur M_∞ de l'indice de mélange dépend peu de la distance initiale séparant les deux paquets. En revanche, si la hauteur de l'empilement n'est pas suffisante pour atteindre une valeur stationnaire, cette non-dépendance de M avec l_{sep} n'est plus vraie (voir figure 5.10).

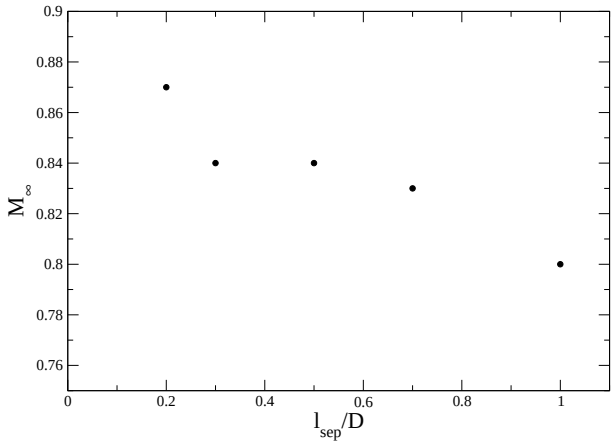


Figure 5.11: *Évolution de l'indice de mélange M_∞ en fonction de la distance initiale l_{sep} séparant les deux paquets de particules avec $N_p = 25$ et $d/d_2 = 1{,}1$.*

L'ensemble de ces résultats montre que, dans le cadre de l'injection d'un flux continu de particules, la percolation spontanée constitue une méthode efficace pour obtenir des mélanges homogènes de particules de tailles différentes. Néanmoins, une étude plus complète est nécessaire pour caractériser l'état de mélange obtenu avec des particules de propriétés différentes (coefficients de restitution, densité, ...).

Conclusion et perspectives

Au cours de ce travail de thèse, nous avons abordé l'étude expérimentale et numérique de l'écoulement d'un ensemble de particules à travers un empilement de sphères plus grosses. Ce travail s'inscrit dans la continuité des études antérieures concernant le percolation spontanée de sphères ou de disques en petites quantités dans un empilement de sphères ou à travers un réseau d'obstacles. Les résultats de notre étude peuvent aider à la compréhension et à la maîtrise des phénomènes de ségrégation de tailles dans les milieux granulaires.

La partie expérimentale de ce travail de thèse a tout d'abord consisté à mettre au point un dispositif permettant l'étude de l'écoulement de particules à travers un milieu poreux dans des conditions contrôlées. Grâce à ce dispositif, nous avons pu dans un premier temps déterminer un temps moyen de résidence des particules au sein du milieu poreux. Nous avons montré que le paquet de particules en écoulement atteint un régime stationnaire après avoir franchi quelques couches du milieu poreux. La dépendance du temps moyen de transit avec le nombre de particules a été déterminée dans une large gamme et nous avons mis en évidence l'existence de plusieurs régimes d'écoulement suivant le nombre de particules transitant dans la structure poreuse. Nous avons également entrepris une étude de l'influence du rapport de taille entre les particules et les sphères constituant le milieu poreux sur le temps moyen de résidence des particules. Il a été montré que ce dernier diminuait lorsque les particules en écoulement étaient de plus petites tailles. Au cours de cette étude expérimentale, nous nous sommes également intéressés à la caractérisation de la dispersion des particules dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Nous avons mis en évidence l'augmentation des coefficients de diffusion lorsque le nombre de particules en écoulement augmente. Nous avons ensuite cherché une loi de comportement nous permettant d'ajuster les profils d'élutriation. Nous avons montré que l'utilisation d'une loi de convection-diffusion permettait un ajustement convenable des données expérimentales dans une première approximation. L'étude expérimentale étant limitée par l'impossibilité d'accéder à l'intérieur du milieu poreux, nous avons entrepris le développement de programmes de simulations permettant de reproduire notre expérience de transport.
La partie numérique de ce travail de thèse a consisté dans un premier temps à l'élaboration de programmes de simulation. Nous avons pour cela utilisé deux méthodes aux éléments discrets que sont la méthode Event-Driven et la dynamique moléculaire de sphères molles. Ces programmes ont pu être validés par confrontation avec les résultats expérimentaux. En effet, nous avons montré que les simulations numériques du transport de particules à travers un empilement de sphères plus larges mettaient en évidence le fait que le pa-

quet de particules atteignait une vitesse moyenne de percolation constante après quelques couches de grains à partir de la surface du milieu poreux. Ces simulations, et en particulier celles basées sur la méthode de dynamique moléculaire de sphères molles, reproduisent les différents régimes d'écoulements observés expérimentalement lorsque que le nombre de particules varie. De plus, ces simulations numériques ont permis de caractériser l'influence de divers paramètres difficilement accessibles par l'expérience. Ainsi, nous avons pu étudier l'influence du rapport de taille entre les particules en écoulement et les sphères constituant le milieu poreux. Nous avons mis en évidence l'augmentation des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à la direction de l'écoulement et la diminution des coefficients de dispersion dans la direction de l'écoulement, lorsque la taille des particules diminue. Lorsque les particules qui s'écoulent dans le milieu poreux sont de plus en plus petites, la vitesse moyenne de percolation augmente et semble saturer à une valeur limite résultant d'un équilibre entre la chute des particules — facilitée par une diminution de leur taille — et l'augmentation de la dispersion latérale des particules. Nous avons montré l'existence d'un lien direct entre le temps moyen de résidence du paquet de particules au sein du milieu poreux et le volume occupé par celui-ci, au moyen d'un adimensionnement par $(D/d)^{-3}$. Nous avons complété l'étude expérimentale en mettant en évidence l'augmentation du coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement avec le nombre de particules. La simulation numérique nous a également permis d'étudier l'influence du coefficient de restitution entre deux particules et celle du coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux. D'une manière générale, et cela quel que soit le type de collisions, le temps moyen de résidence du paquet de particules au sein de l'empilement augmente lorsque la dissipation d'énergie diminue. La diminution de la vitesse moyenne de percolation avec le coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux avait été observée dans le cas de l'écoulement d'une seule particule par *Bridgwater et Ingram* (1971). Notre étude a donc permis d'étendre la validité de ce comportement au cas où plusieurs particules s'écoulent simultanément dans le milieu poreux. Nous avons montré que les coefficients de dispersion dans la direction de l'écoulement diminuent lorsque les coefficients de restitution caractéristiques des deux types de collisions augmentent. Tandis que le coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à la direction de l'écoulement augmente lorsque le coefficient de restitution interparticules augmente, nous avons remarqué que ce coefficient de dispersion dépend peu du coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux. Il avait été montré précédemment par *Bridgwater et Ingram* (1971) que dans le cas de l'écoulement d'une seule particule, la dispersion latérale augmente avec le coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux. Notre étude révèle donc que ce phénomène n'est plus valable lorsque plusieurs particules transitent en même temps dans la structure. L'analyse théorique de *Wilkinson et Edwards* (1982), toujours dans le cas de l'écoulement d'une seule particule, avait montré que la vitesse moyenne de percolation variait avec le coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux comme une loi à la puissance 1/4. La simulation numérique nous a permis de montrer que cette loi restait valable lors de l'écoulement de plusieurs particules.

Enfin, durant ce travail de thèse, nous avons également mis en évidence qu'il était possible d'utiliser le phénomène de percolation spontanée à travers un empilement de sphères plus

larges pour réaliser des mélanges de particules. Pour cela, nous avons réalisé des mélanges de particules de tailles différentes et nous avons caractérisé l'état de mélange en calculant un indice de mélange. Nous avons vu que les mélanges obtenus par cette méthode sont de très bonne qualité et que le rapport de taille entre les particules n'a que peu d'influence sur la qualité finale des mélanges obtenus. L'utilisation de l'écoulement de particules en flux continu à travers un empilement de sphères plus larges est donc un moyen efficace, simple et peu coûteux pour obtenir des mélanges homogènes dans les industries manipulant de la matière en grains.

Ce travail de thèse ouvre plusieurs perspectives de recherche. Tout d'abord, sur le plan expérimental, il serait très intéressant de caractériser la dépendance de la dispersion latérale des particules en fonction du rapport entre la taille de ces particules et celle des sphères constituant le milieu poreux. Dans le même genre d'idée, une investigation de l'influence des coefficients de restitution sur les propriétés de l'écoulement reste à effectuer. La compacité de l'empilement de grosses sphères est un paramètre dont l'influence n'a pas été étudiée au cours de ce travail. Ceci pourrait être fait par préparation d'empilements de compacités différentes via le montage de compaction par vibration élaboré au laboratoire. L'étude expérimentale reste limitée par l'impossibilité de suivre les déplacements des particules dans le milieu au cours de l'écoulement. Il serait possible d'y remédier en faisant une étude expérimentale à deux dimensions où le milieu poreux serait constitué de cylindres espacés les uns des autres, que l'on pourrait agencer dans des configurations différentes de manière à faire varier la compacité de l'empilement bidimensionnel.
Avec les nouveaux verres, tels que les verres tex élaborés par l'équipe « Verres et céramiques » de l'Université de Rennes 1, il serait possible de créer un empilement avec des sphères complètement transparentes dans l'infrarouge. Le suivi du paquet de particules en écoulement pourrait alors être rendu possible par l'utilisation d'une caméra infrarouge.
Enfin, il serait également intéressant d'adapter le dispositif expérimental actuel pour étudier la réalisation de mélanges de particules.
D'un point de vue théorique, il apparaît indispensable de considérer des coefficients de dispersion non constants pour parfaire l'ajustement des profils d'élutriation obtenus.
Sur le plan de la modélisation numérique, l'avantage du contrôle des différents paramètres que celle-ci permet, serait profitable pour caractériser l'influence de la compacité de l'empilement de grosses sphères. Il serait également intéressant de tester la possibilité de réaliser des mélanges de particules de densités ou de formes différentes. Enfin, dans nos travaux, nous nous sommes restreints à des écoulements de particules monodisperses, or l'étude d'écoulements de particules présentant une dispersion de taille serait également d'un grand intérêt. En suivant cette voie, il est aussi tout à fait envisageable d'utiliser notre dispositif d'écoulement à travers un milieu poreux pour réaliser le processus inverse du mélange. En effet, la vitesse moyenne d'écoulement d'un groupe de particules étant différente suivant leur taille, il doit être possible de séparer les différents constituants d'un paquet de particules présentant plusieurs tailles caractéristiques. Les groupes de particules constitués des particules de même taille seront donc séparés spatialement dans la direction de l'écoulement et leur séparation peut être rendue possible en les récupérant à la sortie du milieu poreux au moyen d'un réceptacle mobile tel qu'un convoyeur.

Annexe A

Résultats publiés dans JSTAT

Une partie des résultats obtenus au cours de ce travail de thèse ont été publiés dans *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*. Cette première annexe présente une copie de cet article.

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment
An IOP and SISSA journal

Transport of small particles through a 3D packing of spheres: experimental and numerical approaches

Franck Lominé and Luc Oger

GMCM, University of Rennes 1, CS 74205, 35042 Rennes, France
E-mail: franck.lomine@univ-rennes1.fr and luc.oger@univ-rennes1.fr

Received 22 May 2006
Accepted 13 June 2006
Published 31 July 2006

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2006/P07019
doi:10.1088/1742-5468/2006/07/P07019

Abstract. In this paper, we study the transport of particles through a porous structure. Experimentally, we focus our attention on the dependence of the mean transit time on some parameters like the number of small particles injected in the structure, and the height of the packing. We have developed a numerical model, based on a DEM method, to simulate the experiment. This model is useful for accessing the internal structure of the packing and for analysing precisely the influence of the restitution coefficient and the size ratio between spheres.

Keywords: granular matter, mixing

J. Stat. Mech. (2006) P07019

©2006 IOP Publishing Ltd and SISSA 1742-5468/06/P07019+13$30.00

Contents

1. Introduction **2**

2. Experimental set-up **3**

3. Experimental analysis **4**

4. Cooperative flow regime **6**

5. Numerical simulation **7**

5.1. The numerical method 7

5.2. Mono-sized spheres 9

5.3. Bi-disperse spheres 10

6. Conclusions **12**

References **12**

1. Introduction

Transport and mixing of granular materials are central features of many industrial processes as in food, chemical engineering, civil engineering, ceramics or pharmaceutical industries. Nevertheless, size segregation, which is a non-random spatial distribution of the different grain species, is often a source of important problems. A well-known example of size segregation effect is 'Brazil nut segregation' [1], also called the Brazil nut effect (BNE). Mixing homogeneously granular media is important but not trivial. One way to succeed is to make grains have a diffusive-like motion. However, in contrast to molecular diffusion, mixing by diffusion of a granular system cannot be achieved without an input of energy. A system that gives grains enough energy to ensure their motion and changes their velocities randomly could be named a granular mixer. Many kinds of mixers are used in the industrial domains previously quoted: rotating drums [2], shakers etc. We are interested in the study of the flow of small particles due to gravity through a packing of large spheres, that build up a sort of porous medium. Such a system could be used for mixing particles of different sizes. But the study of inter-particle percolation of mono-size spheres has to be performed first. When the two grain species are very different in size (with a ratio $D_{\text{large}}/D_{\text{small}} \geq (2/\sqrt{3}-1)^{-1} = 6.464\ldots$ [3]), it is possible for the smaller to drain totally through the packing. This kind of segregation was previously studied [4] and also more recent studies [5]–[7] have been released. Nevertheless, these cases were limited to launches of one or of a small number of particles at the same time. In this paper, we present results of our experimental and numerical study of inter-particle percolation with large number of grains. In other words, contrary to previous studies, the neighbourhood of spheres is going to influence their individual behaviours. Indeed, the presence of many particles falling together induces many additional collisions compared to the mono-particle case. In the three following sections, we present the experimental set-up and experimental

J. Stat. Mech. (2006) P07019

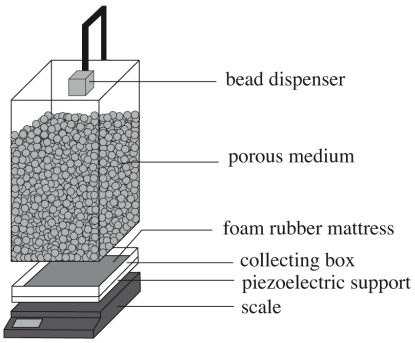


Figure 1. Schematic drawing of the experimental set-up.

results, and analyse the influence of the number of percolating spheres. Then, in the last section, we present a numerical model that lets us examine in more detail the influence of the different physical parameters.

2. Experimental set-up

The experimental set-up, shown in figure 1, is made of mono-disperse beads packed inside a parallelepiped tank of 26 cm × 26 cm × 51 cm. The packing, constructed under gravity, can be made of spheres of different sizes D. It plays the role of a porous medium with a reproducible porosity around 0.4. Another packing made by small iron beads of diameter d is put in a box placed on a handle, as close as possible to the upper surface. These percolating beads are quasi-instantaneously launched in the porous structure by using a vertical opening hatch. The detection system consists of an electronic weight scale with a piezoelectric material. The signal, from the piezoelectric material, is amplified and taken down by an acquisition card. In order to have reproducible results, the humidity rate (close to 50%) and the temperature are kept constant. We also use concentric cubes that can be inserted in the bead dispenser with the aim to maintain the launched packing as isotropic (i.e. punctual) as possible.

We work with a ratio far from the trapping threshold in order to free ourselves from trapping events. Indeed, as mentioned previously, a ratio of $D/d \geq 6.464\ldots$ [3] permits any particle to pass through any pores of the structure. It is convenient to estimate the maximum interstitial volume between four spheres of diameter D in a tetrahedral arrangement. This one is the accessible volume for percolating particles of diameter d. If we take into account the random close packing limit ($\Phi_{\mathrm{RCP}} = 0.64$), we can define $V_{\mathrm{p}} = (\Phi_{\mathrm{RCP}} D^3/12)(\sqrt{2} - 2\ \Omega)$ as a characteristic volume of the packing of larger spheres, where $\Omega = 3\arccos(1/3) - \pi$ is the solid angle of the tetrahedron. V_{p} is an estimation of the accessible volume of the smallest pore of the porous medium. Instead of the number N of particles injected in the porous structure, we can now consider the ratio $N_{\mathrm{p}} = V/V_{\mathrm{p}}$, where $V = \frac{4}{3}\pi(d/2)^3 N$. The mean transit time is deduced from the signal gathered at the output in the way detailed below.

doi:10.1088/1742-5468/2006/07/P07019

J. Stat. Mech. (2006) P07019

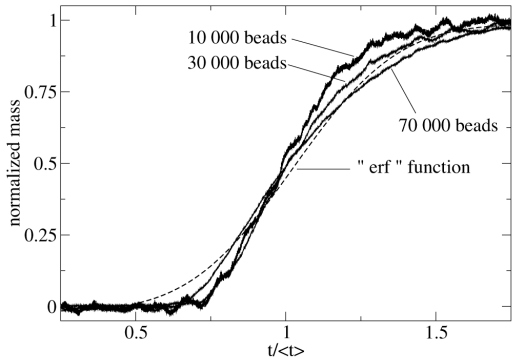


Figure 2. Evolution of the normalized mass of beads gathered at the output with normalized time for $N = 70\,000$, $N = 30\,000$ and $N = 10\,000$. An adjustment with an *erf* function is also represented.

3. Experimental analysis

The main phenomenon, which occurs inside the porous space, is lateral and transverse dispersion that is classically described as a Gaussian law for a fluid passing through a porous structure. Therefore, the evolution with time of the concentration of beads at the output follows an *erf* function, which is the solution of the convection–diffusion equation:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} + U\nabla c(r,t) = D_{\parallel}\frac{\partial^2 c(r,t)}{\partial x_{\parallel}^2} + D_{\perp}\frac{\partial^2 c(r,t)}{\partial {x_{\perp}}^2}$$

where U is the interstitial velocity of the flow and $D_{\parallel}$ and $D_{\perp}$ are respectively the longitudinal and transversal diffusion coefficients [8]. Our weight scale will see the cumulative weight of falling beads, as shown in figure 2. We can already notice the difference with the best *erf* function fit drawn in the same figure. In others words, the transit time distribution is not exactly a normal law. Indeed, if we focus our interest on the distribution of transit time, figure 3 demonstrates that distribution of residence time is a normal law with a tail for longer values of transit times. This behaviour reflects the appearance of lateness due to 'trapping' of beads during the percolation process. The fraction of delayed particles becomes more significant when we increase the number of particles. This is why it is also possible to adjust our data by favouring shortest transit times. Such adjustments are shown in figure 4, on which we also clearly see the increase of the number of delayed particles with N. Nevertheless, as, in a first order analysis, we are interested in the mean transit time determination, figure 2 shows that this Gaussian approximation can be used. Indeed, the difference in mean transit time determination between the two methods detailed above is small.

Using an *erf* adjustment, we have determined the mean transit time for different packing heights and for variable batches of small iron spheres (N between 1 and 100 000). The porous medium is built with glass spheres of diameter $D = 16$ mm. As we can see in figure 5, the residence time is proportional to the packing height even for different batch sizes. It can be related to previous results: for the case of a single particle falling down

J. Stat. Mech. (2006) P07019

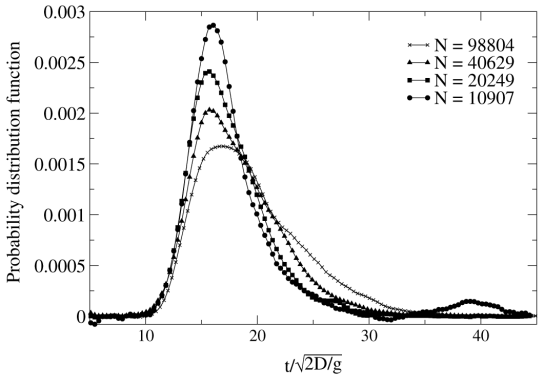


Figure 3. Distribution of transit times, normalized by free-fall time of a height of D, for different batch sizes with $D = 16$ mm, $D/d = 16$ and $H/D = 10$.

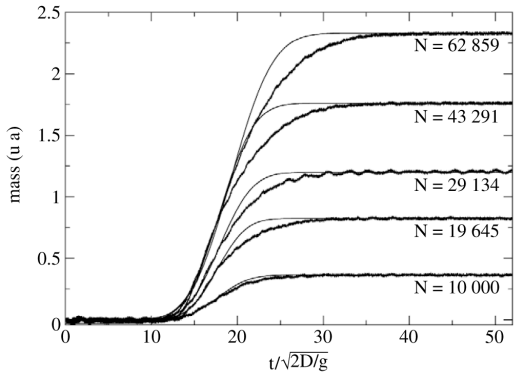


Figure 4. Cumulative mass with *erf* adjustment by giving less importance for shorter transit time for five values of N. $D = 16$ mm, $D/d = 16$ and $H/D = 10$.

either in a 3D porous medium [5], or in a 2D system [9], the percolation velocity is constant. In fact, this is true if the size of the packing is large enough to minimize the influence of some transition regime at the beginning of the process. This stationary state appears for height higher than a threshold value, of the order of few large grain sizes, below which no granular temperature equilibrium can occur. We have not reported measurements of mean transit times for H/D smaller than three to four large bead layers. This is for the reason described previously and because of strong differences in the transit time due to some time fluctuations of the beads, during the entering of the porous structure. Indeed, according to the possible presence of a pore under the opening hatch, a difference of one diameter distance can occur. For all these reasons, it is not possible to extrapolate the three curves to zero. Concerning figure 5, let us mention that the three curves are not parallel, which already suggests that the percolating velocity depends on the number of

doi:10.1088/1742-5468/2006/07/P07019

J. Stat. Mech. (2006) P07019

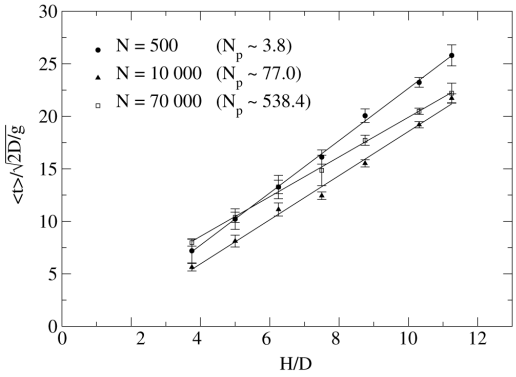


Figure 5. Dependence of the normalized mean transit time on H/D for a launch of $N = 500$, 10 000, 70 000 particles with $D = 16$ mm and $D/d = 16$.

percolating particles. This is what we are going to see now, in more detail, in the next section.

4. Cooperative flow regime

We have performed another set of experiments in order to study the impact of the number of percolating spheres on the mean transit time. It is evident that if only one particle falls down through a porous structure it can explore the complete free space without any perturbation. However, this is no longer true if several particles fall at the same time. In this case, all these moving particles can interact one with another and also with the fixed ones. If we are near the critical value, which was defined previously and corresponds to the trapping threshold, only one or two particles can pass together through the same pore. If several particles are to transit the porous medium, they have to pass one after another. On the other hand, if we work far from the trapping threshold, a large number of them can pass simultaneously through the same pore. The mean residence time depends of the volume N_pV_p occupied by the batch rather than size ratio only. So, mean transit time depends directly on the number N of percolating particles.

We have plotted in figure 6 the evolution of the mean time with N_p for a height of $H = 10D$. As mentioned previously, it is reasonable to think that the percolation velocity will decrease with the particle number due to pores jamming. In other words, the mean transit time would increase with N_p, due to the difficulty of the percolating particles finding accessible pores. Nevertheless, figure 6 shows that the phenomenon is more complex, and mainly we can define the existence of three flow domains. In this study, we have two main effects of the spontaneous gravitational percolation: a significant rebound of a falling bead on fixed spheres (due to a large restitution coefficient) and also a large decrease of moving bead velocities due to the fact that the falling particles collide with each other and with the packing. In the first regime, from $N_p = 1$ to approximately 50, the mean transit time decreases when the number of falling particles grows. As N_p increases, they lose more and more energy by collisions with their neighbours. This implies

J. Stat. Mech. (2006) P07019

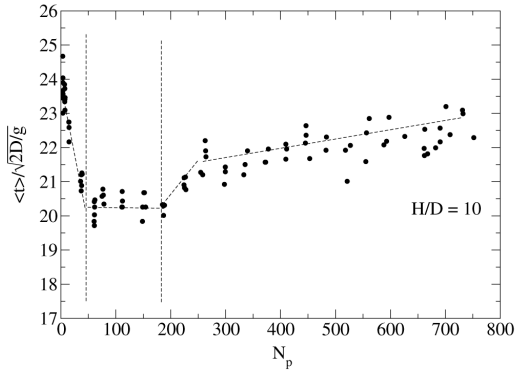


Figure 6. Dependence of the normalized mean transit time on N_p for $D = 16$ mm, $D/d = 16$ and $H/D = 10$.

that when $N_p \approx 50$ they are mainly falling down directly in the lower pore structure, without bouncing around. As the number of small beads increases further, an equilibrium between the direct falling process and the inter-particle collision events is obtained and can be observed in a second domain from $N_p \approx 50$ to $\approx$200. In this steady gravity regime, the mean percolation velocity is quite independent of N_p. So the mean transit time does not depend on N. If we continue to increase the number of falling beads, we observe a third regime, for $N_p > 200$. The particle velocities slow down due to the crossing of a large number of particles simultaneously through the same pore. In fact, this regime can be divided into two sub-regimes. Firstly, from $N_p \approx 200$ to $\approx$250, the dependence of the slowdown on N_p is important. This behaviour reflects a beginning of a jamming effect of pores situated in the flow zone. The jamming effect grows with N_p and then, for $N_p > 250$, the increase of the mean transit time with N_p is less important due to accumulation of particles in connecting pores. For such values of N_p, a pore jamming is related to the jamming of pores which are connected to it, by the obstruction of preferential paths. We can suppose that for $N_p > 750$ we could observe a saturation of the mean transit time which would correspond to a total jamming of preferential paths.

Figure 7 represents the same evolution of the mean transit time for three packing heights. For $H/D = 5$, the three regimes of flow are also visible. The second domain seems to appear for a smaller number of particles than for $H/D = 10$.

5. Numerical simulation

5.1. The numerical method

In order to analyse influences of different geometrical and mechanical parameters, we couple experimental results with numerical simulations. We have chosen to make a model as close as possible to the real process which occurs when we launch a set of small particles through a pile made with larger spheres. Many algorithms exist to build a random 3D packing of mono-size spheres [10]. We have chosen to use the Powell's algorithm [11],

J. Stat. Mech. (2006) P07019

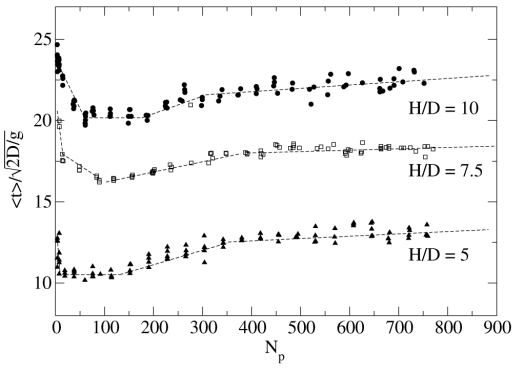


Figure 7. Dependence of the normalized mean transit time on N_p for $D/d = 16$ and $D = 16$ mm. Three series of experiments, with different packing heights H, are represented.

as here constructed packings are built as if under gravity. Each sphere is placed in the lowest possible position, in contact with three spheres already placed. This leads to six contacts on average per sphere and porosity around 0.40. Our porous structure is made by 70 000 spheres of radius $D = 20$ mm inside a box of $70D \times 70D \times 175D$ respectively in the x, y and z directions. To avoid finite size effects, the packing of larger spheres is generated with periodic boundary conditions in the x and y directions. A small size distribution of sphere radii (5%) has been introduced in order to avoid local ordered zones and also to reproduce the natural dispersion size of a bead set. We build an upper box containing another packing of spheres of diameter d. This box is horizontally centred on top of the previous one and is almost cubic. To simulate the motion of large numbers of small spheres through a static packing of larger ones, we use the event-driven method [12] for the dynamic part of the simulation. In this approach, collisions are considered as instantaneous and binary; this means that only one collision can occur at a given time. The basic principle of this method consists in the resolution of the trajectory equation and by sorting the events. In spite of the periodicity of the porous medium, interactions between moving spheres do not take into account this periodicity (i.e. only spheres in the same periodic space can collide).

At the beginning of the simulation, the program calculates for each small sphere the shortest time interval from the present to a collision with one of its neighbours. Then, all these time intervals are sorted and the program jumps to the shortest collision time. Only positions of the two concerned spheres are evaluated, the event collision is computed and the program calculates the new velocities of the two spheres involved in this collision. After this, all the possible new collisions which could occur for these two spheres are computed and integrated in the sorting event tree. Then, the next event is treated and so on. The percolation process ends when all the small spheres have reached a height equal to their radii. In other words, this means that they touch the bottom of the packing.

In contrast to the experimental case, our simulations let us have access to the internal porous structure and more precisely to the displacement of particles. As shown in figure 8,

J. Stat. Mech. (2006) P07019

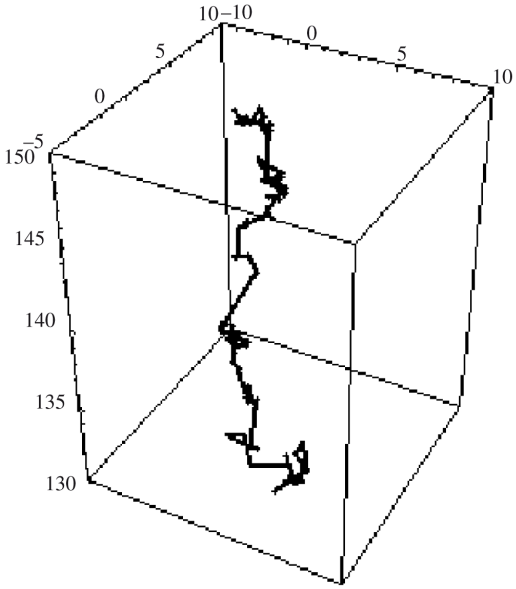


Figure 8. Zoom of a particle trajectory inside the box.

we can follow the inner path of each moving bead from the entry to the output of the structure.

5.2. Mono-sized spheres

We have simulated experiments for different numbers N of particles and so for different values of N_p. As we can observe in figure 9, the mean transit time decreases with N_p and seems to reach a constant value for $N_p \approx 140$. In the studied range of N_p, this behaviour is in agreement with experimental results presented previously.

In order to analyse the effect of the size ratio we have performed simulations dealing with D/d and also with the restitution coefficient e. Figure 10 demonstrates that the mean transit time decreases with D/d. When the ratio D/d is close to the trapping threshold, the residence time is quite long due to the difficulty of crossing the pore structure. A particle has to slow down and almost stop to cross each pore. When we increase the aspect ratio, the crossing is made easier and the mean transit time decreases. Figure 11 represents the dependence of the mean square displacement of particles, in a transversal direction, on time for different ratios D/d. It illustrates an increase of lateral dispersion when particles have smaller diameters. This explains why the decrease of the mean transit time, in figure 10, is less and less important with D/d. Moreover, we should notice that the linearity of the dependence of $\langle(\Delta x)^2\rangle$ on time illustrates the diffusive behaviour of the percolation process.

Figure 10 shows also that the mean transit time increases with e and confirms our assumption: for higher coefficients of restitution e, bounces of falling particles are more

J. Stat. Mech. (2006) P07019

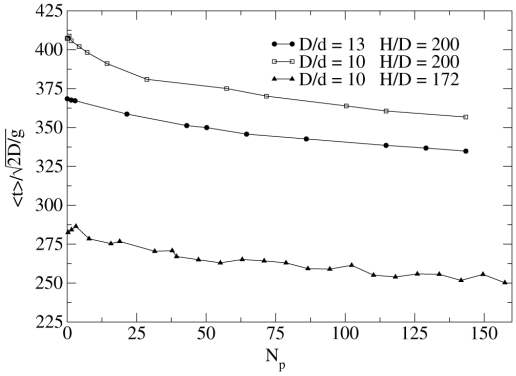


Figure 9. Evolution of the normalized mean transit time with the blob size N_p for different values of size ratios D/d and H/D.

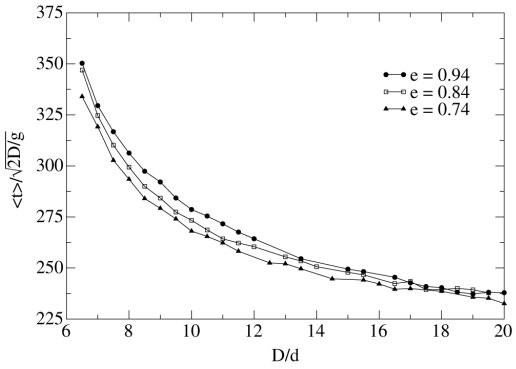


Figure 10. Normalized mean transit time evolution versus the size ratio D/d for three coefficients of restitution with $N = 1000$ and $H/D = 172$.

important and exploration of the pore structure is made easier. The probability that a particle can almost go back to its previous altitude is not negligible. Figure 12 shows the linearity between the evolutions of mean variance of the position distribution in the x direction with the mean altitude of the beads. It illustrates that dispersion is easier for higher restitution coefficient and implies, with comparison with figure 11, that the mean percolation velocity is constant after a transitional regime.

5.3. Bi-disperse spheres

We have carried out a preliminary series of simulations to extrapolate these behaviours to the case of two releases of particle batches with different diameters, in order to study the possibility of using such a process as a granular mixer. Let d_1 and d_2 be the diameters

J. Stat. Mech. (2006) P07019

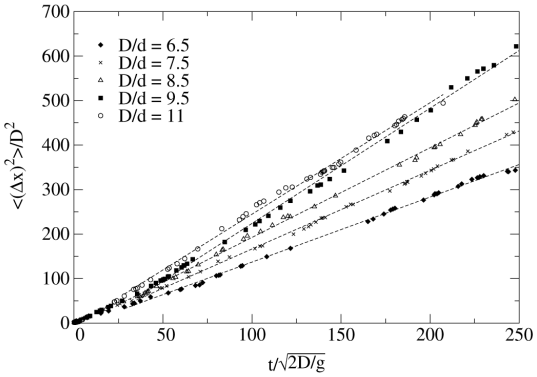


Figure 11. Dependence of $\langle(\Delta x)^2\rangle$ on normalized t for a release of $N = 1000$ particles and for different D/d.

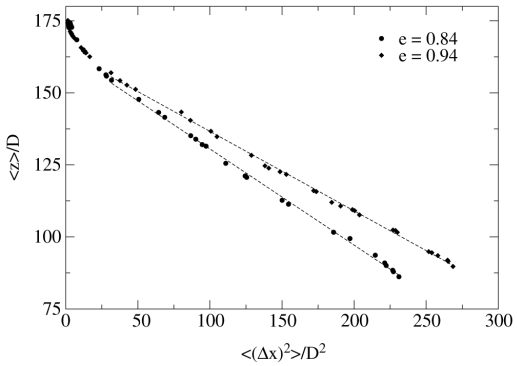


Figure 12. Mean altitude reached by the batch in function of mean square displacement in the x direction for two restitution coefficients.

of particles of each set with $d_1 > d_2$. These two piles are laterally centred at the top of the packing of larger spheres of diameter D and the ratio $d_1/d_2 = 1.3$. The percentages of beads with diameters d_1 and d_2 are equal to 50%. So we have $n_1 = 600$ particles of diameter d_1, $n_2 = 600$ of diameter d_2 and $N = n_1 + n_2 = 1200$.

Figure 13 shows the evolution of mean transit time for the smaller particles versus the size ratio D/d_2. We have also represented the evolution of mean transit time in the case of a simple mono-size launch of 1200 particles. Figure 13 shows that particles of diameter d_2 behave almost like a set of 1200 particles made only with this size. The smallest particles do not see the influence of intermediate ones. More complementary investigations have to be made.

doi:10.1088/1742-5468/2006/07/P07019

J. Stat. Mech. (2006) P07019

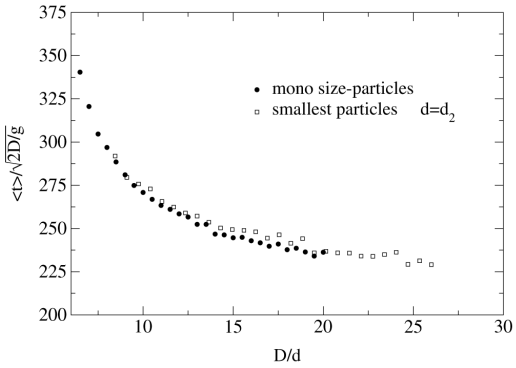


Figure 13. Evolution of normalized mean transit time for smallest particles of diameter d_2 with D/d for a batch release of 1200 particles with 50% by number of each. Results for a simple mono-size launch of 1200 particles of diameter d_1 are also represented.

6. Conclusions

An experimental study of numerous particles flowing in a porous structure has been realized. The steady state, which is reached during the percolation process, shows us that vertical percolation velocity is constant. This behaviour is comparable to the case of a mono-particle flow previously studied. But collective effects, due to the transit of many particles in the structure, induce acceleration of the transit process and also jamming effects with particular consequences on the flow velocity, like the existence of flow regimes or delays compared to the fluid case. Despite these considerations, the separation between individual effects and collective ones is not trivial. Numerical simulations are performed to access the internal motion and to examine the influence of some physical parameters on the transit process. Moreover, it allows us to simulate mixing of particles with different physical properties, and leads us to think that the use of such a process could be helpful to obtain, in a cheaper way, homogeneous mixtures.

References

[1] Rosato A D, Strandburg K J, Prinz F and Swendsen R H, *Why the brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking*, 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1038

[2] Cantelaube F and Duparcmeur Y L, *Geometrical analysis of avalanches in a 2d drum*, 1995 *J. Physique* I **5** 581

[3] Dodds J A, *The porosity and contact points in multicomponent random sphere packings calculated by a simple statistical geometric model*, 1980 *J. Colloid Interface Sci.* **77** 317

[4] Bridgwater J, Sharpe N W and Stocker D C, *Particle mixing by percolation*, 1969 *Trans. Inst. Chem. Eng.* **47** 114

[5] Samson L, *Analyse de l'écoulement d'un grain dans des systèmes désordonnés bi-et tridimensionnels*, 1997 *PhD Thesis* Université de Rennes1

[6] Ippolito I, Samson L and Hulin J P, *Diffusion of a single particle in a 3d random packing of spheres*, 2000 *Eur. Phys. J.* E **3** 227

[7] Oger L, Troadec J P and Tharaud B, *Particle percolation through a porous medium*, 2002 *World Congress on Particle Technology 4 (Sydney, July 2002)* ed J Raper, p 175

J. Stat. Mech. (2006) P07019

[8] Charlaix E, *Dispersion en milieu poreux: mise en évidence de longueurs caractéristiques*, 1987 *PhD Thesis* Université Paris 6
[9] Bruno L, Calvo A and Ippolito I, *Dispersive flow of diks through a two-dimensional galton board*, 2003 *Eur. Phys. J.* E **11** 131
[10] Oger L, Troadec J P, Gervois A and Medvedev N N, *Computer simulations and tesselation of granular materials*, 1999 *Foams and Emulsions* (*NATO-ASI Series* N 354) ed J F Sadoc and N River (Dordrecht: Kluwer Academic) pp 527–46
[11] Powell M J, *Computer-simulated random packing of spheres*, 1980 *Powder Technol.* **25** 45
[12] Luding S, Clément E, Blumen A, Rajchenbach J and Duran J, *Studies of columns of beads under external vibrations*, 1994 *Phys. Rev.* E **49** 1634

J. Stat. Mech. (2006) P07019

Annexe B

L'équation de Smoluchowski

Nous allons présenter ici l'équation de Smoluchowski. Celle-ci permet de décrire la distribution de probabilité d'une particule dans un champ de force. Considérons un système

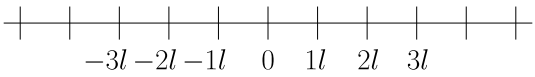


Figure B.1: *Réseau en dimension* 1.

unidimensionnel comme représenté sur la figure B.1 et une particule libre de se déplacer et d'occuper les sites 0, $\pm l$,$\pm 2l$,$\pm 3l$,.... Supposons qu'à chaque intervalle de temps τ, la particule peut se déplacer d'une distance l vers la droite avec une probabilité p et vers la gauche avec une probabilité q, de telle sorte que $p + q = 1$.
Dans un premier temps, si l'on considère un champ de force uniforme, nous pouvons écrire les probabilités de déplacement des particules sous la forme $p = 1/2 + \zeta l$ et $q = 1/2 - \zeta l$, où ζ est une constante indépendante de la position. Si l'on prend $\zeta = 0$, on retrouve le cas d'une marche au hasard symétrique où les directions de déplacement sont équiprobables. Nous définissons ensuite la probabilité $P(x = 0, t = 0|x = ml, t = n\tau)$ comme étant la probabilité de trouver la particule à la position ml au temps $n\tau$ sachant qu'elle se trouvait en 0 au temps 0. Pour simplifier les notations, nous noterons dans la suite cette probabilité sous la forme $P(ml, n\tau)$.

Nous pouvons alors écrire :

$$\begin{aligned} P(ml,(n+1)\tau) &= pP((m-1)l,n\tau) + qP((m+1)l,n\tau) \\ &= \left(\frac{1}{2}+\zeta l\right)P((m-1)l,n\tau) + \left(\frac{1}{2}-\zeta l\right)P((m+1)l,n\tau) \end{aligned} \tag{B.1}$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} P(ml,(n+1)\tau) - P(ml,n\tau) = \frac{1}{2}&\left(P((m-1)l,n\tau) + P((m+1)l,n\tau) - 2P(ml,n\tau)\right) \\ &- \zeta l\left(P((m+1)l,n\tau) - P((m-1)l,n\tau)\right) \end{aligned} \tag{B.2}$$

Si l'on pose $x = ml$ et $t = n\tau$, il vient alors :

$$\begin{aligned}\frac{P(x,t+\tau)-P(x,t)}{\tau} &= \frac{l^2}{2\tau}\left(\frac{P(x-l,t)+P(x+l,t)-2P(x,t)}{l^2}\right)\\ &\quad -\frac{2\zeta l^2}{\tau}\left(\frac{P(x+l,t)-P(x-l,t)}{2l}\right)\end{aligned} \tag{B.3}$$

Si l'on pose $\mathcal{D} = \dfrac{l^2}{2\tau}$ et que l'on considère la limite $\tau \to 0$ et $l \to 0$, on peut écrire (B.3) sous la forme :

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - 4\zeta\mathcal{D}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} \tag{B.4}$$

Pour des raisons de dimensions, on peut poser $4\zeta\mathcal{D} = F/(m\alpha)$, où F est la force s'exerçant sur la particule de masse m et où le produit $m\alpha$ est une constante de dissipation visqueuse. Si nous considérons maintenant un champ de force inhomogène où la constante ζ dépend du site occupé (notée désormais $\zeta(ml)$) alors l'équation (B.2) devient :

$$\begin{aligned}P(ml,(n+1)\tau)-P(ml,n\tau) &= \frac{1}{2}\left(P((m-1)l,n\tau)+P((m+1)l,n\tau)-2P(ml,n\tau)\right)\\ &\quad -l(\zeta((m+1)l)P((m+1)l,n\tau)\\ &\quad -\zeta((m-1)l)P((m-1)l,n\tau))\end{aligned} \tag{B.5}$$

Dans la limite où $\tau \to 0$ et $l \to 0$, l'équation (B.5) équivaut alors à :

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - 4\mathcal{D}\frac{\partial\left(\zeta(x)P(x,t)\right)}{\partial x} \tag{B.6}$$

que l'on peut écrire également sous la forme :

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{m\alpha}\frac{\partial\left(F(x)P(x,t)\right)}{\partial x} \tag{B.7}$$

L'équation (B.7) est appelée équation de Smoluchowski.

Annexe C

Tableau d'équivalence

La tableau C.1 présente l'équivalence entre le nombre N de particules et le paramètre N_p dans la configuration expérimentale usuelle ($D/d = 16$ et $d = 1$ mm).

N	N_p	N	N_p	N	N_p
100	0,77	15 000	115,37	56 000	430,70
200	1,54	16 000	123,06	58 000	446,08
300	2,31	17 000	130,75	60 000	461,46
400	3,08	18 000	138,44	62 000	476,84
500	3,85	19 000	146,13	64 000	492,22
600	4,60	20 000	153,82	66 000	507,61
700	5,38	22 000	169,20	68 000	522,99
800	6,15	24 000	184,58	70 000	538,37
900	6,92	26 000	199,97	72 000	553,75
1 000	7,69	28 000	215,35	74 000	569,13
2 000	15,38	30 000	230,73	76 000	584,52
3 000	23,07	32 000	246,11	78 000	599,90
4 000	30,76	34 000	261,49	80 000	615,28
5 000	38,46	36 000	276,88	82 000	630,66
6 000	46,15	38 000	292,26	84 000	646,04
7 000	53,84	40 000	307,64	86 000	661,43
8 000	61,53	42 000	323,023	88 000	676,81
9 000	69,22	44 000	338,40	90 000	692,19
10 000	76,91	46 000	353,79	92 000	707,57
11 000	84,60	48 000	369,17	94 000	722,95
12 000	92,29	50 000	384,55	96 000	738,34
13 000	99,98	52 000	399,93	98 000	753,72
14 000	107,67	54 000	415,31	100 000	769,10

Tableau C.1

Annexe D

Valeurs de quelques coefficients de frottement

Matériaux 1	Matériaux 2	Coefficient de frottement	
		statique	dynamique
Aluminium	Aluminium	1,05−1,35	1,4
Verre	Verre	0,9−1,0	0,4
Verre	Métal	0,5−0,7	
Verre	Nickel	0,78	0,56
Fer	Fer	1,0	
Nickel	Nickel	0,7−1,1	0,53
Plexiglas	Plexiglas	0,8	
Plexiglas	Acier	0,4−0,5	
Polystyrène	Polystyrène	0,5	
Polystyrène	Acier	0,3−0,35	

Annexe E

La méthode des cellules liées

Nous allons illustrer ici la méthode des cellules liées présentée au paragraphe 3.6.3. Considérons un exemple simple à une dimension de $N = 7$ particules avec des cellules de taille L comme schématisé sur la figure E.1. Pour illustrer nos propos, nous allons utiliser deux listes. La première, que nous appelons « hoc » (« Head of Cell ») va nous servir à stocker le numéro de la dernière particule identifiée dans la cellule. La seconde, qui va faire le lien entre les particules, sera appelée la liste « liens ».
Dans un premier temps, on initialise les deux listes et l'on cherche dans quelle cellule se trouve chacune des sphères.

```
for i=1..7
liens[i]=0
I[i]=(int)(xi/L)+1
for k=1..4
hoc[k]=0
```

Chaque particule i est ensuite liée avec la particule précédemment identifiée comme appartenant à la même cellule $I[i]$ soit $liens[i] = hoc[I[i]]$. Cette particule i est ensuite placée en

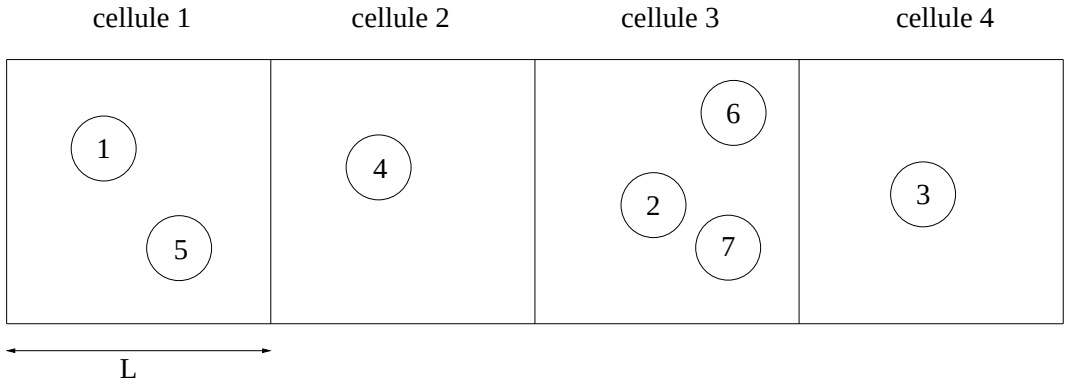


Figure E.1: *Schéma illustrant la méthode des cellules liées à 1D.*

tête de liste de la cellule $I[i]$ soit $hoc[I[i]] = i$.

```
i=1
liens[1]=hoc[1]=0
hoc[1]=1

i=2
liens[2]=hoc[3]=0
hoc[3]=2

i=3
...

i=6
liens[6]=hoc[3]=2
hoc[3]=6

i=7
liens[7]=hoc[3]=6
hoc[3]=7
```

Ainsi, lorsque l'on veut connaître les particules se trouvant dans la cellule 3, il suffit d'identifier la particule à la tête de la cellule 3 et de dérouler la liste correspondante jusqu'à ce que la valeur du lien soit nulle. Ce qui donne :

```
hoc[3]=7
liens[7]=6
liens[6]=2
liens[2]=0
```

Les sphères 7, 6 et 2 se trouvent bien dans la troisième cellule.

La liste des liens et la liste « hoc » doivent être mises à jour lorsqu'une particule change de cellule. Il est évident que pour profiter pleinement des avantages de l'utilisation de cellules, la taille de celles-ci doit être relativement petite pour ne pas contenir trop de particules. Néanmoins, plus la taille des cellules est petite, plus la mise à jour de ces listes doit être fréquente. Il faut donc maintenir un nombre de cellules raisonnable, surtout quand le nombre de particules est important.

Annexe F

Une méthode des cellules à doubles liens

Nous allons illustrer ici la méthode des cellules à doubles liens présentée dans la partie 3.6.6. Considérons le cas unidimensionnel représenté sur la figure F.1 identique à la figure E.1 de l'annexe E. Dans un premier temps, on initialise les listes et l'on cherche dans quelle cellule se trouve chacune des sphères. En dehors de la présence de la liste « liens_inverse », cette étape est similaire en tout point à l'étape vue dans l'annexe E

```
for i=1..7
liens[i]=0
liens_inverse[i]=0
I[i]=(int)(xi/L)+1
for k=1..4
hoc[k]=0
```

Dans une seconde partie, et toujours d'une manière semblable à la méthode classique des cellules liées, on va lier les particules entre elles. Cette étape est faite une seule fois, lors de l'initialisation du programme.

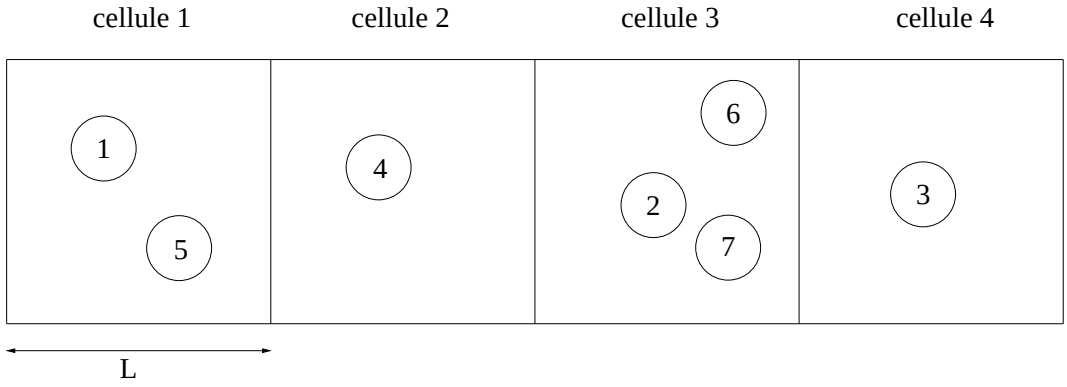


Figure F.1: *Schéma illustrant à une dimension notre méthode des cellules doublement liées*

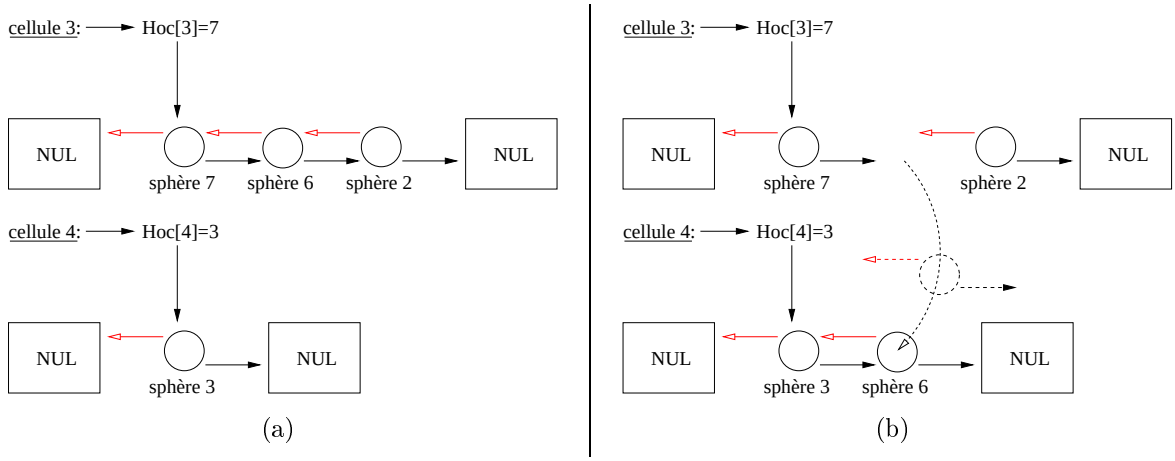


Figure F.2: *Illustration de l'emploi d'une liste à lien doubles. a) État des liens après initialisation de la liste. b) Illustration du principe de la mise à jour des liens après que la sphère* 6 *est passée de la cellule* 3 *à la cellule* 4.

```
i=1
liens[1]=hoc[1]=0
liens_inverse[0]=1
hoc[1]=1

i=2
liens[2]=hoc[3]=0
liens_inverse[0]=2
hoc[3]=2

i=3
...

i=6
liens[6]=hoc[3]=2
liens_inverse[2]=6
hoc[3]=6

i=7
liens[7]=hoc[3]=6
liens_inverse[6]=7
hoc[3]=7
```

L'ajout de cette deuxième liste permet donc de parcourir la liste des liens dans les deux sens. Comme la liste des particules pouvant interagir ne nécessite pas d'être ordonnée, on peut s'affranchir de la reconstruction de la totalité de la liste « liens » quand une particule change de cellule. La figure F.2 illustre l'emploi d'une double liste liée lorsqu'une sphère

change de cellule. La figure F.2 montre que si la particule 6 passe de la cellule 3 à la cellule 4, il n'est pas nécessaire de recréer toute la liste, il suffit juste de changer les liens. Les valeurs nulles qui bordent les deux listes permettent de détecter rapidement les sphères se trouvant seules dans une cellule ou bien celles qui sont en tête de liste. En effet, lorsque c'est le cas, il faut également mettre à jour la liste « hoc » pour indiquer que la sphère qui vient de changer de cellule n'est plus en tête de liste de la cellule dans laquelle elle se trouvait précédemment.

Table des notations

H	hauteur du milieu poreux
D	diamètre des sphères constituant le milieu poreux
d	diamètre des particules transitant au sein du milieu poreux
d_2	diamètre des plus petites particules lors de réalisation d'un mélange
$\langle t \rangle$	temps moyen de résidence du paquet de particules dans le milieu poreux
N	nombre de particules en écoulement dans le milieu poreux
N_p	fraction de volume de cavité tétraèdrique occupée par N petites sphères
V_p	estimation du volume accessible entre 4 sphères dans n arrangement tétraèdrique
P	porosité
C	compacité
T	tortuosité
Φ_a	seuil de capture géométrique rapport de taille D/d permettant à une petite sphère de passer à travers le cou formé par 3 sphères en contact deux à deux
Φ_b	rapport D/d permettant à une petite sphère de s'inscrire dans les plus petites cavités de l'empilement
$\overrightarrow{n}, \overrightarrow{t}$	vecteurs unitaires normal et tangentiel lors de la collision entre 2 sphères i et j
$\overrightarrow{a}$	accélération d'une particule
$\overrightarrow{V}_i, \overrightarrow{V}_i{}'$	vitesses de la particule i avant et après le choc
$\overrightarrow{V}_{ij}, \overrightarrow{V}_{ij}{}'$	vitesses relative de la particule i par rapport à j avant et après le choc
$\overrightarrow{V}_{r_{ij}}, \overrightarrow{V}_{r_{ij}}{}'$	vitesses relatives au point de contact de la particule i par rapport à la particule j avant et après le choc
$\overrightarrow{r}_i$	vecteur position de la particule i
$\overrightarrow{w}_i, \overrightarrow{w}_i{}'$	vitesses angulaire de la particule i avant et après le choc
m_i	masse de la particule i
m_{ij}	masse effective
μ	coefficient de frottement
$\overrightarrow{J}$	variation de la quantité de mouvement de la particule i au cours d'un choc
I_i	moment d'inertie de la particule i
$\tilde{I}$	moment d'inertie réduit
R_i	rayon de la particule i
R_{eff}	rayon effectif

$\overrightarrow{r}_{ij}$	position relative de la particule i par rapport à la particule j
e_n	coefficient de restitution dans la direction normale
e_t	coefficient de restitution dans la direction tangentielle
e_{pg}	coefficient de restitution entre une particule et une sphère du milieu poreux
e_{pg}	coefficient de restitution entre deux particules
t_i	date de la particule i
t_c	durée du contact entre deux particules
τ	durée du contact dans la direction tangentielle
t_e	date du prochain évènement dans le modèle Event-Driven
$t^\star$	date d'un évènement dans le modèle Event-Driven
t_{syst}	date à laquelle se trouve le système dans le modèle Event-Driven
$D_\perp$	coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement
$D_{//}$	coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement
$D^*_{//}$	coefficient de dispersion dans la direction de l'écoulement obtenu par la loi d'ajustement
Pe	nombre de Péclet
α	dispersivité
Re_g	nombre de Reynolds granulaire
H_{init}	profondeur de deux tailles de grains à partir de la surface du milieu poreux
t_{init}	temps de passage à H_{init}
t_0	temps de pénétration du paquet de particules
$\langle V \rangle$	vitesse moyenne de percolation
V_{stat}	vitesse moyenne de percolation mesurée dans l'état stationnaire
E_i	module d'Young de la particule i
ν_i	coefficient de Poisson de la particule i
$\overrightarrow{F}_{ji}$	force d'interaction d'une particule j sur une particule i
k_n,k_t	coefficients de raideurs dans les directions normale et tangentielle
κ_t	coefficient de raideur tangentiel dans le modèle de Walton et Braun
ν_n,ν_t	coefficients de disspation dans les directions normale et tangentielle
ζ	constate dissipative du matériau dans le modèle de Hertz
δ	recouvrement entre 2 sphères i et j dans la direction normale
φ	recouvrement entre 2 sphères i et j dans la direction tangentielle
$\delta_{\max}$	recouvrement maximum entre 2 sphères i et j
l_{sep}	distance séparant les deux paquets de particules lors de la réalisation de mélanges de particules
M	indice de mélange
M_∞	valeur stationnaire de l'indice de mélange
σ_0	écart type de la composition d'un mélange totalement ségrégé de deux types de particules
σ_R	écart type de la composition d'un mélange totalement aléatoire de deux types de particules
σ_m	écart type de la composition du mélange

Table des figures

1.1 Schéma illustrant le mécanisme de mélange par diffusion. Des billes sont lâchées du haut d'une planche de Galton. Les chocs aboutissent à une redistribution spatiale des particules. 6

1.2 Schéma illustrant le mécanisme de mélange par convection. 7

1.3 Schéma illustrant le mécanisme de mélange par cisaillement. Une action mécanique induit des mouvements relatifs de plans séparant des couches de particules, entraînant un mélange. 7

1.4 Ségrégation lors du transport de matériaux granulaires. Lorsque les grains arrivent à l'extrémité du convoyeur, ils parcourent une distance horizontale proportionnelle au carré de leur diamètre (suivant l'équation (1.3)). 8

1.5 Ségrégation en tambour tournant. 8

1.6 Ségrégation par fluidisation. 8

1.7 Illustration de la ségrégation lors du déversement en tas. (a) Schéma : les particules de plus grosses tailles se retrouvent préférentiellement sur les bords du tas. (b) Photographie de la ségrégation observée dans un sablier (photographie Stéphane Bourlès GMCM). 11

1.8 (a) Mélangeur convectif à pales (d'après une documentation technique de Gericke Industries S.A.) .(b) De gauche à droite et de haut en bas : schéma d'un mélangeur cylindrique à rubans (d'après une documentation technique de Hosokawa Micron S.A.), photographie de rubans (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.), photographies de mélangeurs hémicylindriques à doubles pales (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.), photographie d'une pale (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.). 13

1.9 (a) Photographie d'un mélangeur à vis orbitale, (b) schéma d'un mélangeur à vis orbitale (d'après une documentation technique de Hosokawa Micron S.A.), (c) schéma d'un mélangeur à vis verticale. 14

1.10 Schémas de mélangeurs à double cône d'après *Berthiaux* (2002) : (a) configuration horizontale, (b) configuration verticale. 14

1.11 Schémas de mélangeurs à double cuve : (a) mélangeur de type V, (b) mélangeur de type Y. 15

1.12 Mélangeur en conteneur à cuve cubique (d'après une documentation technique de Lessines Industries S.A.). 16
1.13 Photographie d'un turbula (d'après une documentation technique de Artisan Scientific). 16
1.14 Mélangeur à lit fluidisé d'après *Fan et al.* (1990). 18
1.15 Schémas de mélangeurs en silos : (a) mélangeur en silo avec mini silos, (b) mélangeur en silo avec chicanes, (c) mélangeur en silo avec collecteurs. . . . 19
1.16 Photographie d'un mélangeur en ligne d'après *Guyon et Hulin* (1997). . . . 19
1.17 Deux types de porosité : (a) la porosité d'interstice, (b) la porosité de fissure. 20
1.18 Les structures ordonnées pour des empilements de sphères monotailles : (a) cubique simple, (b) cubique centré, (c) cubique à faces centrées et (d) hexagonal compact. 21
1.19 Photographie d'un empilement de cylindres de Schneebeli biréfringents. Les chaînes de forces sont traduites par une luminosité plus intense (photographie : Madani Ammi). 22
1.20 Schéma 2D illustrant les différents volumes accessibles ou non accessibles lors du passage d'un fluide. 23
1.21 Schéma illustrant la définition de la tortuosité : $T = L'/L$. 24
1.22 Schéma illustrant le rapport D/d seuil au-dessus duquel les particules sont susceptibles de rester piégées dans l'empilement. 25
1.23 Illustration d'une cavité tétraédrique. Il s'agit de la plus petite cavité que l'on peut observer dans un empilement de sphères monotailles. La petite sphère s'inscrit juste dans cette cavité. Le rapport des diamètres entre les grosses et la petite sphère vaut alors approximativement 4,45. 25
1.24 Distribution $p(k_0)$ de taille des cavités. k_0 représente le rayon de la cavité en unité de rayon des grosses sphères. 26
1.25 Variation du temps moyen de transit $\langle T \rangle$ en fonction de la hauteur de l'empilement H pour des particules percolantes de diamètre $d = 0{,}7$ mm dans un empilement aléatoire de sphères de diamètre $(\square)D = 6$ mm, $(\bigcirc)D = 10$ mm et $(\triangle)D = 16$ mm. Figure extraite de *Ippolito et al.* (2000). 37
1.26 Résultats expérimentaux d'après *Ippolito et al.* (2000). (a) Évolution de la variance des positions dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction de la hauteur H pour $D = 16$ mm et $(+)d = 0{,}7$ mm, $(\times)d = 1$ mm et $(*)d = 2$ mm. (b) Influence de la taille des particules constituant le milieu poreux. $\langle R^2 \rangle$ en fonction de H pour $(\square)D = 6$ mm, $(\bigcirc)D = 10$ mm et $(\triangle)D = 16$ mm. 38

2.1 Schéma du montage expérimental. 42
2.2 Schémas du dispositif de largage. Celui-ci est constitué d'une boîte en téflon munie d'une trappe constituée de deux portes. Ces portes sont maintenues fermées par le biais d'un électroaimant commandé par l'ordinateur. (a) Vue de côté, (b) vue de dessous (c) vue de côté lorsque la trappe est en position ouverte. 42

2.3 Schéma du tiroir amovible qui délimite la zone de mesure. 43
2.4 Vue schématique d'une lamelle. 44
2.5 Photographie du réceptacle compartimenté. 44
2.6 Schéma du distributeur de billes muni des lamelles permettant l'écartement rapide des portes. Nous avons également représenté les fausses portes permettant de garantir la symétrie du lâcher. 45
2.7 Évolution du temps moyen de transit en fonction de la hauteur h, pour deux hauteurs H de l'empilement de grosses sphères. 45
2.8 Exemple de signal recueilli sur la balance piézoélectrique. Le signal est pris directement sur le matériau piézoélectrique et est filtré par un filtre passe bas réglé à 2 kHz. On s'affranchit ainsi du temps de réaction de la balance. 47
2.9 Exemple de distribution des temps de transit à la sortie d'un milieu poreux de hauteur $H = 16$ cm, pour des lâchers de $N = 20\,075$, $N = 43\,291$ et $N = 97\,734$ particules avec un rapport de taille de $D/d = 16$. 47
2.10 Exemples de données expérimentales normalisées. Un ajustement avec la loi (2.1) est également représenté. 48
2.11 Exemples de données expérimentales. Des ajustements avec une loi de type (2.1) en donnant plus de poids aux faibles valeurs des temps de résidence sont également représentés. 49
2.12 Ajustement de courbes d'élutriation avec la loi (2.2) pour $N = 48366$ et $N = 81394$. 50
2.13 Évolution du temps moyen de transit en fonction de la hauteur H du milieu poreux, pour des particules d'acier de diamètre $d = 1$ mm et des sphères de verre telles que $D = 16$ mm. Trois séries de valeurs correspondant à des valeurs de N_p différentes sont représentées. Nous avons également représenté les temps moyens de transit mesurés pour $H/D = 1{,}5$. La grande dispersion des valeurs mesurées traduit la non-reproductibilité de l'expérience pour les faibles valeurs de H/D. 51
2.14 Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules, pour une hauteur $H = 16$ cm. 52
2.15 Évolution du temps moyen de résidence avec le paramètre N_p pour différentes hauteurs H. 53
2.16 Évolution du temps moyen de transit en fonction du rapport de taille pour un lâcher de $N = 30\,000$ particules d'acier de diamètre $d = 1$ mm au-dessus de plusieurs empilements de billes de verre de diamètres différents. 54
2.17 Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules pour des lâchers de particules d'acier de diamètre 1 mm et un milieu poreux tel que $H = 8$ cm et $D = 12$ mm. 55
2.18 Évolution du temps moyen de transit avec le paramètre N_p pour deux rapports de taille D/d et pour des lâchers de particules d'acier de diamètre 1 mm. Le milieu poreux est tel que $H = 8$ cm. 55
2.19 Valeurs des coefficients de dispersion dans la direction de l'écoulement en fonction du paramètre N_p pour différentes hauteurs H. 56

2.20 Exemple de distribution spatiale des billes obtenue à la sortie de l'empilement. Cette distribution correspond à un lâcher de 100 000 billes d'une hauteur de 8 cm. 57
2.21 Exemple de distribution spatiale des billes obtenue à la sortie de l'empilement. Un ajustement avec une loi normale est également représenté. 58
2.22 Figure illustrant l'étalement de la distribution des particules à la sortie de l'empilement lorsque la hauteur H varie. Ces distributions correspondent à des lâchers de 100 000 particules d'acier de diamètre 1 mm. 58
2.23 Évolution de $\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle$ avec la hauteur H de l'empilement. Les billes constituant le milieu poreux sont des billes de verre de diamètre 16 cm. Les particules utilisées sont des billes d'acier telles que $D/d = 16$. 59
2.24 Évolution du coefficient de dispersion latéral en fonction du nombre de particules pour un rapport de taille $D/d = 16$. 60
2.25 Évolution de $\left\langle (\Delta R)^2 \right\rangle$ avec la hauteur H de l'empilement. Les billes constituant le milieu poreux sont des billes de verre de diamètre 16 cm. Les particules utilisées sont des billes de verre telles que $D/d = 16$. L'encadré représente l'évolution du coefficient de dispersion latéral en fonction du nombre de particules. 60
2.26 Évolution du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules pour des petites sphères de verre de diamètre $d = 1$ mm. Cette même évolution pour des particules d'acier est également représentée. 62

3.1 Exemple d'empilement de 70 000 sphères généré avec l'algorithme de Powell. 68
3.2 Exemple de profil de compacité d'un empilement généré via l'algorithme de Powell. L'encart montre que la compacité décroît jusqu'à une valeur nulle sur une hauteur de l'ordre de deux diamètres de grains. 70
3.3 Représentation de la gestion d'une succession d'évènements dans un modèle de type Event-Driven. Les particules sont en général à des dates différentes et leurs trajectoires sont déterministes entre deux collisions. 71
3.4 Illustration d'une collision entre deux sphères dures i et j. 72
3.5 Schéma illustrant l'action du coefficient de restitution dans la direction normale. 73
3.6 Schéma illustrant l'action du coefficient de restitution dans la direction tangentielle. 74
3.7 Exemple d'empilement de 20 000 petites sphères généré avec l'algorithme de Powell. 76
3.8 Hauteur z d'une balle rebondissant sur un plan horizontal en fonction du temps. 78
3.9 Représentation schématique de la trajectoire de deux particules : (a) lors d'une collision dans le cas d'un modèle de sphères molles, (b) dans le cas d'un modèle de sphères dures. 80
3.10 Illustration d'une collision entre deux sphères déformables i et j. 82

3.11 Séquences de schémas d'une collision entre deux particules. La séquence du haut correspond au cas où les deux sphères se recouvrent pendant la collision, tandis que la séquence du bas correspond au cas où les sphères se déforment. Ces séquences illustrent l'artéfact donnant lieu à l'apparition d'une force d'interaction attractive (rectangle en pointillés). 85
3.12 Représentation schématique du modèle de Force de Walton et Braun (*Walton et Braun*, 1986). 87
3.13 Schéma représentant les forces agissant sur un pavé posé sur une surface plane. 88
3.14 *a*) Loi de Coulomb, *b*) loi de Coulomb régularisée par un segment de droite de pente $-\nu_t$. 89
3.15 Dans le modèle de Cundall et Strack, on définit le recouvrement tangentiel de la particule i lors de la collision entre deux particules i et j par la relation (3.39). 90
3.16 Représentation à deux dimensions du principe de la liste de Verlet. Seules les particules se trouvant à moins d'une distance de L^{Verlet} de la sphère noire ont une chance d'interagir avec elle. Les numéros de ces sphères sont donc stockés dans une liste que l'on appelle liste de Verlet. 96
3.17 Représentation à deux dimensions de la méthode des cellules. La particule noire ne peut interagir qu'avec les particules dont les centres se trouvent dans la zone hachurée. 98
3.18 a)Illustration de l'inefficacité d'un simple réseau dans un système bidisperse. b)Illustration de l'utilisation d'un réseau à mailles fines. 99
3.19 Illustration du principe de la recherche des collisions via deux maillages de tailles différentes. 101

4.1 Série de clichés pris à différents instants illustrant la pénétration et l'écoulement de particules dans un milieu poreux via l'utilisation de la modélisation numérique. Pour permettre une visualisation convenable, seulement la moitié du milieu poreux est représentée. Ces illustrations ont été obtenues par la méthode de dynamique moléculaire de sphères molles. 104
4.2 Évolution de l'altitude moyenne d'un empilement de 5 000 particules en écoulement en fonction du temps pour $H/D = 86$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode ED. 105
4.3 Évolution de la vitesse d'écoulement d'un paquet de 5 000 particules en fonction du temps. L'origine des temps t_0 est prise au moment où le paquet de particules entre dans le milieu poreux. On constate dans un premier temps une phase d'accélération puis dans un second temps on observe un phénomène de relaxation. Cette relaxation suit une loi exponentielle représentée en pointillés. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type Event-Driven avec $H/D = 86$. 106
4.4 Distribution des t_{init} pour un lâcher de 5 000 particules avec $D/d = 10$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$, $e_{\text{pp}} = 0{,}99$ et $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD. 107

4.5 Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du nombre de particules pour deux rapports de taille D/d obtenue par la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 107
4.6 Distribution des t_{init} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement dans la structure poreuse. Ces résultats ont été obtenus avec la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 108
4.7 Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du rapport de taille D/d. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 109
4.8 Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction de $(D/d)^{-3}$. Des ajustements linéaires sont également représentés. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 109
4.9 Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement et pour deux rapports de tailles D/d. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 110
4.10 Évolution du temps moyen de passage à la profondeur H_{init} en fonction du coefficient de restitution e_{pp} pour différentes valeurs du nombre N de particules en écoulement. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$. 111
4.11 Évolution du temps moyen de transit avec N_p pour différentes hauteurs H. Ces résultats ont été obtenus par la méthode de type Event-Driven avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 112
4.12 Évolution du temps moyen de transit avec N_p pour $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode de type Event-Driven avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 112
4.13 Évolution du temps moyen de transit avec le paramètre N_p. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $D/d = 10$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$, $e_{\text{pp}} = 0{,}99$ et $H/D = 14$. 113
4.14 Évolution du temps moyen de transit avec le rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N avec $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus en utilisant la méthode ED avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 114
4.15 Évolution du temps moyen de transit avec le rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N avec $H/D = 14$. Ces résultats ont été obtenus en utilisant la méthode de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 115
4.16 Évolutions de la vitesse moyenne de percolation atteinte dans l'état stationnaire en fonction du rapport de taille D/d pour $N = 1\,000$, $H/D = 14$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 115
4.17 Évolution du temps moyen de transit en fonction de $(D/d)^{-3}$ pour différentes valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD avec $H/D = 14$, $e_{\text{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\text{pp}} = 0{,}99$. 116

4.18 Évolution du temps moyen de transit avec le coefficient de restitution e_{pg} obtenue par une simulation de type Event-Driven avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 117
4.19 Évolution du temps moyen de transit avec le coefficient de restitution e_{pg} obtenue par la simulation de type MD. Nous présentons les résultats pour différents nombres de particules N avec $H/D = 14$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $D/d = 10$. 117
4.20 Évolution du temps moyen de transit en fonction du rapport de taille pour différentes valeurs du coefficient de restitution e_{pg}. Ces résultats ont été obtenus avec l'algorithme de type Event-Driven pour un écoulement de $N = 1\,000$ particules avec $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 118
4.21 Évolution de la vitesse moyenne adimensionnée, mesurée dans la partie stationnaire, en fonction de $(1 - e_{pg})^{1/4}$ pour différentes valeurs de N avec $e_{pp} = 0{,}99$, $H/D = 14$ et $D/d = 10$. Ces résultats ont été obtenus via la méthode MD. 119
4.22 Évolution de la vitesse moyenne de percolation adimensionnée, mesurée dans l'état stationnaire, en fonction du coefficient de restitution e_{pp} pour $N = 1\,000$ et $N = 2\,000$ via la méthode ED avec $H/D = 14$, $D/d = 10$ et $e_{pg} = 0{,}84$. 119
4.23 Évolution de la vitesse moyenne de percolation adimensionnée, mesurée dans l'état stationnaire, en fonction du coefficient de restitution e_{pp} via la méthode de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$, $N = 2\,000$ et $D/d = 10$. 120
4.24 Allure de la dispersion de 4 000 particules dans la direction de l'écoulement ($t = 0$, $t = 1{,}8$ s, $t = 3{,}8$ s, $t = 5{,}8$ s, $t = 7{,}8$ s et $t = 9{,}8$ s). 121
4.25 Distribution des particules dans la direction de l'écoulement. Ces résultats ont été obtenus via l'utilisation de la méthode ED avec $N = 8\,000$, $H/D = 86$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 121
4.26 Distribution des particules dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Ces résultats ont été obtenus via l'utilisation de la méthode ED avec $N = 8\,000$, $H/D = 86$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. Des ajustements gaussiens sont également représentés. 122
4.27 Évolution de $\langle(\Delta R)^2\rangle$ avec t obtenue via la méthode MD avec $N = 8\,000$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$. 123
4.28 Évolution de $\langle(\Delta z)^2\rangle$ avec t obtenue via la méthode MD avec $N = 8\,000$, $D/d = 10$, $e_{pg} = 0{,}84$, $e_{pp} = 0{,}99$ et $H/D = 14$. 123
4.29 Évolution des coefficients de dispersion en fonction de N_p pour un rapport de taille $D/d = 10$. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 124
4.30 Évolution des coefficients de dispersion en fonction de N_p pour un rapport de taille $D/d = 16$. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 125
4.31 Évolution des coefficients de dispersion dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du rapport de taille D/d pour différentes valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{pg} = 0{,}84$ et $e_{pp} = 0{,}99$. 125

4.32 Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du rapport de taille D/d pour plusieurs valeurs de N. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type MD avec $H/D = 14$, $e_{\mathrm{pg}} = 0{,}84$ et $e_{\mathrm{pp}} = 0{,}99$. Le coefficient de dispersion $D^*_{//}$ obtenu par un ajustement avec la loi (2.2) est également représenté. 126
4.33 Évolution du coefficient de dispersion $D_{\perp}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour $N = 1\,000$, $N = 2\,000$ et $N = 5\,000$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $H/D = 14$ et $e_{\mathrm{pp}} = 0{,}99$. 127
4.34 Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pg} pour $N = 1\,000$, $N = 2\,000$ et $N = 5\,000$. Ces résultats ont été obtenus par la méthode MD avec $H/D = 14$ et $e_{\mathrm{pp}} = 0{,}99$. Le coefficient de dispersion $D^*_{//}$ obtenu par un ajustement avec la loi (2.2) est également représenté. 127
4.35 Évolution du coefficient de dispersion $D_{\perp}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pp}. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{\mathrm{pg}} = 0{,}84$. 128
4.36 Évolution du coefficient de dispersion $D_{//}$ en fonction du coefficient de restitution e_{pp}. Ces résultats ont été obtenus par une simulation de type dynamique moléculaire de sphères molles avec $N = 2\,000$, $D/d = 10$, $H/D = 14$ et $e_{\mathrm{pg}} = 0{,}84$. 128

5.1 Illustration du lâcher de deux paquets de particules au-dessus du milieu poreux. 132
5.2 Distribution des particules de chaque espèce dans la direction perpendiculaire à l'écoulement à différents instants qui sont respectivement : $t = 0{,}22$ s, $t = 0{,}43$ s, $t = 0{,}65$ s, $t = 0{,}87$ s, $t = 1{,}09$ s, $t = 1{,}30$ s. 133
5.3 Distribution, dans une direction perpendiculaire à l'écoulement, de la position des particules de chaque espèce à la sortie de l'empilement. 134
5.4 Évolution de la vitesse d'écoulement pour chaque type de particules pour deux valeurs de N_p. 134
5.5 Évolution des coefficients de dispersion mesurés dans la direction de l'écoulement en fonction du rapport de taille d/d_2. 135
5.6 Évolution des coefficients de dispersion mesurés dans la direction perpendiculaire à l'écoulement en fonction du rapport de taille d/d_2. 136
5.7 Évolution de l'indice de mélange de Rose (équation (5.15)) en fonction du temps avec $l_{\mathrm{sep}} = 0{,}7D$ et $N_p = 25$. 139
5.8 Évolution de l'indice de mélange de Rose (équation (5.15)) en fonction de la profondeur atteinte par le paquet de particules, avec $l_{\mathrm{sep}} = 0{,}7D$ et $N_p = 25$. 140
5.9 Évolutions de l'indice de mélange M_∞ en fonction du rapport de taille d/d_2 pour des lâchers de deux paquets de particules de volume identique. Deux évolutions pour deux valeurs de N_p sont représentées avec $l_{\mathrm{sep}}/D = 1$. . . . 140

5.10 Évolution de l'indice de mélange M en fonction du temps pour différentes valeurs de l_{sep} avec $N_p = 25$ et $d/d_2 = 1{,}1$. 141
5.11 Évolution de l'indice de mélange M_∞ en fonction de la distance initiale l_{sep} séparant les deux paquets de particules avec $N_p = 25$ et $d/d_2 = 1{,}1$. 141

B.1 Réseau en dimension 1. 161

E.1 Schéma illustrant la méthode des cellules liées à 1D. 167

F.1 Schéma illustrant à une dimension notre méthode des cellules doublement liées 169
F.2 Illustration de l'emploi d'une liste à lien doubles. a) État des liens après initialisation de la liste. b) Illustration du principe de la mise à jour des liens après que la sphère 6 est passée de la cellule 3 à la cellule 4. 170

Bibliographie

Ahrens J. P. (2000), A Fall-Velocity Equation, *Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering*, **126**(2), 99–102.

Alder B. J. et Wainwright T. E. (1959), Studies in Molecular Dynamics. I. General Method., *J. Chem. Phys.*, **31**(2), 459–466.

Alder B. J., Frankel S. P., et Lewinson V. A. (1955), Radial distribution function calculated by the Monte-Carlo Method for a hard sphere fluid, *J. Chem. Phys.*, **23**(3), 417–419.

Allen M. P. et Tildesley D. J. (1989), *Computer simulation of liquids*, Clarendon Press, New York, NY, USA.

Archie G. E. (1942), The Electrical Resistivity Log as an Aid in Determining Some Reservoir Characteristics, *Trans A.I.M.E.*, **146**, 54–62.

Bak P., Tang C., et Wiesenfeld K. (1987), Self-organized criticality : An explanation of the 1/f noise, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(4), 381–384.

Baker L. (1977), Effects of dispersion and dead-end pore volume in miscible flooding, *Society of Petroleum Engineers Journal*, **17**, 219–227.

Baldock T. E., Tomkins M. R., Nielsen P., et Hughes M. G. (2004), Settling velocity of sediments at high concentrations, *Coastal Engineering*, **51**(1), 91–100.

Barker G. C. et Mehta A. (1993), Size segregation mechanisms, *Nature*, **364**, 486–487.

Baxter G. W. et Behringer R. P. (1990), Cellular automata models for granular flow, *Phys. Rev. A (Rapid Communication)*, **42**(2), 1017–1020.

Baxter G. W. et Behringer R. P. (1991), Cellular automata models for the flow of granular materials, *Physica D*, **51**, 465–471.

Bear J. (1972), *Dynamics of fluids in porous media*, 764 pp., Elsevier, New York.

Ben-Aim R. (1970), Étude de la texture des empilements de grains : application à la détermination de la perméabilité des mélanges binaires en régime moléculaire, intermédiaire, laminaire, Thèse de doctorat, Univerité des Sciences de Nancy.

Benito J., Meglio G., Ippolito I., Re M., et Vidales A. (2007), Exit distribution function crossover in a Galton board, *Granular Matter*, **9**(3), 159–168.

Berkowitz B. et Scher H. (2001), The Role of Probabilistic Approaches to Transport Theory in Heterogeneous Media, *Transport in Porous Media*, **42**(1), 241–263.

Berkowitz B., Scher H., et Silliman S. E. (2000), Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, **36**, 149–158.

Berthiaux H. (2002), *Mélange et homogénéisation des solides divisés*, pp. J3397.1–J3397.20, Techniques de l'ingénieur, Paris, FRANCE.

Boss J. (1992), Mixing time of grain materials, *Chemical Engineering Science*, **47**, 4027–4035.

Bourbié T. et Zinszner B. (1985), Hydraulic and Acoustic Properties as a function of Porosity in Fontainebleau Sandstone, *J. Geophys. Res.*, **90**(B13), 11,524–11,532.

Bourbié T., Coussy O., et B.Zinszner (1986), *Acoustique des milieux poreux*, 360 pp., Edition Technip.

Bridgwater J. et Ingram B. A. (1971), Rate of spontaneous inter-particle percolation, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, **49**, 163–169.

Bridgwater J., Sharpe N. W., et Stocker D. C. (1969), Particle mixing by Percolation, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, **47**, 114–119.

Brigham W. (1974), Mixing equations in short laboratory cores, *Society of Petroleum Engineers Journal*, **14**, 91–99.

Brilliantov N. V., Spahn F., Hertzsch J.-M., et Pöschel T. (1996), Model for collisions in granular gases, *Phys. Rev. E*, **53**(5), 5382–5392.

Bruno L. (2002), Diffusion et mélange dans des milieux granulaires, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1.

Bruno L., Ippolito I., et Calvo A. (2001), Granular mixing in a Galton board, *Granular Matter*, **3**(1), 83–86.

Bruno L., Calvo A., et Ippolito I. (2003), Dispersive flow of diks through a two-dimensional Galton board, *Eur. Phys. J. E*, **11**, 131–140.

Buslik D. (1973), A proposed universal homogeneity and mixing index, *Powder Technol*, **7**, 111–116.

Cantelaube F. et Duparcmeur Y. L. (1995), Geometrical analysis of avalanches in a 2D drum, *J. Phys. I France*, **5**, 581–596.

Carman P. C. (1961), *L'écoulement des gaz à travers les milieux poreux*, Presses Universitaires de France.

Chialvo A. A. et Debenedetti P. G. (1990), On the use of the Verlet neighbor list in molecular dynamics, *Computer Physics Communications*, **60**(2), 215–224.

Chudikiewicz R. (1961), *Przem. Chem.*, **40**, 48.

Corapcioglu M. Y. et Jiang S. (1993), Colloid-facilitated groundwater contaminant transport, *Water Resour. Res.*, **29**, 2215–2226.

Coulomb C. A. (1781), Théorie des Machines Simples, *Comptes rendus de l'Académie des sciences*, **10**, 161–332.

COULSON J. M. et MAITRA N. K. (1950), The mixing of solid particles, *Industrial Chemistry*, **February**, 55–59.

CROOKS M. et HO R. (1975), *Aust. J. Pharm. Sci.*, **NS4**, 85.

CUNDALL P. et STRACK O. (1979), A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*, **29**(1), 47–65.

DAM J. V., DE ROOIJ G., HEINEN M., et STAGNITTI F. (2004), Concepts and dimensionality in modeling unsaturated water flow and solute transport, in *Unsaturated-zone Modeling : Progress, Challenges and Applications*, edited by R. Feddes, G. de Rooij, et J. van Dam, Proceedings of the 13th ISCA International Conference, pp. 1–36, The International Society for Computers and Their Applications - ISCA.

DANCKWERTS P. V. (1953), Continuous flow systems : Distribution of residence times, *Chemical Engineering Science*, **2**(1), 1–13.

D'ANGELO M. V., FONTANA E., CHERTCOFF R., et ROSEN M. (2003), Retention phenomena in non-Newtonian fluids flow, *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, **327**(1-2), 44–48.

DELTOUR P. et BARRAT J.-L. (1997), Quantitative Study of a Freely Cooling Granular Medium, *J. Phys. I France*, **7**, 137–151.

DÉSÉRABLE D. (1998), Simulation de milieux granulaires par automate cellulaire. Problèmes de topologie et d'interconnexion associés, Thèse de doctorat, IRISA.

DÉSÉRABLE D. et MARTINEZ J. (1993), Using a cellular automaton for the simulation of flow of granular media, in *Powders and Grains 93*, edited by C. Thornton, pp. 345–350, Balkema, Rotterdam.

DEVILLARD P. (1990), Scaling behaviour in size segregation ("Brazil Nuts"), *J. Phys. France*, **51**(5), 369–373.

DIEULIN A. (1980), Propagation de pollution dans un aquifère alluvial, l'effet de parcours, Thèse de doctorat, Université Paris-6.

DIPPEL S. (1998), Microscopic dynamics of granular materials, PhD thesis, Höchstleistungsrechenzentrum Jül-3510.

DRAHUN J. A. et BRIDGWATER J. (1983), The mechanisms of free surface segregation, *Powder Technology*, **36**(1), 39–53.

DRAKE L. (1949), Pore-Size Distribution in Porous Materials : Application of high pressure mercury porosimetry to cracking catalysts, *Industrial and Engineering Chemistry*, **41**, 780–785.

DRAZER G., CHERTCOFF R., BRUNO L., et ROSEN M. (1999), Concentration dependence of diffusion-adsorption rate in activated carbon, *Chemical Engineering Science*, **54**(19), 4285–4291.

DU Y., LI H., et KADANOFF L. P. (1995), Breakdown of Hydrodynamics in a One-Dimensional System of Inelastic Particles, *Phys. Rev. Lett.*, **74**(8), 1268–1271.

DUKE T. A. J., BARKER G. C., et MEHTA A. (1990), A Monte Carlo Study of Granular Relaxation, *Europhys. Lett.*, **13**(1), 19–24.

DULLIEN F. (1979), *Porous Media : Fluid Transport and Pore Structure*, Academic Press.

DURAN J. (2000), *Sands, Powders, and Grains*, Springer, New York.

DURAN J., MAZOZI T., CLÉMENT E., et RAJCHENBACH J. (1994), Size segregation in a two-dimensional sandpile : Convection and arching effects, *Phys. Rev. E*, **50**(6), 5138–5141.

EINSTEIN A. (1922), *Untersuchung über die Theorie der Brownschen Bewegungen.*, *Ostwalds Klassiker der exakten Wissenschaften*, vol. 199, 72 pp., Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, Germany.

FAN L., CHEN S., et WATSON C. (1970), Solids Mixing, *Ind. Eng. Chem.*, **62**(7), 53–69.

FAN L. T., CHEN Y.-M., et LAI F. S. (1990), Recent developments in solids mixing, *Powder Technology*, **61**(3), 255–287.

FOERSTER S. F., LOUGE M. Y., CHANG H., et ALLIA K. (1994), Measurements of the collision properties of small spheres, *Physics of Fluids*, **6**(3), 1108–1115.

FRENKEL D. et SMIT B. (1996), *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, San Diego.

FROST H. (1978), Technical Rep., *Tech. Rep. 6*, ONR.

GAYLE J., LACEY O., et GARY J. (1958), Mixing of solids-χ-square as a criterion, *Ind. Eng. Chem*, **50**, 1279–1282.

GEAR C. (1971), *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, Prentice-Hall Series in Automatic Computation, Engelwood Cliffs : Prentice-Hall, 1971.

GEAR C. W. (1967), The Numerical Integration of Ordinary Differential Equations, *Mathematics of Computation*, **21**(98), 146–156.

GOLDSMITH W. (1960), *Impact : The Theory and Physical Behaviour of Colliding Solids*, Edward Arnold (Publishers) Ltd.

GROSSMAN E. L. (1997), Effects of container geometry on granular convection, *Phys. Rev. E*, **56**(3), 3290–3300.

GROSSMAN E. L., ZHOU T., et BEN-NAIM E. (1997), Towards granular hydrodynamics in two dimensions, *Phys. Rev. E*, **55**(4), 4200–4206.

GUYON E. et HULIN J.-P. (1997), *Granites et Fumées : Un peu d'ordre dans le mélange*, 288 pp.

HAFF P. K. et WERNER B. T. (1986), Computer simulation of the mechanical sorting of grains, *Powder Technology*, **48**(3), 239–245.

HARNBY N., EDWARDS M., et NIENOW A. (1992), *Mixing in Process Industries*, Butterworths.

HENRICI P. (1962), *Discrete variable methods in ordinary differential equations*, New York : Wiley, 1962.

HERDAN G. (1960), *Small particles statistic*, Butterworths.

HERTZ H. (1882), Über die Berührung fester elastischer Körper, *J. für die reine u. angew. Math.*, **92**, 156–171.

HILL K. M. et KAKALIOS J. (1995), Reversible axial segregation of rotating granular media, *Phys. Rev. E*, **52**(4), 4393–4400.

HINRICHSEN E. L., FEDER J., et JOSSANG T. (1986), Geometry of random sequential adsorption, *Journal of Statistical Physics*, **44**(5), 793–827.

HOGG R., CAHN D. S., HEALY T. W., et FUERSTENAU D. W. (1966), Diffusional mixing in an ideal system, *Chem. Eng. Sc.*, **21**, 1025–1038.

IPPOLITO I., SAMSON L., et HULIN J. P. (2000), Diffusion of a single particle in a 3D random packing of spheres, *Eur. Phys. J. E*, **3**, 227–236.

JAEGER H. M. et NAGEL S. R. (1992), Physics of the Granular State, **255**(5051), 1523–1531.

JEAN M. (1995), *Frictional contact in collections of rigid or deformable bodies : numerical simulation of geomaterial motions.*, pp. 463–486, Elsevier Sciences Publishers B.V.

JEAN M. et MOREAU J. J. (1992), Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections, in *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, pp. 31–48, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne, Switzerland.

JIMÉNEZ J. A. et MADSEN O. S. (2003), A Simple Formula to Estimate Settling Velocity of Natural Sediments, *Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering*, **129**(2), 70–78.

JODREY W. S. et TORY E. M. (1985), Computer simulation of close random packing of equal spheres, *Phys. Rev. A*, **32**(4), 2347–2351.

JOHNSON D. L. et SEN P. N. (1981), Multiple scattering of acoustic waves with application to the index of refraction of fourth sound, *Phys. Rev. B*, **24**(5), 2486–2496.

JULLIEN R. et MEAKIN P. (1992), Random sequential adsorption with restructuring in two dimensions, *Journal of Physics A : Mathematical and General*, **25**(4), L189–L194.

JULLIEN R., JUND P., CAPRION D., et QUITMANN D. (1996), Computer investigation of long-range correlations and local order in random packings of spheres, *Phys. Rev. E*, **54**(6), 6035–6041.

KREFT A. (1981), On the boundary conditions of flow through porous media and conversion of chemical flow reactors, *Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Tech.*, **29**, 521–529.

KREFT A. et ZUBER A. (1978), On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions, *Chemical Engineering Science*, **33**(11), 1471–1480.

KREFT A. et ZUBER A. (1979), On the use of the dispersion model of fluid flow, *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, **30**(11), 705–708.

KRETZSCHMAR R., BARMETTLER K., GROLIMOUND D., et YAN Y. (1997), Experimental determination of colloid deposition rates and collision efficiencies in natural porous media, *Water Resour. Res.*, **33**(5), 1129–1138.

LACEY P. M. C. (1954), Developments in the theory of particle mixing, *J. Appl. Chem.*, **4**, 257–268.

LANDAU L. et LIFSCHITZ E. (1967), *Theory of elasticity*, MIR, Moscow.

LEE J. (1994), Density waves in the flows of granular media, *Phys. Rev. E*, **49**(1), 281–298.

LIFSHITZ J. M. et KOLSKY H. (1964), Some experiments on anelastic rebound, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **12**, 35–43.

LOMINÉ F. et OGER L. (2006), Transport of small particles through a 3D packing of spheres : experimental and numerical approaches, *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, **2006**(07), P07,019.

LUDING S. (1997), Surface Waves and Pattern Formation in Vibrated Granular Media, in *Powders and Grains 97*, pp. 373–376, Balkema, Amsterdam.

LUDING S. (1998a), *Die Physik trockener granularer Medien*, Logos Verlag, Berlin.

LUDING S. (1998b), Collisions & Contacts between two particles, in *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, edited by H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, et S. Luding, p. 285, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

LUDING S., CLÉMENT E., BLUMEN A., RAJCHENBACH J., et DURAN J. (1994a), Onset of convection in molecular dynamics simulations of grains, *Phys. Rev. E*, **50**(3), R1762–R1765.

LUDING S., CLÉMENT E., BLUMEN A., RAJCHENBACH J., et DURAN J. (1994b), Anomalous energy dissipation in molecular-dynamics simulations of grains : The detachment effect, *Phys. Rev. E*, **50**(5), 4113–4122.

LUDING S., CLÉMENT E., RAJCHENBACH J., et DURAN J. (1996), Simulations of pattern formation in vibrated granular media, *Europhysics Letters*, **36**(4), 247–252.

MASLIYAH J. et BRIDGWATER J. (1974), Particle percolation : a numerical study, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, **52**, 31–42.

MASSOL-CHAUDEUR S. (2000), Caractérisation de l'état de mélange de poudres : cas de mélanges faiblement dosés, Thèse de doctorat, Institut National Polytehnique de Lorraine.

MATTHEE H. (1968), Segregation phenomena relating to bunkering of bulk materials : Theoretical considerations and experimental investigations, *Powder Technology*, **1**(5), 265–271.

MCCARTHY J. J. (1998), Mixing, segregation, and flow of granular materials, PhD thesis, Northwestern University.

MCNAMARA S. et YOUNG W. R. (1992), Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium, *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, **4**(3), 496–504.

MCNAMARA S. et YOUNG W. R. (1994), Inelastic collapse in two dimensions, *Phys. Rev. E*, **50**(1), R28–R31.

McNamara S. et Young W. R. (1996), Dynamics of a freely evolving, two-dimensional granular medium, *Phys. Rev. E*, **53**(5), 5089–5100.

M.H.Wesmacott et Linehan P. (1960), *Proc. Int. Seed Test. Assoc.*, **25**, 15.

Miles S. (1962), *Proc. Int. Seed Test. Assoc.*, **27**, 407.

Miles S., Carter A., et Shenberger L. (1960), *Proc. Int. Seed Test. Assoc.*, **25**, 122.

Mindlin R. D. et Deresiewicz H. (1953), Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces, *J. of Appl. Mech.*, **20**, 327–344.

Monicard R. (1965), *Caractéristiques des roches réservoirs. Analyse des carottes. Cours de production, tome 1*, 169 pp., Institut français du pétrole.

Moreau J. J. (1988), *Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics*, pp. 1–82, 302.

Moreau J. J. (1997), Numerical Investigation of Shear Zones in Granular Materials, in *Friction, Arching and Contact Dynamics*, edited by D. E. Wolf et P. Grassberger, World Scientific, Singapore.

Moura M., Ferreira P., et Figueiredo M. (2005), Mercury intrusion porosimetry in pulp and paper technology, *Powder Technology*, **160**(2), 61–66.

Nauman E. B. (1981), Residence time distributions in systems governed by the dispersion equation, *Chemical Engineering Science*, **36**(6), 957–966.

Nityanand N., Manley B., et Henein H. (1986), An analysis of radial segregation for different sized spherical solids in rotary cylinders, *Metall. Trans. B*, **17B**, 247–257.

Oden J. T. et Martins J. A. C. (1985), Models and computational methods for dynamic friction phenomena, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **52**(1-3), 527–634.

Oger L. (1987), Etudes des corrélations structure-proprietés dans les milieux granulaires modèles, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1.

Oger L., Troadec J. P., Bideau D., Dodds J. A., et Powell M. J. (1986), Properties of disordered sphere packings I. Geometric structure : Statistical model, numerical simulations and experimental results, *Powder Technology*, **46**(2-3), 121–131.

Peng G. et Herrmann H. J. (1994), Density waves of granular flow in a pipe using lattice-gas automata, *Phys. Rev. E*, **49**(3), 1796–1799.

Philippe P. (2002), Etude théorique et expérimentale de la densification des milieux granulaires, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1.

Pollard B. L. et Henein H. (1989), Kinetics of radial segregation of different sized irregular particles in rotary cylinders, *Canadian Metallurgical Quarterly*, **28**(1), 29–40.

Poole K., Taylor R., et Wall G. (1964), *Trans. Inst. Chem. Eng.*, **42**, T166.

Pöschel T. et Herrmann H. J. (1995), Size Segregation and Convection, *Europhys. lett.*, **29**, 123–128.

POURNIN L., LIEBLING T. M., et MOCELLIN A. (2001), Molecular-dynamics force models for better control of energy dissipation in numerical simulations of dense granular media, *Phys. Rev. E*, **65**(1), 011,302.

POUX M., FAYOLLE P., BERTRAND J., BRIDOUX D., et BOUSQUET J. (1991), Powder mixing : Some practical rules applied to agitated systems, *Powder Technology*, **68**(3), 213–234.

POWELL M. J. (1980), Computer-simulated random packing of spheres, *Powder Technology*, **25**(1), 45–52.

PRESS W. H., TEUKOLSKY S. A., VETTERLING W. T., et FLANNERY B. P. (1992), *Numerical recipes in C*, second ed., Cambridge University Press, Cambridge.

RADJAI F., JEAN M., MOREAU J.-J., et ROUX S. (1996), Force Distributions in Dense Two-Dimensional Granular Systems, *Phys. Rev. Lett.*, **77**(2), 274–277.

RANZ W. (1952), Friction and transfer coefficients for single particle and packed beds, *Chem. Eng. Prog.*, **48**, 247–253.

RÉNYI A. (1958), On a one-dimensional problem concerning random space filling, *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.*, **3**(no 1/2), 109–127.

RISTO G. H. et HERRMANN H. J. (1994), Density patterns in two-dimensional hoppers, *Phys. Rev. E*, **50**(1), R5–R8.

RISTOW G. H. (1992), Simulating Granular Flow with Molecular Dynamics, *J. Phys. I*, **2**(6), 649–662.

RISTOW G. H. (1994), Particle mass segregation in a two-dimensional rotating drum, *Europhys. Lett.*, **28**(2), 97–101.

ROSATO A., STRANDBURG K. J., PRINZ F., et SWENDSEN R. H. (1987), Why the Brazil nuts are on top : Size segregation of particulate matter by shaking, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(10), 1038–1040.

ROSATO A. D., PRINZ F., STANDBURG K. J., , et SWENDSEN R. (1986), Monte Carlo Simulation of Particulate Matter Segregation, *Powder Technol.*, **49**, 59–69.

ROSE H. et ROBINSON D. (1965), *Am. Inst. Chem. Eng.*, **10**, 161.

ROSE H. E. (1959), A suggested equation relating to the mixing of powders and its application to the study of the performance of certain types of machine, *Transactions of the Institution of Chemical Engineering*, **37**, 4–12.

SAMSON L. (1997), Analyse de l'écoulement d'un grain dans des systèmes désordonnés bi- et tridimensionnels, Thèse de doctorat, Université de Rennes1.

SCHÄFER J., DIPPEL S., et WOLF D. E. (1996), Force Schemes in Simulations of Granular Materials, *J. Phys. I France*, **6**, 5–20.

SCHEIDEGGER A. (1961), General theory of dispersion in porous media, *J. Geophys. Res.*, **66**(10), 3273–3278.

SCHOFIELD C. (1970), Assessing mixtures by autocorrelation, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, **48**, T28–T34.

SHIDA K. et KAWAI T. (1989), Cluster formation by inelastically colliding particles in one-dimensional space, *Physica A : Statistical and Theoretical Physics*, **162**(1), 145–160.

SILBERT L. E., ERTAŞ D., GREST G. S., HALSEY T. C., LEVINE D., et PLIMPTON S. J. (2001), Granular flow down an inclined plane : Bagnold scaling and rheology, *Phys. Rev. E*, **64**(5), 051,302.

SMITH J. (1955), *Ind. Eng. Chem.*, **47**, 2240.

STANGE K. (1954), *Chem. Ing. Tech.*, **26**, 331.

STARON L. (2002), Étude numérique des mécanismes de déstabilisation des pentes granulaires, Thèse de doctorat, Institut de Physique du Globe de Paris.

TENDA T., KOMORI S., et MURAKAMI K. (1990), Modeling of mixing in a horizontal gas solid agitated vessel with paddle-blades on double parallel axes, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, **23**, 239–245.

THORNTON C. (1997), Coefficient of restitution for collinear collisions of elastic-perfectly plastic spheres, *Journal of Applied Mechanics*, **64**, 383–386.

TSUJI Y., TANAKA T., et ISHIDA T. (1992), Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder Technol.*, **71**, 239–250.

VALENTIN F. (1967), *Chem. Ing.*, **208**, CE99.

VAN GENUCHTEN M. T. (1981), Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay, *Journal of Hydrology*, **49**(3-4), 213–233.

VAN GENUCHTEN M. T. et ALVES W. J. (1982), Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation, *Technical Bulletin 1661*, Agricultural Research Service, U. S. Department of Agriculture.

VERLET L. (1967), Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Phys. Rev.*, **159**(1), 98–103.

VISSCHER W. M. et BOLSTERLI M. (1972), Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions, *Nature*, **239**, 504–507.

WALTON O. (1982), Explicit particle dynamics model for granular materials, in *Proceedings of the 4th International Conference on Numerical Methods in Geomechanics*, edited by A. Balkema, pp. 1261–1268.

WALTON O. R. (1995), Force models for particle-dynamics simulations of granular materials, in *Mobile Particulate Systems*, edited by E. Guazzelli et L. Oger, pp. 367–379, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

WALTON O. R. et BRAUN R. L. (1986), Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks, *Journal of Rheology*, **30**(5), 949–980.

WANG R. H. et FAN L. T. (1976), Axial Mixing of Grains in a Motionless Sulzer (Koch) Mixer, *Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev.*, **15**(3), 381–388.

WIDOM B. (1966), Random Sequential Addition of Hard Spheres to a Volume, *The Journal of Chemical Physics*, **44**(10), 3888–3894.

WILKINSON D. et EDWARDS S. (1982), Spontaneous interparticle percolation, *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **381**, 33–51.

WILLIAMS J. (1978), The mechanisms of segregation, Course, University of Bradford.

WILLIAMS J. C. (1976), The segregation of particulate materials. A review, *Powder Technology*, **15**(2), 245–251.

WONG P., KOPLIK J., et TOMANIC J. P. (1984), Conductivity and permeability of rocks, *Phys. Rev. B*, **30**(11), 6606–6614.

WOODLE G. R. et MUNRO J. M. (1993), Particle motion and mixing in a rotary kiln, *Powder Technology*, **76**(3), 241–245.

ZHANG Y. et CAMPBELL C. S. (1992), The interface between fluid-like and solid-like behaviour in two-dimensional granular flows, *J. Fluid Mech.*, **237**, 541–568.

ZHOU T. et KADANOFF L. P. (1996), Inelastic collapse of three particles, *Phys. Rev. E*, **54**(1), 623–628.

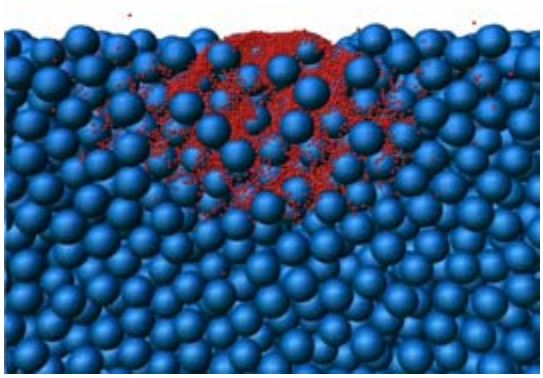
Résumé :

Cette thèse a pour objet l'étude expérimentale et numérique de l'écoulement de particules dans un empilement de sphères plus grosses.

Un dispositif expérimental a été mis au point pour étudier la dispersion latérale et le temps moyen de séjour d'un paquet de particules dans un milieu poreux. Nous avons en particulier déterminé la dépendance du temps moyen de transit en fonction du nombre de particules en écoulement, de la taille des particules et de la hauteur du milieu poreux. Nous avons également caractérisé la dépendance du coefficient de dispersion latéral vis-à-vis du nombre de particules transitant dans la structure poreuse.

Dans un deuxième temps, nous avons développé des modèles de simulations numériques basés sur les méthodes « Event-Driven » et « dynamique moléculaire de sphères molles ». Ceux-ci nous ont permis de compléter l'étude expérimentale en analysant l'influence de divers paramètres supplémentaires. L'accès à l'intérieur du milieu poreux a permis une analyse plus fine de la dispersion des particules.

Enfin, nous avons abordé la possibilité d'utiliser le phénomène de percolation spontanée pour réaliser un mélangeur. Grâce à l'outil numérique, nous avons réalisé et caractérisé des mélanges de particules de tailles différentes. Nous avons alors montré que ce procédé s'avère être un moyen simple et efficace pour obtenir des mélanges homogènes de particules.

Mots-clefs :

Ecoulement, ségrégation, percolation, milieu poreux, matériau granulaire, mélange, simulations numériques, Event-Driven, dynamique moléculaire de sphères molles.