

UNIVERSITE MONTPELLIER 2

— Sciences et Techniques du Languedoc —

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER 2

Spécialité : Mécanique et Génie Civil.

Formation doctorale : Mécanique des matériaux et des milieux complexes,
des structures et des systèmes.

Ecole doctorale : Informations, Structures, Systèmes.

Écoulement confiné d'un matériau granulaire en
interaction avec un gaz, application à
la relocalisation du combustible nucléaire.

par

Alexandre MARTIN

Soutenue publiquement le 25/02/2010 devant le jury composé de :

David DUREISSEIX	Professeur, Université Montpellier II	Président
Jean-Noël ROUX	Ingénieur en chef LCPC, Champs-sur-Marne	Rapporteur
Bertrand MAURY	Professeur, Université Paris XI	Rapporteur
François NICOT	Directeur de Recherche Cemagref, Grenoble	Examinateur
Michel JEAN	Directeur de Recherche CNRS émérite, Marseille	Examinateur
Frédéric DUBOIS	Ingénieur de Recherche CNRS, Montpellier	Codirecteur
Yann MONERIE	Ingénieur-Chercheur IRSN, Cadarache	Codirecteur
Farhang RADJAÏ	Directeur de Recherche CNRS, Montpellier	Directeur

Table des matières

Introduction générale	7
1 Cadre de l'étude	11
1.1 Introduction	12
1.2 Comportement des milieux granulaires secs	12
1.2.1 Contact et frottement	12
1.2.2 Frottement interne et dilatance	13
1.2.3 Texture et transmission des forces	14
1.2.4 Effet Janssen	15
1.2.5 Etats métastables et le blocage d'écoulement	19
1.2.6 Vers la simulation numérique	20
1.3 Méthodes aux éléments discrets	21
1.3.1 Résolution multi-contact	22
1.3.2 Marche en temps	26
1.3.3 Smooth DEM	27
1.3.4 Non-smooth contact dynamics	30
1.4 Méthodes de couplage fluide-grains	37

1.4.1	Modèles eulériens pour la phase fluide	37
1.4.2	Un modèle lagrangien pour la phase fluide	39
1.4.3	Une méthode Lagrange-Lagrange : SPH-DEM	41
1.4.4	Méthodes Euler-Lagrange	42
1.4.5	Méthodes Euler-Euler	49
1.4.6	Discussion des méthodes	50
1.5	Conclusion	51
2	Stabilité d'une méso-structure	53
2.1	Introduction	54
2.2	Description du système	55
2.3	Analyse des débits	57
2.4	Blocage et statistique d'avalanche	63
2.5	Application au cas de la relocalisation	67
2.5.1	Hypothèses géométriques	67
2.5.2	Définition du taux de relocalisation	69
2.5.3	Recherche de bornes et d'estimations pour le taux de relocalisation	70
2.5.4	Evolution de la taille des fragments de combustible en fonction du taux de combustion	71
2.5.5	Estimation de l'évolution du taux de relocalisation avec le taux de combustion	73
2.5.6	Discussion	75
2.6	Conclusion	75
3	Couplage gaz-grains	77
3.1	Introduction	78
3.2	Les modèles	78
3.2.1	Equations de conservation	78
3.2.2	Loi d'évolution de la pression	80
3.2.3	Calcul de la perméabilité et validité de la loi de Darcy	83

3.2.4	Action du fluide sur les particules	85
3.3	Les méthodes numériques	86
3.3.1	Résolution éléments finis	86
3.3.2	Changement d'échelle	98
3.3.3	Cas bidimensionnel	101
3.3.4	Résolution du problème couplé	102
3.3.5	Architecture du code	105
3.3.6	Discussion des méthodes	108
3.4	Test de sédimentation	109
3.5	Conclusion	112
4	Stabilité d'une méso-structure dans un gaz	115
4.1	Introduction	116
4.2	Première estimation de l'influence du gaz	116
4.3	Simulation couplant gaz et particules	117
4.4	Conclusion	120
	Conclusion générale	123
	Bilan	124
	Perspectives	125
	Bibliographie	129

Introduction générale

En France, environ 80% de l'électricité produite est issue de la filière nucléaire. A l'heure actuelle, où l'impact de l'homme sur l'environnement est quantifié en termes d'émission de dioxyde de carbone, cette énergie peut être qualifiée de propre. Elle pourra donc fournir une partie de la solution au problème du développement durable dans les années à venir. La manipulation du combustible nucléaire reste néanmoins une activité dont les risques doivent être maîtrisés au mieux. L'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) est l'expert public français chargé d'évaluer les risques associés à l'utilisation de cette énergie. Il évalue en particulier les risques inhérents à l'augmentation de la durée de vie des combustibles nucléaires.

Dans les centrales électronucléaires actuelles (*i.e.* de type réacteur à eau sous pression), le combustible se présente sous la forme de pastilles cylindriques empilées dans des tubes métalliques minces (*cf.* FIG. 1). Dès les premiers temps de séjour en réacteur, ces pastilles se fragmentent sous l'action des différentes sollicitations qu'elles subissent : gradients thermiques et mécaniques, réactions chimiques, irradiation, etc. L'empilement de pastilles s'approche alors progressivement d'un milieu discret dont la morphologie est complexe.

Que ce soit en fonctionnement normal ou en situations accidentelles, la connaissance du comportement de ce milieu discret est essentielle aux analyses de sûreté. Ce comportement va fortement dépendre de la *mésosstructure* de l'empilement (morphologie, distribution spatiale, comportements et interactions des fragments). Ce type d'analyse vise à l'étude du combustible nucléaire à fort taux de combustion en situations accidentelles (type Accident par Perte de Réfrigèrent Primaire — APRP — *cf.* FIG. 1). Dans le cas de l'APRP, le risque provient de la relocalisation du combustible dans le ballon. Si la masse de combustible relocalisée dépasse une certaine masse critique, le système de contrôle de la réaction nucléaire peut être mis en défaut. La question en termes de sûreté est donc : quelle quantité de combustible se relocalise dans le ballon ?

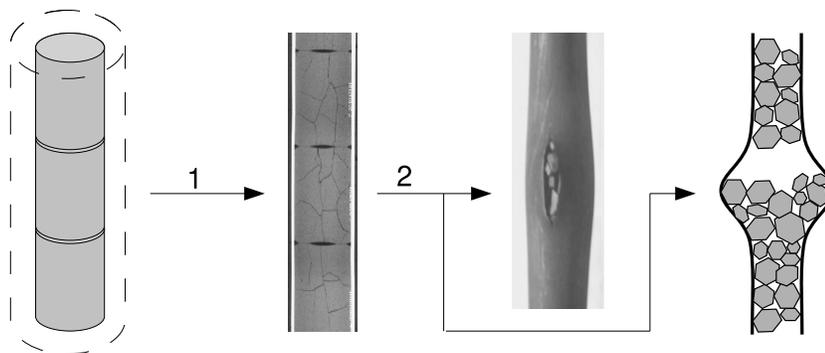


FIG. 1 – Le combustible nucléaire et sa gaine, de leur état vierge à une situation accidentelle. A gauche : schématisation d’un empilement de pastilles de combustible confiné dans leur tube-gaine. Etape 1 : état fragmenté du combustible après séjour en réacteur, d’après [75]. Etape 2 : situation accidentelle par rupture de la gaine, d’après [74] (gauche) ou par ballonnement de la gaine (à droite).

L’étude expérimentale directe de ces problèmes étant rendue difficile par les nombreuses précautions à prendre lors de la manipulation du combustible, l’objectif de ce travail de thèse est de développer des outils numériques permettant de répondre à ces enjeux industriels. En particulier on cherche à déterminer la quantité de combustible se relocalisant dans le ballon. On se propose de développer des outils d’analyse suffisamment génériques pour apporter une première réponse à ces questions, tout en étant capables de s’adapter à de nouvelles situations (combustible à très haut taux de combustion, combustibles innovants, *etc.*).

Le système étudié est la mésostructure constituée d’un empilement granulaire composé de fragments de combustible confiné dans une conduite. La stabilité de cette mésostructure dépend de plusieurs facteurs : forme des fragments, présence des gaz de fission, et des conditions aux limites. Dans le cadre de cette modélisation, on fait l’hypothèse que les fragments ont atteint une taille suffisamment petite pour ne plus pouvoir se diviser. La description précise des ondes élastiques, primordiale dans un calcul de fissuration dynamique, est ici évitée : les fragments de combustible sont modélisés par des corps rigides, et on travaille à une échelle de temps supérieure au temps de réponse élastique du système.

La taille des fragments par rapport au diamètre de la gaine est telle que l’écoulement des particules peut se bloquer (*jamming*), ce qui constitue une spécificité du système étudié. L’étude de ce phénomène de blocage est complexe en raison de sa nature stochastique et demande un grand nombre de simulations pour être caractérisé. Une attention particulière est portée à la statistique des événements, sans et avec présence du gaz. Le prix à payer est des simplifications portant notamment sur la forme des fragments, en considérant des particules circulaires, et des conditions aux limites, en adoptant une géométrie de silo.

Le premier chapitre est consacré à une étude bibliographique des concepts et des méthodes utilisés dans la suite du travail. Il présente la rhéologie des milieux granulaires, décrivant le comportement de l’ensemble des fragments, les outils de simulation numérique des écoulements de tels milieux et les méthodes existantes pour tenir compte de la présence des gaz de fission.

Le deuxième chapitre propose un problème modèle pour la relocalisation, sous la forme de l'étude de la stabilité d'un milieu granulaire sec dans une géométrie de silo. Les deux premières sections présentent une étude globale du comportement d'un tel système, s'intéressant aux phases d'écoulement et au mécanisme du blocage. Les résultats de cette étude sont appliqués au cas concret de la relocalisation dans la troisième section.

Le troisième chapitre présente l'élaboration d'une nouvelle méthode de couplage gaz-grains, adaptée aux spécificités du système étudié dans le deuxième chapitre, qui sont la polydispersité et la géométrie complexe du domaine. Trois méthodes, basées sur deux modèles pour le fluide, sont détaillées depuis les équations du modèle jusqu'à l'implémentation. Une méthode est ensuite dégagée et validée sur un test de sédimentation.

Le quatrième et dernier chapitre propose de reprendre l'analyse du deuxième chapitre, en tenant compte de la présence du gaz, d'abord de façon approchée, puis en utilisant la méthode développée dans le troisième chapitre : analyse de blocage en présence d'un effet moteur dû à un gradient de pression fluide. La pertinence des conclusions du deuxième chapitre concernant la relocalisation est alors discutée.

Cadre de l'étude

Sommaire

1.1	Introduction	12
1.2	Comportement des milieux granulaires secs	12
1.2.1	Contact et frottement	12
1.2.2	Frottement interne et dilatance	13
1.2.3	Texture et transmission des forces	14
1.2.4	Effet Janssen	15
1.2.5	Etats métastables et le blocage d'écoulement	19
1.2.6	Vers la simulation numérique	20
1.3	Méthodes aux éléments discrets	21
1.3.1	Résolution multi-contact	22
1.3.2	Marche en temps	26
1.3.3	Smooth DEM	27
1.3.4	Non-smooth contact dynamics	30
1.4	Méthodes de couplage fluide-grains	37
1.4.1	Modèles eulériens pour la phase fluide	37
1.4.2	Un modèle lagrangien pour la phase fluide	39
1.4.3	Une méthode Lagrange-Lagrange : SPH-DEM	41
1.4.4	Méthodes Euler-Lagrange	42
1.4.5	Méthodes Euler-Euler	49
1.4.6	Discussion des méthodes	50
1.5	Conclusion	51

1.1 Introduction

Ce premier chapitre propose une étude bibliographique des concepts et méthodes intervenant dans les études réalisées dans les chapitres suivants.

L'ensemble des fragments constitue un milieu granulaire. On présentera dans un premier temps quelques caractéristiques fondamentales de ces milieux. Un objectif de ce travail étant de fournir des outils numériques d'analyse, on présentera dans un deuxième temps les méthodes numériques utilisées pour simuler les écoulements de tels milieux.

La prise en compte de l'influence d'un fluide — les gaz de fission dans le cas présent — sur l'écoulement de particules est un problème qui couvre une large gamme d'applications, allant du transport pneumatique au sablier intermittent en passant par la fluidisation. De nombreuses méthodes numériques de couplage fluide-grains ont donc été développées depuis une vingtaine d'années et seront présentées dans un troisième temps.

1.2 Comportement des milieux granulaires secs

1.2.1 Contact et frottement

Un milieu granulaire sec est constitué d'une collection de grains, ou de particules, qui interagissent via des lois de contact. Le contact entre deux particules se traduit par une répulsion élastique et une surface de contact, caractérisée par un rayon a , due à une déformation élastique ou plastique. La courbure au contact conduit à une relation non-linéaire entre la force normale et le déplacement relatif (loi de Hertz) [69]. Mais, dans la limite de faibles déformations au contact, c'est à dire lorsque $2a \ll d$, où d est le diamètre des particules, le contact peut être modélisé comme un point d'application de la force de réaction entre les deux particules. Cette limite de particules parfaitement rigides correspond soit à un module d'Young E très élevé des particules, soit à une pression p de confinement faible. En d'autres termes, le modèle de particules parfaitement rigides est valable dans la limite $p/E \ll 1$.

Un trait caractéristique générique des matériaux granulaires est l'action du frottement entre les particules. La tribologie du contact frottant met en jeu de nombreux phénomènes (plasticité, endommagement, ...) à l'échelle des aspérités de surface (de l'ordre du micron). Mais en général, pour décrire les matériaux granulaires les forces de frottement sont modélisées par la loi de frottement de Coulomb. Cette loi définit le seuil que la composante tangentielle de la force de contact entre deux particules doit atteindre pour qu'une particule glisse sur l'autre. Ce seuil est proportionnel à la force normale, avec un coefficient qui ne dépend que de la nature des matériaux des deux particules. On verra dans la section 1.3 l'écriture de ces lois de contact dans la limite de particules rigides.

En raison de l'action des forces de frottement entre les particules, les milieux granulaires sont des systèmes dissipatifs. Mais le frottement n'est pas la seule source de dissipation. Lors de

chocs entre particules une partie de l'énergie cinétique contribue à la plastification du contact. Cette dissipation due aux chocs inélastiques est généralement décrite par le coefficient de restitution de Newton e_n , défini comme le rapport entre les vitesses relatives après et avant le choc lors d'une collision binaire : $U_N^+ = -e_n U_N^-$. La fraction d'énergie restituée pendant la collision est égale à e_n^2 . Un coefficient de restitution tangentiel e_t peut également être introduit pour rendre compte de la restitution de l'énergie élastique à la composante tangentielle de la vitesse.

1.2.2 Frottement interne et dilatance

Bien que les matériaux granulaires aient un caractère discret comme les systèmes moléculaires, leur comportement est fondamentalement différent en raison de leur caractère dissipatif mais aussi en raison de la taille des particules qui ne leur permet pas de présenter un mouvement brownien et donc d'être décrites dans le cadre classique de la thermodynamique. Par ailleurs, en l'absence d'interactions longue portée, les matériaux granulaires sont génériquement désordonnés et leur comportement plastique est régi essentiellement par des réarrangements collectifs des particules.

Etant donné le caractère coulombien des interactions de contact, les déformations quasi-statiques des matériaux granulaires sont bien décrites par un comportement élasto-plastique. Les modules élastiques globaux du matériau dépendent non seulement des modules des particules mais aussi de l'arrangement géométrique qui peut être très variable suivant sa préparation ou l'histoire du chargement [2, 57]. Le déviateur q est une fonction non-linéaire de la déformation de cisaillement plastique cumulée ε_q qui dépend aussi de la compacité (fraction volumique de particules) initiale c_0 . Dans un matériau avec une compacité initiale inférieure à une compacité critique c^* , q augmente de façon monotone avec ε_q et tend vers un palier q^* . Dans le cas contraire ($c_0 > c^*$), q passe par un pic q^+ avant de redescendre vers le même palier q^* ; cf. FIG. 1.1.

Pour un matériau dense, le seuil plastique peut être caractérisé par q^+ , ou bien par q^* . Une propriété fondamentale des matériaux granulaires réside dans le fait que q^* est proportionnel à la contrainte hydrostatique σ_m . Cette propriété, qui traduit à l'échelle macroscopique la loi de frottement de Coulomb entre les particules, implique que le seuil plastique des matériaux granulaires est caractérisé par un rapport de contraintes q^*/σ_m . Elle correspond au critère de Mohr-Coulomb très souvent utilisé en mécanique des sols et exprimé en termes d'un angle de frottement interne φ^* [44]. Dans le cas bidimensionnel, on a

$$\sin \varphi^* = \frac{q^*}{\sigma_m}, \quad (1.1)$$

avec $q^* = (\sigma_1^* - \sigma_2^*)/2$ et $\sigma_m = (\sigma_1^* + \sigma_2^*)/2$, où σ_1^* et σ_2^* sont les contraintes principales macroscopiques dans l'état stationnaire.

En ce qui concerne le comportement volumétrique, pour un système initialement lâche ($c_0 < c^*$) la compacité augmente avec la déformation de cisaillement ε_q et sature précisément à sa valeur critique c^* . Au contraire, dans un système initialement dense ($c_0 > c^*$) la compacité diminue avec ε_q et tend vers c^* . Cette variation de la compacité avec le cisaillement est connue

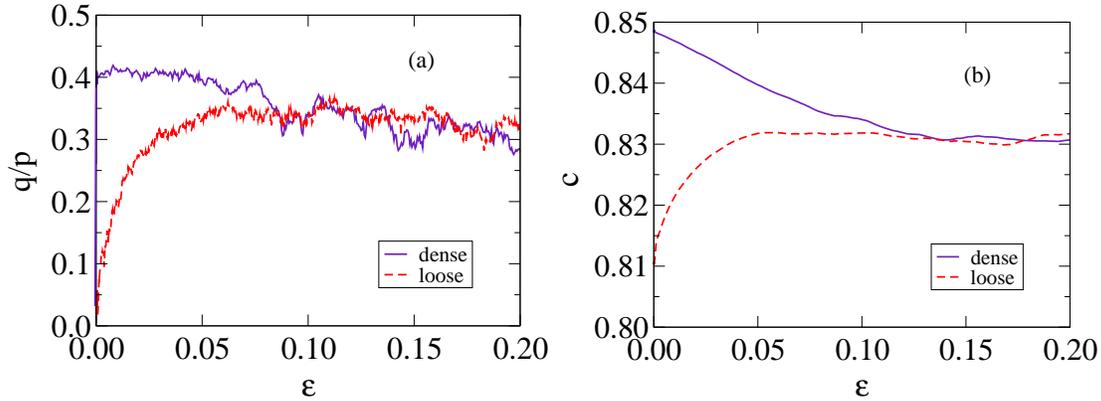


FIG. 1.1 – Evolution du déviateur q normalisé par la contrainte hydrostatique σ_m (notée p sur la figure) (a) et de la compacité c (b) en fonction de la déformation plastique cumulée ε_q lors d'un essai de cisaillement bidimensionnel (simulation numérique), pour des échantillons initialement dense (ligne continue) et lâche (ligne en pointillée); d'après [46].

sous le nom dilatance de Reynolds [94]. Cette propriété de dilatance des matériaux granulaires résulte des réarrangements collectifs des particules et du frottement qui implique le roulement des particules les unes par rapport aux autres. Un écoulement plastique stationnaire a lieu sans changement de compacité. Cet état d'écoulement est parfois appelé *état critique* et caractérisé par l'angle de frottement interne φ^* et la compacité critique c^* .

L'angle de frottement interne et la compacité critique sont généralement définis pour les faibles vitesses de sollicitation. Les études récentes ont permis de montrer que l'état critique existe aussi dans le cas des écoulements denses rapides [35]. Le paramètre pertinent pour la description de l'état de ces écoulements est le nombre inertiel donné, dans le cas tridimensionnel, par

$$I = \dot{\varepsilon}_q \langle d \rangle \sqrt{\frac{\rho_s}{\sigma_m}}, \quad (1.2)$$

où ρ_s est la masse volumique des particules et $\langle d \rangle$ est le diamètre moyen des particules. Typiquement, pour $I < 10^{-3}$ la pression cinétique est négligeable devant la pression statique (de confinement) et le comportement peut être considéré comme quasi-statique. Lorsque I augmente, φ^* augmente et c^* diminue.

1.2.3 Texture et transmission des forces

Les forces dans un milieu granulaire se transmettent seulement par le biais des contacts entre particules. Cette particularité conduit à la formation de chemins privilégiés de transmission des forces au sein du milieu, appelés chaînes de forces (*cf.* FIG. 1.2). Le milieu granulaire peut être plus ou moins ordonné, selon le type de particules considérées, *i.e.* sphères ou polyèdres [9], ou selon les défauts des particules, *i.e.* écart à la sphéricité, rugosité, distribution des tailles [113]. Ce désordre se répercute sur le réseau des forces et se traduit par son hétérogénéité

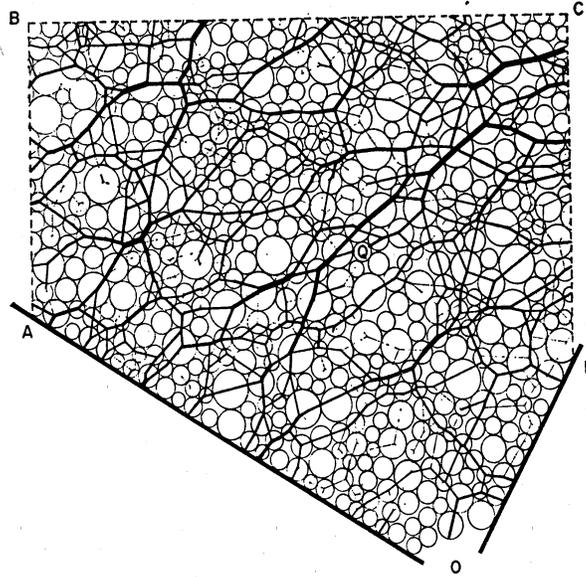


FIG. 1.2 – Chaînes de forces dans une géométrie de silo, d’après [26].

[90, 92]. Un empilement de particules rigides, lisses et non-frottantes, peut-être isostatique, *i.e.* une seule solution d’équilibre, ou hyperstatique, *i.e.* plusieurs solutions d’équilibre, en fonction du nombre moyen de voisins de chaque particule [82, 96]. Dans le cas de particules frottantes, l’indétermination des lois de contact (*cf.* section 1.3) implique l’existence d’une multitude de solutions d’équilibre. Dans ce cas, une perturbation infinitésimale peut transformer le réseau de forces sans changer le réseau des contacts. Cela a été constaté expérimentalement par Bonamy *et al.* [14], qui ont montré qu’une variation de température de quelques degrés modifie le réseau des forces.

1.2.4 Effet Janssen

La pression mesurée à la base d’une colonne verticale remplie de particules n’augmente pas linéairement avec la hauteur de remplissage, contrairement à une colonne de fluide, mais sature rapidement à une valeur maximum. C’est la raison pour laquelle les sabliers s’écoulent à débit constant [62]. Le poids des couches supérieures de particules est entièrement “supporté” par les parois latérales. Cette particularité, initialement notée sur l’écrantage de la masse pesée au fond d’un silo à grains, est appelée *effet Janssen* [51].

On propose ici une dérivation détaillée du modèle de Janssen, dans le cas d’un silo cylindrique, de rayon R_s . La profondeur est représentée par un axe (Oz) , orienté vers le bas, de sorte que la surface supérieure du matériau ensilé soit située en $z = 0$ (*cf.* FIG. 1.3) et on se place dans le repère cylindrique $(O, \vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_z)$. Dans le modèle de Janssen, le milieu granulaire est dans un état quasi-statique. Il peut alors être modélisé par un milieu continu. L’idée est alors

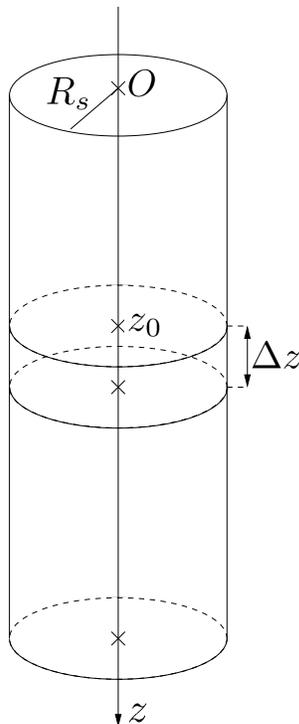


FIG. 1.3 – Schéma du silo considéré dans la dérivation du modèle de Janssen.

de calculer un tenseur des contraintes moyen. Les hypothèses suivantes sont formulées :

1. la composante verticale du tenseur des contraintes σ_{zz} ne dépend que de la profondeur z ,
2. il existe un rapport constant λ_J entre les composantes horizontale et verticale du tenseur des contraintes, *i.e.* $\sigma_{rr} = \lambda_J \sigma_{zz}$,
3. le frottement est complètement mobilisé aux parois, *i.e.* $\sigma_{rz}(r = R_s) = \mu_w \sigma_{rr}(r = R_s)$, où μ_w est le coefficient de frottement avec les parois,
4. la surface supérieure du matériau ensilé est libre, *i.e.* $\sigma_{zz}(z = 0) = 0$.

On écrit alors l'équilibre statique d'une couche de particules de hauteur Δz (*cf.* FIG. 1.3), soumise à la gravité, soit :

$$-\vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} = \rho_s c \vec{g}, \quad (1.3)$$

où ρ_s est la masse volumique des particules, c la compacité et \vec{g} l'accélération de gravité. Notez que le matériau étant supposé homogène, la compacité c est constante dans tout le silo. En intégrant (1.3) sur le volume Ω_t de la tranche considérée et en appliquant le théorème de flux-divergence, on obtient :

$$-\int_{\partial\Omega_t} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega_t} \rho_s c \vec{g} dV = |\Omega_t| \rho_s c \vec{g}, \quad (1.4)$$

où $\partial\Omega_t$ et $|\Omega_t|$ sont respectivement la frontière et la mesure de Ω_t . On scinde l'intégrale de surface sur $\partial\Omega_t$ en trois contributions : les intégrales sur les sections supérieure ($z = z_0$),

inférieure ($z = z_0 + \Delta z$) et périphérique ($r = R_s$). On a alors :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{R_s} \vec{\sigma}(r, \theta, z_0) \cdot (-\vec{e}_z) r dr d\theta + \int_0^{2\pi} \int_0^{R_s} \vec{\sigma}(r, \theta, z_0 + \Delta z) \cdot \vec{e}_z r dr d\theta + \int_0^{2\pi} \int_{z_0}^{z_0 + \Delta z} \vec{\sigma}(R_s, \theta, z) \cdot \vec{e}_r R_s dz d\theta = \pi R_s^2 \Delta z \rho_s c \vec{g}. \quad (1.5)$$

On projette ensuite (1.5) sur l'axe (Oz) et on utilise l'hypothèse 1, pour aboutir à

$$-\int_0^{2\pi} \int_0^{R_s} \sigma_{zz}(z_0) r dr d\theta + \int_0^{2\pi} \int_0^{R_s} \sigma_{zz}(z_0 + \Delta z) r dr d\theta + \int_0^{2\pi} \int_{z_0}^{z_0 + \Delta z} \sigma_{rz}(R_s, \theta, z) R_s dz d\theta = \pi R_s^2 \Delta z \rho_s c g. \quad (1.6)$$

L'utilisation conjointe des hypothèses 2 et 3 puis de l'hypothèse 1 donne :

$$\sigma_{rz}(R_s, \theta, z) = \lambda_J \mu_w \sigma_{zz}(R_s, \theta, z) = \lambda_J \mu_w \sigma_{zz}(z). \quad (1.7)$$

On injecte (1.7) dans (1.6), pour obtenir :

$$-\pi R_s^2 \sigma_{zz}(z_0) + \pi R_s^2 \sigma_{zz}(z_0 + \Delta z) + 2\pi R_s \lambda_J \mu_w \int_{z_0}^{z_0 + \Delta z} \sigma_{zz}(z) dz = \pi R_s^2 \Delta z \rho_s c g, \quad (1.8)$$

soit :

$$\frac{\sigma_{zz}(z_0 + \Delta z) - \sigma_{zz}(z_0)}{\Delta z} + \frac{2\lambda_J \mu_w}{R_s} \frac{1}{\Delta z} \int_{z_0}^{z_0 + \Delta z} \sigma_{zz}(z) dz = \rho_s c g. \quad (1.9)$$

Soit F_σ la primitive de σ_{zz} qui s'annule en z_0 . On a alors, par définition :

$$\int_{z_0}^{z_0 + \Delta z} \sigma_{zz}(z) dz = F_\sigma(z_0 + \Delta z) - F_\sigma(z_0). \quad (1.10)$$

L'équation (1.9) devient donc :

$$\frac{\sigma_{zz}(z_0 + \Delta z) - \sigma_{zz}(z_0)}{\Delta z} + \frac{2\lambda_J \mu_w}{R_s} \frac{F_\sigma(z_0 + \Delta z) - F_\sigma(z_0)}{\Delta z} = \rho_s c g. \quad (1.11)$$

On a par définition :

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\sigma_{zz}(z_0 + \Delta z) - \sigma_{zz}(z_0)}{\Delta z} = \frac{d\sigma_{zz}}{dz}(z_0), \quad (1.12)$$

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{F_\sigma(z_0 + \Delta z) - F_\sigma(z_0)}{\Delta z} = \frac{dF_\sigma}{dz}(z_0) = \sigma_{zz}(z_0). \quad (1.13)$$

Donc, en faisant tendre Δz vers 0 dans (1.11), on obtient :

$$\frac{d\sigma_{zz}}{dz}(z_0) + \frac{2\lambda_J \mu_w}{R_s} \sigma_{zz}(z_0) = \rho_s c g. \quad (1.14)$$

On a donc montré que la contrainte verticale σ_{zz} est solution de l'équation différentielle :

$$\frac{d\sigma_{zz}}{dz} + \frac{2\lambda_J\mu_w}{R_s}\sigma_{zz} = \rho_s c g. \quad (1.15)$$

La condition à la limite donnée par l'hypothèse 4 permet d'intégrer (1.15). On a finalement :

$$\sigma_{zz} = \sigma_\infty \left[1 - \exp\left(-\frac{z}{z_s}\right) \right], \quad (1.16)$$

où on a posé :

$$\sigma_\infty = \frac{\rho_s c R_s g}{2\lambda_J\mu_w}, \quad (1.17)$$

$$z_s = \frac{R_s}{2\lambda_J\mu_w}. \quad (1.18)$$

On remarque que quand la profondeur z tend vers zéro, *i.e.* près de la surface du tas, la contrainte dépend linéairement de la profondeur : $\sigma_{zz} \approx \sigma_\infty z / z_s = \rho_s c g z$. Au contraire, la contrainte sature à partir de la profondeur z_s et tend vers σ_∞ , quand z tend vers l'infini.

Ce résultat se traduit en termes de *masse apparente* M_a , *i.e.* masse de la colonne de grains mesurée au fond du silo, par :

$$M_a = M_\infty \left[1 - \exp\left(-\frac{z}{z_s}\right) \right], \quad (1.19)$$

où M_∞ est la masse apparente limite, quand la hauteur du silo tend vers l'infini, *i.e.* quand z tend vers l'infini, définie par :

$$M_\infty = \frac{\pi\rho_s c R_s^3}{2\lambda_J\mu_w}. \quad (1.20)$$

En notant que la masse totale des particules introduites dans la colonne, pour la remplir jusqu'à la profondeur z , s'écrit

$$M_t = \pi\rho_s c R_s^2 z, \quad (1.21)$$

l'équation (1.19) devient une relation donnant la masse apparente M_a en fonction de la masse totale des grains dans le silo M_t :

$$M_a = M_\infty \left[1 - \exp\left(-\frac{M_t}{M_\infty}\right) \right]. \quad (1.22)$$

La FIG. 1.4 présente une comparaison entre des données expérimentales recueillies dans le cas d'un silo rempli de billes de verre et la prédiction du modèle de Janssen correspondante. On constate que ce dernier fournit une bonne approximation.

L'indépendance de la pression par rapport à la profondeur dans un milieu granulaire confiné explique le fait bien connu que, contrairement aux liquides, le débit des grains dans un sablier

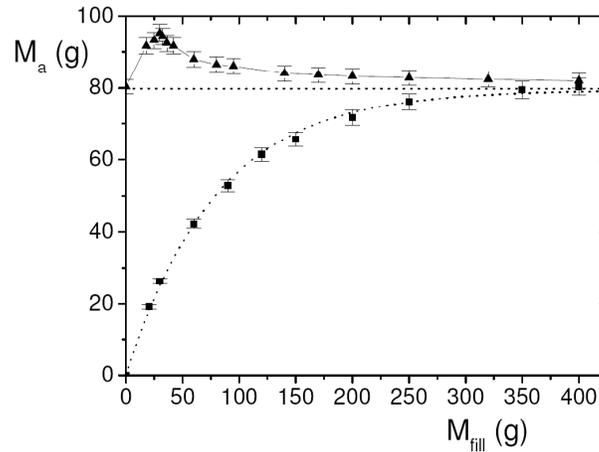


FIG. 1.4 – Evolution de la masse effective M_a mesurée au fond du silo, en fonction de la masse totale de particules versées M_t (notée M_{fill} sur la figure, d’après [83]). La prédiction fournie par le modèle de Janssen (ligne pointillée) approche correctement les données expérimentales (carrés).

est constant. Cet effet a été parfois attribué à la présence des chaînes de forces en argumentant que les chaînes dirigent les forces vers les parois. Mais le modèle de Janssen et sa vérification expérimentale indiquent que l’origine physique de la saturation des contraintes est la mobilisation de la force de frottement aux parois. Un argument sur la base de l’équilibre des contraintes permet ainsi d’expliquer l’effet de saturation sans faire référence aux forces. Néanmoins, il y a des effets fins que des arguments macroscopiques de ce type ne permettent pas d’expliquer. En particulier, l’existence des régimes métastables et des écoulements intermittents est liée à la nature discrète du milieu et la présence des chaînes de forces.

1.2.5 Etats métastables et le blocage d’écoulement

Un empilement de grains peut se trouver dans divers états de stabilité. Par exemple, un talus granulaire n’est stable que si son inclinaison à l’horizontale reste inférieure à un angle Θ_s (angle maximum de stabilité ou angle d’avalanche). Au-delà de cet angle, le talus n’est plus stable : même un faible dépassement entraîne une avalanche granulaire essentiellement localisée à la surface du talus [49, 23, 98]. Lorsque l’avalanche s’arrête, le talus redevient stable avec un angle Θ_r (l’angle de repos) dont la valeur est légèrement inférieure à Θ_s . Par définition, un état instable est tel que le système s’éloigne rapidement de son état initial en réponse à une faible perturbation. Lorsque la pente granulaire Θ est inférieure à Θ_s mais supérieure à Θ_r , l’ajout d’un seul grain à la surface de la pente peut suffire pour déclencher une grande avalanche. Mais, ce processus est essentiellement stochastique en ce sens que le déclenchement a lieu avec une probabilité inférieure à l’unité. Celle-ci augmente avec Θ et tend vers un pour $\Theta = \Theta_s$. Ces états, caractérisés par une probabilité non-nulle d’instabilité avec une amplitude (la taille de l’avalanche) variable, sont des états *métastables*. De même, un écoulement granulaire avec une probabilité non-nulle de s’arrêter est métastable. Le blocage d’un écoulement dans un état

d'équilibre statique est appelé *jamming* (blocage) en anglais.

Le problème de blocage ou la réactivation des écoulements granulaires fournit un cadre général pour l'étude des propriétés rhéologiques des fluides complexes [81]. Par exemple, les fluides à seuil (de Bingham) présentent un seuil en contrainte déviatorique en dessous duquel le liquide ne peut s'écouler. Deux paramètres sont particulièrement importants pour les milieux granulaires : la contrainte de confinement et la compacité. Dans les milieux granulaires denses, chaque particule est soumise à des contraintes cinématiques liées à ses contacts avec ses voisins. Le nombre de degrés de liberté restant le même, le nombre de contraintes cinématiques augmente avec le nombre de particules qui est également une fonction croissante de la compacité. Pour cette raison, un matériau dont la compacité est supérieure à une compacité critique (la même que la compacité critique des sols) ne peut pas s'écouler sans dilatation. En ce qui concerne la contrainte de confinement, son effet est partiellement inclus dans le critère de Mohr-Coulomb : la contrainte déviatorique au seuil d'écoulement est linéaire en contrainte de confinement. C'est un effet "plastique", mais le confinement peut également influencer l'écoulement par son effet sur la compaction du matériau.

Un autre exemple de *jamming*, qui nous intéresse plus particulièrement dans cette étude, est l'écoulement des grains dans un silo ou à travers un orifice. L'écoulement n'est continu que lorsque le diamètre de l'orifice est supérieur à un diamètre critique [118, 102]. Pour des diamètres plus petits, l'écoulement s'arrête en un temps fini. L'arrêt de l'écoulement se traduit par la formation d'une voûte locale au-dessus de l'orifice. Une analogie peut être tirée entre l'écoulement de silo et les avalanches de surface. Le diamètre de l'orifice joue le même rôle pour l'écoulement de silo que l'angle d'inclinaison pour les écoulements de surface. La probabilité de blocage peut être quantifiée par l'étude du nombre de particules qui s'écoulent avant le blocage. On reviendra plus en détail sur le blocage de silos dans le deuxième chapitre.

1.2.6 Vers la simulation numérique

L'exposé rapide des différents mécanismes intervenant dans le comportement des milieux granulaires secs souligne leur complexité de modélisation. Pour l'essentiel il ressort que leur comportement global ne peut être étudié, compris et prédit qu'au travers d'une *dynamique d'ensemble*. Cette conclusion est particulièrement claire notamment en ce qui concerne les effets de dilatance, d'évolution de compacité et de réseaux d'efforts : le comportement apparent résulte de mécanismes collectifs qui ne sont pas inhérents à l'échelle élémentaire, *i.e.* celle de la particule ou d'un couple de particules en interaction.

La compréhension de cette dynamique d'ensemble nécessite de vastes campagnes expérimentales permettant, d'une part d'exhiber une statistique représentative, et d'autre part de séparer les effets de chaque mécanisme et de leur combinaison. Un outil puissant pour l'étude de ces mécanismes et de la phénoménologie riche des milieux granulaires est l'approche discrète. Elle consiste à intégrer les équations de Newton-Euler pour chaque degré de liberté associé aux particules, celles-ci étant considérées comme indéformables. Les approches numériques fondées

sur cette approximation sont connues sous le nom commun de méthode par éléments discrets (*Discrete Element Method* ou DEM en anglais) [22]. Ainsi, on présente à la section suivante les choix de modélisation et de mise en œuvre numérique retenus pour les milieux granulaires secs, mais aussi pour les milieux granulaires saturés.

1.3 Méthodes aux éléments discrets

Il n'existe pas un cadre unifié pour la rhéologie des matériaux granulaires qui soit adapté à toutes les compositions (forme, taille) et tous les états possibles (solide, liquide, gaz). L'approche classique en mécanique des structures, consistant à traiter le matériau comme un milieu continu caractérisé par une loi de comportement et à utiliser la méthode des éléments finis est inadaptée pour la simulation numérique de milieux granulaires, bien que des modèles aient été développés [79] (*cf.* section 1.4.5 pour la modélisation d'un milieu granulaire comme un fluide complexe).

Les méthodes aux éléments discrets ont été conçues pour analyser le comportement collectif d'objets en interaction [22, 3, 76]. Elles consistent à résoudre indépendamment le comportement de chaque corps, en tenant compte des interactions entre eux par le biais d'une formulation adaptée. On présente plus en détail ces différents concepts dans la suite. Deux sous-sections sont consacrées à deux méthodes prototypiques des deux approches classiques : l'explicite, avec la *Smooth DEM* et l'implicite, avec *Non Smooth Contact Dynamics* (NSCD) ou *Non Smooth DEM*.

Dans le cas des milieux granulaires secs, les corps sont les particules et ils interagissent via du contact-frottant. Considérons une collection de corps rigides. Les équations décrivant la dynamique de chaque corps sont les équations de Newton-Euler. Elles peuvent s'écrire, dans un repère dont l'origine coïncide avec le centre d'inertie et en décomposant les mouvements de translations et de rotations :

$$m^j \frac{d}{dt} \vec{v}^j = \vec{F}_{ext}^j + \vec{r}^j, \quad (1.23)$$

$$\mathbb{J}^j \frac{d}{dt} \vec{\omega}^j = -\vec{\omega}^j \wedge (\mathbb{J}^j \vec{\omega}^j) + \vec{M}_{ext}^j + \vec{M}_r^j, \quad (1.24)$$

où m^j est la masse du corps j , \mathbb{J}^j la matrice d'inertie, \vec{v}^j la vitesse du centre de masse, $\vec{\omega}^j$ la vitesse angulaire, \vec{F}_{ext}^j et \vec{M}_{ext}^j sont la résultante et le moment des forces extérieures et \vec{r}^j et \vec{M}_r^j la résultante et le moment des forces de contact. Soient \vec{v} et $\vec{\omega}$ les vecteurs qui concatènent les vitesses, respectivement, de translation et de rotation de l'ensemble des corps, \vec{F}_{ext} et \vec{M}_{ext} , respectivement, la résultante et le moment des forces extérieures et \vec{r} et \vec{M}_r , respectivement, la résultante et le moment des forces de contact. Soit \vec{M}_{rot} le vecteur concaténant les termes issus des dérivées entraînées, $-\vec{\omega}^j \wedge (\mathbb{J}^j \vec{\omega}^j)$, pour l'ensemble des corps j ($1 \leq j \leq N_p$, où N_p est le nombre de corps). Soit \mathbb{M} la matrice de masse de l'ensemble du système, diagonale par blocs,

et définie par :

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} m^1 \mathbb{I} & & \\ & \ddots & \\ & & m^{N_p} \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

où \mathbb{I} est la matrice unité de dimension deux dans le cas bidimensionnel et trois dans le cas tridimensionnel. Soit \mathbb{J} la matrice d'inertie de l'ensemble du système, diagonale par blocs, et définie par :

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \mathbb{J}^1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbb{J}^{N_p} \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Avec les notations précédentes, la dynamique de l'ensemble des corps s'écrit sous la forme :

$$\mathbb{M} \frac{d}{dt} \vec{v} = \vec{F}_{ext} + \vec{r}, \quad (1.27)$$

$$\mathbb{J} \frac{d}{dt} \vec{\omega} = \vec{M}_{rot} + \vec{M}_{ext} + \vec{M}_r. \quad (1.28)$$

La résolution des équations de la dynamique (1.27) et (1.28) nécessite

- une stratégie globale,
- un intégrateur en temps,
- une stratégie de résolution d'un contact.

1.3.1 Résolution multi-contact

Un problème multi-contact est composé d'une collection de corps en interaction. On peut considérer qu'un contact est défini entre deux objets, en gardant à l'esprit qu'un objet peut être en contact avec plusieurs autres, et qu'il peut donc être impliqué simultanément dans plusieurs contacts binaires. On doit donc être capable de définir tous les contacts potentiels. Cette étape de détection des contacts pose principalement des problèmes techniques, liés notamment à la diminution de son coût en termes de temps de calcul. Sans entrer dans les détails, l'idée pour simplifier et optimiser cette détection est de procéder de façon hiérarchisée, dont voici les grandes étapes :

- construction d'une table de voisinage (méthode des boîtes, pavages), afin d'éliminer les contacts potentiels entre particules trop lointaines,
- détection grossière (*quadtree/octree, shadow overlap, plan séparateur*), visant à éliminer dans chaque ensemble, défini à la suite de l'étape précédente, des paires d'objets ne pouvant pas être en contact, à moindre coût (*i.e.* sans calcul géométrique onéreux),
- détection fine (intersections, projections), pour statuer sur les paires d'objets restantes.

Après l'étape de détection, chaque contact binaire entre deux corps est formulé. Considérons deux corps a et b , potentiellement en contact (*cf.* FIG. 1.5). On se place dans un cas simplifié où on considère deux objets convexes, dans une configuration déterminée ; on s'affranchit ainsi des

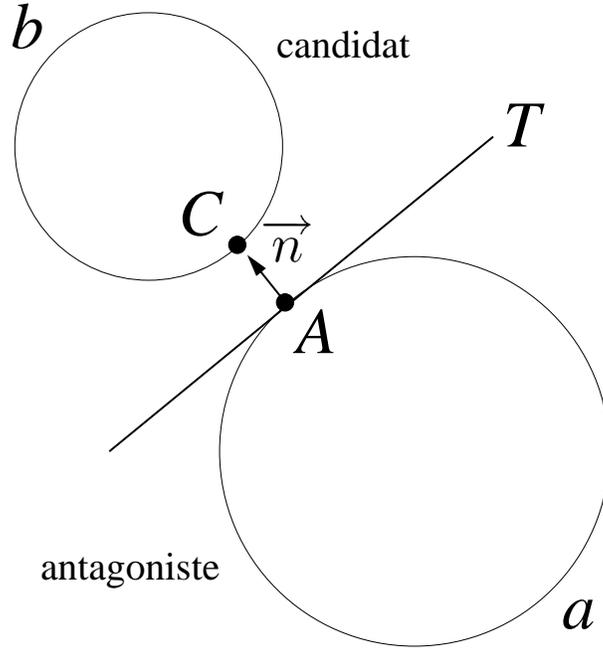


FIG. 1.5 – Contact binaire entre deux particules.

problèmes (techniques, ou d'existence) inhérents à la formulation du contact entre deux corps dans le cas général (objets non-convexes, repère de contact mobile). On peut alors définir deux points A et C les plus proches, portés respectivement par les corps a et b . Soit T le plan, en 3D ou la droite en 2D, passant par A , tangent à la surface du corps a et \vec{n} la normale à ce plan, dirigée vers l'extérieur.

Avec ces notations, la distance algébrique δ entre les corps a et b est définie par

$$\delta = \overrightarrow{AC} \cdot \vec{n}. \quad (1.29)$$

La vitesse relative entre les deux corps \vec{U} est définie par la différence de vitesse entre les points A et C , notées respectivement \vec{v}_A et \vec{v}_C

$$\vec{U} = \vec{v}_C - \vec{v}_A. \quad (1.30)$$

On peut décomposer la vitesse relative \vec{U} en une composante normale U_N et une composante tangentielle \vec{U}_T . On a alors

$$U_N = \vec{U} \cdot \vec{n}, \quad (1.31)$$

$$\vec{U}_T = \vec{U} - U_N \vec{n}, \quad (1.32)$$

et

$$\vec{U} = U_N \vec{n} + \vec{U}_T. \quad (1.33)$$

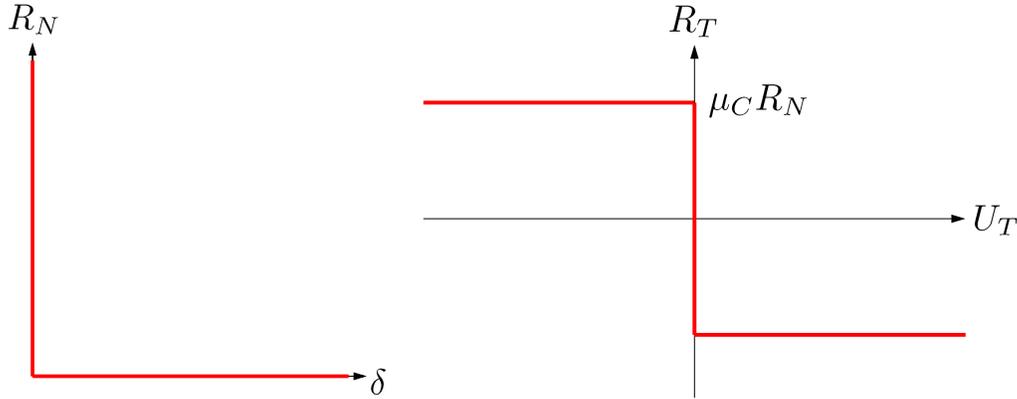


FIG. 1.6 – Graphes de la condition de Signorini (gauche) et de la loi frottement de Coulomb (droite).

Soit \vec{R} la force de contact entre les deux corps. On peut aussi la décomposer, en une composante normale R_N , portée par le vecteur \vec{n} , et une composante tangentielle \vec{R}_T , dans le plan tangent T :

$$R_N = \vec{R} \cdot \vec{n}, \quad (1.34)$$

$$\vec{R}_T = \vec{R} - R_N \vec{n}, \quad (1.35)$$

et

$$\vec{R} = R_N \vec{n} + \vec{R}_T. \quad (1.36)$$

L'unilatéralité du contact entre les corps a et b se traduit par le fait que le point C appartenant au corps b , appelé le candidat, ne peut traverser le plan T , tangent à la surface du corps a , appelé l'antagoniste. La force de contact \vec{R} est alors définie comme la force empêchant le corps b de pénétrer le corps a et donc dirigée de a vers b .

La condition d'unilatéralité du contact (non-interpénétrabilité, condition de Signorini), s'écrit avec les notations précédentes :

$$\begin{cases} \delta > 0 \Rightarrow R_N = 0 \\ \delta = 0 \Rightarrow R_N \geq 0 \end{cases} . \quad (1.37)$$

La première ligne de l'équation (1.37) indique que si les corps ne sont pas en contact, la force de contact est nulle. La deuxième ligne de cette équation montre l'existence d'une force de contact, si les corps sont en contact, mais ne suffit pas à la définir. En effet, le graphe représentatif de la condition de Signorini, présenté sur la FIG. 1.6, montre qu'il s'agit d'une fonction multivaluée.

La loi de frottement de Coulomb s'écrit avec les notations précédentes :

$$\begin{cases} \|\vec{U}_T\| = 0 \Rightarrow \|\vec{R}_T\| \leq \mu_C R_N \\ \|\vec{U}_T\| > 0 \Rightarrow \vec{R}_T = -\mu_C R_N \frac{1}{\|\vec{U}_T\|} \vec{U}_T \end{cases} , \quad (1.38)$$

où μ_C est le coefficient de frottement. La première ligne de l'équation (1.38) montre que la partie tangentielle de la force de contact peut prendre n'importe quelle valeur, tant que sa norme est inférieure à $\mu_C R_N$, si le contact est statique. La deuxième ligne de cette équation montre que la norme de la partie tangentielle de la force de contact est égale à $\mu_C R_N$ si le contact glisse. Soit \vec{t} un vecteur unitaire colinéaire à \vec{U}_T , \vec{t} représente alors la direction, mais pas le sens, de la vitesse de glissement. Soient U_T et R_T respectivement les projections sur l'axe porté par \vec{t} de la composante tangentielle de la vitesse relative \vec{U}_T et de la force de contact \vec{R}_T . On a alors

$$U_T = \vec{U}_T \cdot \vec{t}, \quad (1.39)$$

$$R_T = \vec{R}_T \cdot \vec{t}. \quad (1.40)$$

La loi de Coulomb est représentée sur la FIG. 1.6 : il s'agit aussi d'une fonction multivaluée. Cette loi ne permet pas de calculer directement la composante tangentielle de la force de contact, connaissant la vitesse tangentielle.

La résolution d'un contact binaire dépend du type de modélisation du contact et sera présentée dans les sections suivantes. On admet donc, pour l'instant, que l'on sait résoudre un contact binaire noté α . La résolution du contact α nous donne la vitesse relative \vec{U}^α et la réaction de contact \vec{R}^α . Soit \vec{r}^α la contribution du contact α à la résultante des forces de contact \vec{r} et \vec{M}_r^α sa contribution au moment des forces de contact \vec{M}_r . On a ainsi

$$\vec{r} = \sum_{\alpha} \vec{r}^\alpha, \quad (1.41)$$

$$\vec{M}_r = \sum_{\alpha} \vec{M}_r^\alpha, \quad (1.42)$$

\vec{r}^α et \vec{M}_r^α sont obtenus à partir de \vec{R}^α à l'aide d'une matrice de passage \mathbb{H}^α :

$$\begin{pmatrix} \vec{r}^\alpha \\ \vec{M}_r^\alpha \end{pmatrix} = \mathbb{H}^\alpha \vec{R}^\alpha. \quad (1.43)$$

L'équivalence entre la puissance développée par les forces de contact \vec{r}^α et \vec{M}_r^α , à l'échelle des corps, et \vec{R}^α , à l'échelle du contact α , permet de montrer que la vitesse relative \vec{U}^α s'obtient à partir des vitesses des translation et de rotation par :

$$\vec{U}^\alpha = \mathbb{H}^{\alpha,T} \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \vec{\omega} \end{pmatrix}, \quad (1.44)$$

où $\mathbb{H}^{\alpha,T}$ est la transposée de \mathbb{H}^α .

La résolution du problème multi-contact se réalise donc en trois étapes :

- détection des contacts binaires potentiels,
- résolution de chaque contact binaire, dans le repère de contact,
- sommation des contributions de tous les contacts binaires pour calculer la résultante et le moment des forces de contact.

1.3.2 Marche en temps

La résolution des équations de la dynamique (1.27) et (1.28), en présence d'interactions, nécessite un schéma en temps adapté. Deux approches sont possibles : l'*event-driven*, où la discrétisation temporelle est basée sur les instants de choc et le *time-stepping*, où le pas de temps est fixé à l'avance.

La méthode *event-driven* [87] consiste à résoudre les équations de la dynamique pendant le "vol libre", *i.e.* en absence de contact, et d'activer la résolution d'un contact, beaucoup plus coûteuse en temps de calcul, au moment où il apparaît. Cette méthode est avantageuse dans le cas d'un milieu dilué où les particules sont très dispersées, dans lequel les étapes de vol libre sont longues et les interactions entre particules rares. Elle devient inadaptée dans le cas de systèmes denses où les interactions de contact sont fréquentes. En effet, d'une part le temps de calcul s'accroît considérablement à cause du nombre élevé de contacts à résoudre et d'autre part la méthode n'est pas prévue pour gérer plusieurs contacts simultanés (accumulation d'impacts).

Dans le cas du *time-stepping*, l'intervalle de temps physique considéré est découpé en pas de temps de longueur fixe Δt . L'approche utilisée peut être un prédicteur-correcteur. On connaît les positions et les vitesses au début du pas de temps. On calcule une prédiction des vitesses et des positions, en intégrant les équations de la dynamique, sans le terme de contact. On résout ensuite le problème multi-contact, dans la configuration prédite pour obtenir les forces de contact. On corrige les positions et vitesses prédites en tenant compte des forces de contact pour obtenir les positions et vitesses à la fin du pas de temps. On met à jour les positions et les vitesses au début du pas de temps pour passer au pas de temps suivant.

On vient de présenter, dans les sections 1.3.1 et 1.3.2 les principes fondamentaux des méthodes aux éléments discrets. On présentera donc dans les sous-sections suivantes, détaillant les méthodes *Smooth DEM* et *NSCD*, les deux seuls éléments qui varient d'une méthode à l'autre :

- la résolution d'un contact binaire, dans le repère de contact
- le schéma d'intégration des équations de la dynamique

On note que dans le cas de particules sphériques, et indépendamment de la forme des particules dans le cas bidimensionnel, le terme $-\vec{\omega}^j \wedge (\mathbb{J}^j \vec{\omega}^j)$ apparaissant dans l'équation (1.24) est nul. Dans le cas général où ce terme est non nul l'équation (1.24) devient non-linéaire. Différentes stratégies, dépendant de la vitesse de rotation de chaque corps, peuvent être envisagées. Si les vitesses de rotation sont assez faibles, on peut choisir de le négliger. Dans le cas contraire, il faut choisir une façon de discrétiser ce terme, pour pouvoir écrire les schémas numériques associés. Dans le cas de l'utilisation d'un schéma d'intégration en temps implicite, le calcul exact de ce terme non-linéaire nécessite le recours à une méthode dédiée *e.g.* la méthode de Newton-Raphson. Afin d'alléger l'écriture des schémas numériques présentés dans la suite, on choisit de l'explicitier et de négliger l'erreur induite.

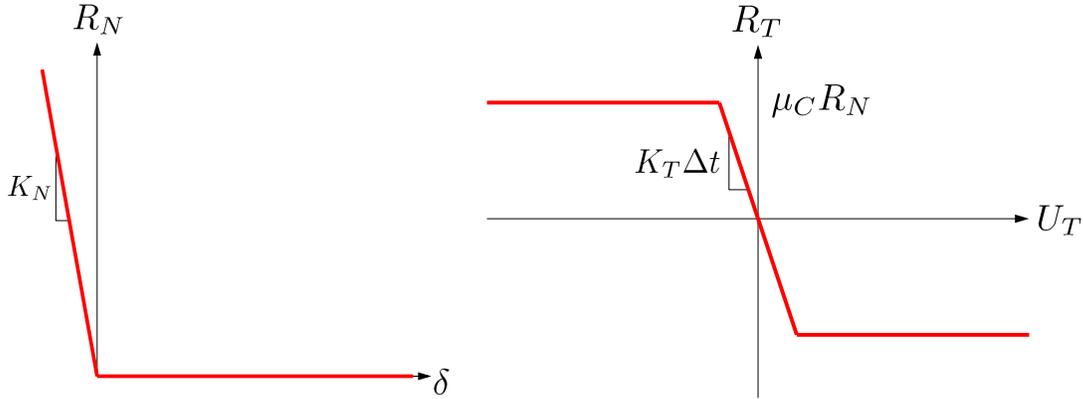


FIG. 1.7 – Graphes de la condition de Signorini régularisée (gauche) et de la loi de frottement de Coulomb régularisée (droite).

1.3.3 Smooth DEM

La méthode aux éléments discrets la plus classique est la méthode DEM (*Smooth DEM*), signifiant *Discrete Element Method* (méthode des éléments discrets), proposée par Cundall et Strack [22]. Elle propose de résoudre le problème de non régularité de la condition de Signorini et de la loi de Coulomb, en utilisant une régularisation et d'intégrer les équations de la dynamique par une méthode explicite. On détaille dans la suite ces deux techniques, en présentant une approche typique : la régularisation linéaire.

La condition de Signorini est remplacée par :

$$\begin{cases} \delta > 0 \Rightarrow R_N = 0 \\ \delta \leq 0 \Rightarrow R_N = -K_N \delta \end{cases}, \quad (1.45)$$

où K_N est une raideur. La première ligne de l'équation (1.45) est identique à celle de la forme standard de la condition de Signorini (équation (1.37)). La deuxième ligne de cette équation montre que l'interpénétration du contact est autorisée, mais génère une force de répulsion, tendant à s'y opposer. La composante normale de la réaction de contact R_N est donc définie comme une fonction de la distance δ (cf. FIG. 1.7).

De la même façon, la loi de Coulomb est régularisée en introduisant une raideur K_T . La composante tangentielle de la force de contact \vec{R}_T est alors obtenue par un processus incrémental. A un incrément de déplacement tangentiel $\Delta \vec{X}_T$ est associé un incrément de force $\Delta \vec{R}_T$, par :

$$\Delta \vec{R}_T = -K_T \Delta \vec{X}_T. \quad (1.46)$$

L'incrément de déplacement tangentiel $\Delta \vec{X}_T$, sur un intervalle de temps Δt , s'obtient à partir de la vitesse tangentielle \vec{U}_T :

$$\Delta \vec{X}_T = \Delta t \vec{U}_T. \quad (1.47)$$

On obtient ainsi une relation linéaire entre la composante tangentielle de la vitesse et l'incrément de la composante tangentielle de la force de contact :

$$\Delta \vec{R}_T = -K_T \Delta t \vec{U}_T. \quad (1.48)$$

En imposant la contrainte seuil de la loi de Coulomb à la nouvelle valeur de la composante tangentielle de la force de contact $\vec{R}_T^{Tr} = \vec{R}_T + \Delta \vec{R}_T$:

$$\left\| \vec{R}_T^{Tr} \right\| \leq \mu R_N, \quad (1.49)$$

le graphe de la forme régularisée de la loi de Coulomb est obtenu sur la FIG. 1.7. La composante tangentielle de la force de contact \vec{R}_T est donc définie comme une fonction de la composante tangentielle de la vitesse relative \vec{U}_T . A chacune des deux lois régularisées précédentes, on doit ajouter un terme de viscosité, qui permet d'atténuer les ondes élastiques se propageant dans la structure, afin de traiter des cas quasi-statiques ou denses.

Les équations de la dynamique sont intégrées à l'aide d'un schéma en temps explicite. Un schéma souvent utilisé est *Velocity Verlet* [3]. Les données au début d'un pas de temps sont les positions $\vec{x}(t)$, les vitesses de translation $\vec{v}(t)$, et de rotation $\vec{\omega}(t)$ ainsi que les accélérations $\frac{d}{dt} \vec{v}(t)$ et $\frac{d}{dt} \vec{\omega}(t)$. Dans l'étape de prédiction, on intègre les positions sur le pas de temps entier et les vitesses sur un demi-pas de temps, soit

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d}{dt} \vec{v}(t), \quad (1.50)$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} \vec{v}(t), \quad (1.51)$$

$$\vec{\omega}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{\omega}(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} \vec{\omega}(t). \quad (1.52)$$

On résout ensuite le problème multi-contact dans la configuration prédite, à la fin du pas de temps, pour obtenir les forces de contacts $(\vec{r}(t + \Delta t), \vec{M}_r(t + \Delta t))$. On peut alors calculer les accélérations à la fin du pas de temps :

$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t + \Delta t) = \mathbb{M}^{-1} \left[\vec{F}_{ext}(t + \Delta t) + \vec{r}(t + \Delta t) \right], \quad (1.53)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{\omega}(t + \Delta t) = \mathbb{J}^{-1} \left[\vec{M}_{rot}(t) + \vec{M}_{ext}(t + \Delta t) + \vec{M}_r(t + \Delta t) \right], \quad (1.54)$$

où le terme \vec{M}_{rot} a été explicité. On peut ainsi calculer les vitesses à la fin du pas de temps, à partir des vitesses obtenues après l'étape de prédiction, par :

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} \vec{v}(t + \Delta t), \quad (1.55)$$

$$\vec{\omega}(t + \Delta t) = \vec{\omega}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} \vec{\omega}(t + \Delta t). \quad (1.56)$$

Finalement, les positions corrigées à la fin du pas de temps, sont obtenues en intégrant les vitesses à la fin du pas de temps :

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{v}(t + \Delta t). \quad (1.57)$$

Le schéma en temps proposé initialement par Cundall et Strack n'était pas *Velocity Verlet*, mais un schéma aux différences finies centrées en temps. On connaît au début du pas de temps les positions, $\vec{x}(t)$, et les vitesses au demi-pas précédent, $\vec{v}(t - \frac{\Delta t}{2})$ et $\vec{\omega}(t - \frac{\Delta t}{2})$. On résout le problème multi-contact dans la configuration du début du pas de temps pour obtenir les forces de contact au début du pas de temps ($\vec{r}(t)$, $\vec{M}_r(t)$). On peut alors calculer les accélérations au début du pas :

$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = \mathbb{M}^{-1} \left[\vec{F}_{ext}(t) + \vec{r}(t) \right], \quad (1.58)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{\omega}(t) = \mathbb{J}^{-1} \left[\vec{M}_{rot}(t) + \vec{M}_{ext}(t) + \vec{M}_r(t) \right]. \quad (1.59)$$

Les vitesses au demi-pas suivant s'obtiennent en intégrant sur le pas de temps les accélérations au début du pas :

$$\vec{v} \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \vec{v} \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \Delta t \frac{d}{dt} \vec{v}(t), \quad (1.60)$$

$$\vec{\omega} \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \vec{\omega} \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \Delta t \frac{d}{dt} \vec{\omega}(t). \quad (1.61)$$

Les positions à la fin du pas de temps sont calculées en intégrant sur le pas de temps les vitesses au demi-pas suivant :

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{v} \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (1.62)$$

Ce schéma n'est pas écrit comme un prédicteur-correcteur, mais il est identique au schéma *Velocity Verlet*, décalé d'un demi-pas de temps.

Les schémas en temps utilisés en DEM étant explicites, leur stabilité est conditionnelle. Le comportement normal de chaque contact α peut être vu comme un oscillateur harmonique auquel sont associées une masse effective $m_{eff,N}^\alpha$, la raideur K_N et une viscosité ν_N . La masse effective $m_{eff,N}^\alpha$ est définie à partir des masses des deux corps impliqués dans le contact α , m_1^α et m_2^α , par

$$\frac{1}{m_{eff,N}^\alpha} = \frac{1}{m_1^\alpha} + \frac{1}{m_2^\alpha}. \quad (1.63)$$

La viscosité critique ν_n^C est définie par

$$\nu_n^C = \sqrt{2m_{eff,N}^\alpha K_N}. \quad (1.64)$$

La viscosité ν_N doit être choisie dans l'intervalle $[0, \nu_n^C]$.

La condition assurant la stabilité du schéma pour le contact α est la plus forte en l'absence d'amortissement, elle s'écrit dans ce cas :

$$\Delta t < \sqrt{\frac{m_{eff,N}^\alpha}{K_N}}. \quad (1.65)$$

Le comportement tangentiel de chaque contact α peut aussi être vu comme un oscillateur harmonique auquel sont associées une masse effective $m_{eff,T}^\alpha$, la raideur K_T et la viscosité ν_T . On définit de la même façon que pour le comportement normal une viscosité critique ν_T^C et une borne sur le pas de temps assurant la stabilité du schéma. La condition assurant la stabilité du schéma, en tenant compte de tous les contacts, s'écrit donc, toujours dans le cas sans amortissement :

$$\Delta t < \min_{\alpha} \left(\sqrt{\frac{m_{eff,N}^\alpha}{K_N}}, \sqrt{\frac{m_{eff,T}^\alpha}{K_T}} \right), \quad (1.66)$$

où le minimum est pris sur tous les contacts α .

Le choix du pas de temps est donc conditionné par les paramètres matériau K_N , K_T , ν_N et ν_T . On peut les déterminer à partir de considérations physiques, dans le cadre du modèle de Hertz-Mindlin [71] par exemple, les raideurs K_N et K_T dépendent de la rigidité du matériau constitutif des grains et, entre autres, de son module d'Young E , et la raideur K_T est reliée à la raideur K_N par l'intermédiaire du coefficient de Poisson du matériau constitutif des grains. L'application de ce type de modèle aboutit à des pas de temps très petits.

L'objectif de ce travail est d'étudier la stabilité d'un empilement granulaire confiné, sous gravité. La pression exercée sur un contact par la colonne de particules située au-dessus de lui dépend de sa hauteur, dans la mesure où l'effet Janssen n'est pas actif. Les contacts les plus profonds subissent donc les pressions les plus importantes. On doit donc choisir une raideur K_N très grande, et donc un pas de temps très petit, pour garantir que ces contacts ne seront pas interpénétrés. De plus, on souhaite réaliser cette étude à une échelle au-dessus de celle des ondes. Finalement, cette méthode propose une échelle de temps trop fine par rapport à l'application souhaitée et son utilisation nécessiterait l'emploi de pas de temps très faibles ; elle semble donc inadaptée.

1.3.4 Non-smooth contact dynamics

La méthode NSCD, signifiant *Non-smooth Contact Dynamics* (dynamique des contacts non régulière), développée par Moreau [76] et Jean [54, 52], propose d'adapter la formulation des équations de la dynamique, pour tenir compte des événements non réguliers, comme les chocs ou les sauts de vitesse de glissement. Cette méthode est moins classique que la précédente. On présente donc, dans une première sous-section le formalisme, l'intégration en temps et la méthode de résolution multi-contact utilisés, de façon détaillée. La méthode NSCD permet de traiter diverses lois de contact, pouvant sortir du cadre du contact-frottant (*cf.* [53] pour le cas

des lois cohésives). On consacre donc deux sous-sections à deux lois de contact adaptées aux chocs : la loi de choc avec coefficient de restitution et la loi de choc quasi-inélastique, afin de déterminer la loi de contact la plus adaptée à cette étude.

1.3.4.1 Présentation détaillée de la méthode

Les équations de la dynamique (1.27) et (1.28), sont réécrites en termes de mesures différentielles :

$$\mathbb{M}d\vec{v} = \vec{F}_{ext}dt + d\vec{r}, \quad (1.67)$$

$$\mathbb{J}d\vec{\omega} = (\vec{M}_{rot} + \vec{M}_{ext})dt + d\vec{M}_r, \quad (1.68)$$

où $d\vec{v}$ et $d\vec{\omega}$ sont les mesures différentielles de \vec{v} et $\vec{\omega}$, respectivement, dt est la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R} et $d\vec{r}$ et $d\vec{M}_r$ sont, respectivement, les mesures de la résultante \vec{r} et du moment \vec{M}_r des forces de contact. Les mesures $d\vec{r}$ et $d\vec{M}_r$ contiennent les impulsions provenant des chocs (instantanés), et une partie correspondant aux forces exercées durant le contact. L'intégration des équations en mesures (1.67) et (1.68) sur un intervalle de temps $]t_i, t_f]$ donne

$$\mathbb{M}(\vec{v}_f - \vec{v}_i) = \int_{t_i}^{t_f} \vec{F}_{ext}dt + \vec{p}, \quad (1.69)$$

$$\mathbb{J}(\vec{\omega}_f - \vec{\omega}_i) = \int_{t_i}^{t_f} (\vec{M}_{rot} + \vec{M}_{ext})dt + \vec{M}_p, \quad (1.70)$$

où $(\vec{v}_i, \vec{\omega}_i)$ et $(\vec{v}_f, \vec{\omega}_f)$ sont les vitesses aux instants t_i et t_f , respectivement, et \vec{p} et \vec{M}_p sont des impulsions intégrant les percussions provenant des chocs et du chargement régulier durant le contact. On est ainsi passé d'équations décrivant la dynamique, à tout instant ((1.27) et (1.28)) à des équations décrivant la conservation de la quantité de mouvement sur l'intervalle de temps $]t_i, t_f]$ ((1.69) et (1.70)).

La méthode NSCD propose de condenser la dynamique aux contacts, afin de gérer la non-régularité de la condition de Signorini et de la loi de Coulomb. Les équations (1.69) et (1.70) peuvent se réécrire :

$$\vec{v}_f = \vec{v}_{libre} + \mathbb{M}^{-1}\vec{p}, \quad (1.71)$$

$$\vec{\omega}_f = \vec{\omega}_{libre} + \mathbb{J}^{-1}\vec{M}_p, \quad (1.72)$$

où \vec{v}_{libre} et $\vec{\omega}_{libre}$ sont les vitesses libres obtenues en intégrant les équations de la dynamique sur l'intervalle de temps $]t_i, t_f]$, sans tenir compte du contact, *i.e.*

$$\vec{v}_{libre} = \vec{v}_i + \mathbb{M}^{-1} \int_{t_i}^{t_f} \vec{F}_{ext}dt, \quad (1.73)$$

$$\vec{\omega}_{libre} = \vec{\omega}_i + \mathbb{J}^{-1} \int_{t_i}^{t_f} (\vec{M}_{rot} + \vec{M}_{ext})dt. \quad (1.74)$$

Considérons un contact α . L'application de la matrice de passage $\mathbb{H}^{\alpha,T}$ aux équations (1.71) et (1.72) et l'utilisation de l'équation (1.44) donne

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \mathbb{H}^{\alpha,T} \begin{pmatrix} \mathbb{M}^{-1} \vec{p} \\ \mathbb{J}^{-1} \vec{M}_p \end{pmatrix}. \quad (1.75)$$

Soit $\tilde{\mathbb{M}}$ la matrice de masse prenant en compte la masse et l'inertie de tout le système, définie par blocs, par :

$$\tilde{\mathbb{M}} = \begin{pmatrix} \mathbb{M} & 0 \\ 0 & \mathbb{J} \end{pmatrix}. \quad (1.76)$$

On peut alors réécrire l'équation (1.75) sous la forme :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \mathbb{H}^{\alpha,T} \tilde{\mathbb{M}}^{-1} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ \vec{M}_p \end{pmatrix}. \quad (1.77)$$

Finalement, en décomposant les impulsions \vec{p} et \vec{M}_p , suivant les contributions, \vec{p}^β et \vec{M}_p^β , venant de chaque contact β et en introduisant les matrices de passage \mathbb{H}^β , par le biais de l'équation (1.43), l'équation (1.77) devient

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \sum_{\beta} \mathbb{W}^{\alpha\beta} \vec{P}^\beta, \quad (1.78)$$

où \vec{P}^β est l'impulsion du contact β dans le repère local du contact β et $\mathbb{W}^{\alpha\beta}$ est l'opérateur de Delassus défini par :

$$\mathbb{W}^{\alpha\beta} = \mathbb{H}^{\alpha,T} \tilde{\mathbb{M}}^{-1} \mathbb{H}^\beta. \quad (1.79)$$

Moreau [76] a démontré que la condition de Signorini (1.37) pouvait s'écrire de façon équivalente en termes de vitesse normale U_N . On obtient alors l'expression suivante :

$$\delta \leq 0 \Rightarrow \begin{cases} U_N > 0 \Rightarrow R_N = 0 \\ U_N = 0 \Rightarrow R_N \geq 0 \end{cases}. \quad (1.80)$$

La moyenne des réactions de contact sur l'intervalle de temps $]t_i, t_f]$, notée $\langle \vec{R} \rangle$, est définie par

$$\langle \vec{R} \rangle = \frac{1}{t_f - t_i} \int_{t_i}^{t_f} d\vec{r}. \quad (1.81)$$

On peut donc relier les impulsions de contact \vec{P} aux réactions de contact, par

$$\vec{P} = (t_f - t_i) \langle \vec{R} \rangle. \quad (1.82)$$

La prise de moyenne des réactions de contact sur le pas de temps conserve leur signe. Les lois du contact frottant peuvent donc se réécrire en termes d'impulsion. On obtient, pour la condition de Signorini :

$$\delta \leq 0 \Rightarrow \begin{cases} U_N > 0 \Rightarrow P_N = 0 \\ U_N = 0 \Rightarrow P_N \geq 0 \end{cases}, \quad (1.83)$$

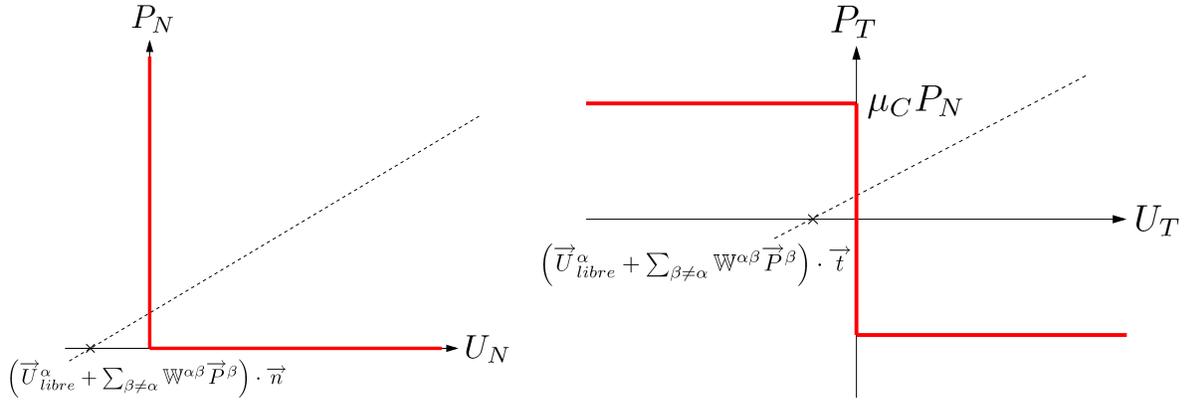


FIG. 1.8 – Représentation de l'équation de la dynamique (trait pointillé) sur les graphes de la condition de Signorini (gauche) et de la loi de frottement de Coulomb (droite).

et pour la loi de Coulomb :

$$\begin{cases} \|\vec{U}_T\| = 0 \Rightarrow \|\vec{P}_T\| \leq \mu_C P_N \\ \|\vec{U}_T\| > 0 \Rightarrow \vec{P}_T = -\mu_C P_N \frac{1}{\|\vec{U}_T\|} \vec{U}_T \end{cases} \quad (1.84)$$

L'équation de la dynamique, condensée dans le repère de contact associé au contact α , (1.78) peut se réécrire :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \mathbb{W}^{\alpha\beta} \vec{P}^\beta + \mathbb{W}^{\alpha\alpha} \vec{P}^\alpha. \quad (1.85)$$

L'équation (1.85) traduit le lien entre la vitesse relative \vec{U}_f^α et l'impulsion de contact \vec{P}^α imposé par l'équation de la dynamique. Si tous les autres contacts sont figés, la résolution du contact α revient donc à chercher le couple $(\vec{U}_f^\alpha, \vec{P}^\alpha)$, qui vérifie à la fois l'équation de la dynamique (1.85), la condition de Signorini (1.83) et la loi de Coulomb (1.84). Dans le cas bidimensionnel, cela se traduit graphiquement par la recherche de l'intersection de la droite représentant l'équation de la dynamique (1.85) avec les graphes de la condition de Signorini et de la loi de Coulomb (cf. FIG. 1.8).

On résout le problème multi-contact par une méthode itérative de type Gauss-Seidel. On suppose connues toutes les impulsions de contact, sauf celle du contact α considéré : les contacts $\beta < \alpha$ ont déjà été résolus et les réactions de contact pour les contacts $\beta > \alpha$ sont fixées arbitrairement. On cherche le couple $(\vec{U}_f^\alpha, \vec{P}^\alpha)$, qui vérifie à la fois l'équation de la dynamique, la condition de Signorini et la loi de Coulomb. On procède de même avec tous les contacts. Une fois tous les contacts parcourus, un test de convergence indique si on a trouvé une solution du problème multi-contact ou si on doit réitérer le processus [91].

Le schéma d'intégration en temps est la θ -méthode. On connaît au début du pas de temps, à l'instant t_i , les positions \vec{x}_i , et les vitesses \vec{v}_i et $\vec{\omega}_i$. Dans l'étape de prédiction, on calcule les positions dans la configuration correspondant à l'instant milieu $t_m = t_i + (1 - \theta)\Delta t$ en intégrant les vitesses de translation :

$$\vec{x}_m = \vec{x}_i + (1 - \theta)\Delta t \vec{v}_i \quad (1.86)$$

et les vitesses libres en intégrant les impulsions provenant des forces extérieures sur le pas de temps :

$$\vec{v}_{libre} = \vec{v}_i + \Delta t \mathbb{M}^{-1} \left[(1 - \theta) \vec{F}_{ext}(t_i) + \theta \vec{F}_{ext}(t_f) \right], \quad (1.87)$$

$$\vec{\omega}_{libre} = \vec{\omega}_i + \Delta t \mathbb{J}^{-1} \left[\vec{M}_{rot}(t_i) + (1 - \theta) \vec{M}_{ext}(t_i) + \theta \vec{M}_{ext}(t_f) \right], \quad (1.88)$$

où le terme \vec{M}_{rot} a été explicité et t_f est l'instant correspondant à la fin du pas de temps. On résout ensuite le problème multi-contact dans la configuration prédite, à l'instant milieu t_m , pour obtenir les impulsions de contact (\vec{p}, \vec{M}_p) . On peut alors corriger les vitesses à la fin du pas de temps :

$$\vec{v}_f = \vec{v}_{libre} + \mathbb{M}^{-1} \vec{p}, \quad (1.89)$$

$$\vec{\omega}_f = \vec{\omega}_{libre} + \mathbb{J}^{-1} \vec{M}_p. \quad (1.90)$$

Finalement, on obtient les positions à la fin du pas de temps en intégrant les vitesses :

$$\vec{x}_i = \vec{x}_m + \theta \Delta t \vec{x}_f. \quad (1.91)$$

Le schéma est inconditionnellement stable pour $\theta \geq 1/2$ et conservatif pour $\theta = 1/2$. La formulation en vitesse de la condition de Signorini (1.83) donne une condition qui ne s'active que dans le cas où la distance entre deux objets devient négative ou nulle. Afin de garantir que la solution obtenue corresponde réellement à notre modèle physique du problème, l'interpénétration doit rester suffisamment faible. Le pas de temps doit donc être d'autant plus faible que la dynamique du système étudié est rapide [91].

On a d'abord présenté la formulation en vitesse de la condition de Signorini, afin d'expliquer comment la méthode NSCD permettait de traiter la non-régularité de la condition de Signorini et de la loi Coulomb, en condensant l'équation de la dynamique aux contacts. On peut cependant traiter d'autres lois de contact, en adaptant leur écriture au formalisme de la méthode NSCD.

1.3.4.2 Loi de choc avec coefficient de restitution

La loi de choc avec coefficient de restitution de Newton s'écrit :

$$U_N^{\alpha,+} = -e_n U_N^{\alpha,-}, \quad (1.92)$$

où $U_N^{\alpha,-}$ est la vitesse avant le choc, $U_N^{\alpha,+}$ est la vitesse après le choc et e_n est le coefficient de restitution normal. On pose

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_f^\alpha + e_n U_{i,N}^\alpha \vec{n}^\alpha, \quad (1.93)$$

où \vec{n}^α est la normale au contact α et $U_{i,N}^\alpha$ est la partie normale de la condensation au contact α des vitesses au début du pas de temps \vec{v}_i . L'équation de la dynamique, dérivée de (1.85),

vérifiée par \vec{U}_f^α est

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + e_n U_{i,N}^\alpha \vec{n}^\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \mathbb{W}^{\alpha\beta} \vec{P}^\beta + \mathbb{W}^{\alpha\alpha} \vec{P}^\alpha. \quad (1.94)$$

La résolution du contact α revient donc à chercher le couple $(\vec{U}_f^\alpha, \vec{P}^\alpha)$, qui vérifie à la fois l'équation de la dynamique (1.94), la condition de Signorini (1.83) et la loi de Coulomb (1.84). La loi n'est activée que si la distance entre les deux corps formant le contact α est négative. Dans le cas d'un contact binaire, la résolution aboutit donc à $\vec{U}_N^\alpha = 0$, soit $U_N^\alpha = -e_n U_{i,N}^\alpha$ et $P_N^\alpha > 0$. Il y a donc eu un choc durant le pas de temps et à la fin du pas de temps, on obtient une réaction de contact positive correspondant à une vitesse relative compatible avec la loi de choc. De même que dans le cas de la formulation en vitesse de la condition de Signorini, l'utilisation de cette loi en restitution nécessite de prendre un pas de temps d'autant plus faible que la dynamique du système étudié est rapide.

1.3.4.3 Loi de quasi-choc inélastique

D'un point vue numérique, la formulation en vitesse de la condition de Signorini ne permet pas d'assurer que la distance entre deux objets en contact reste positive tout au long de la simulation, si le pas de temps est trop grand. Jean [52] a alors introduit la loi de quasi-choc inélastique, qui garantit que les distances entre objets en contact sont positives dans la configuration de l'instant milieu t_m , pour chaque pas de temps. Cette loi étant moins classique que la précédente, on présente en détail sa dérivation.

Considérons un pas de temps. La θ -méthode fournit les positions à la fin du pas de temps, instant t_f , en fonction des positions à l'instant milieu t_m :

$$\vec{x}_f = \vec{x}_m + \theta \Delta t \vec{v}_f, \quad (1.95)$$

ainsi que les positions à l'instant milieu du pas d'après t_{m+1} en fonction des positions à la fin du pas de temps courant :

$$\vec{x}_{m+1} = \vec{x}_f + (1 - \theta) \Delta t \vec{v}_f. \quad (1.96)$$

On peut alors écrire les positions à l'instant milieu du pas d'après en fonction des positions à l'instant milieu du pas courant :

$$\vec{x}_{m+1} = \vec{x}_m + \Delta t \vec{v}_f. \quad (1.97)$$

L'équation (1.97) condensée dans le repère de contact du contact α et projetée sur la normale au contact α donne :

$$\delta_{m+1}^\alpha = \delta_m^\alpha + \Delta t U_{f,N}^\alpha, \quad (1.98)$$

où δ_m^α et δ_{m+1}^α sont les distances entre les deux corps formant le contact α dans la configuration de l'instant milieu, respectivement, du pas de temps courant et du pas de temps suivant et $U_{f,N}^\alpha$

est la partie normale de la condensation au contact α des vitesses à la fin du pas de temps \vec{v}_f . L'équation (1.98), écrite en termes de distances, peut se réécrire en termes de vitesses relatives comme suit :

$$\frac{\delta_{m+1}^\alpha}{\Delta t} = \frac{\delta_m^\alpha}{\Delta t} + U_{f,N}^\alpha. \quad (1.99)$$

L'équation locale de la dynamique (1.85) s'écrit alors :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \frac{\delta_m^\alpha}{\Delta t} \vec{n}^\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \mathbb{W}^{\alpha\beta} \vec{P}^\beta + \mathbb{W}^{\alpha\alpha} \vec{P}^\alpha, \quad (1.100)$$

où on a posé :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_f^\alpha + \frac{\delta_m^\alpha}{\Delta t} \vec{n}^\alpha, \quad (1.101)$$

et la condition de Signorini (1.37) sur δ_{m+1}^α est réécrite en termes de vitesses relatives et d'impulsions :

$$\begin{cases} \tilde{U}_N^\alpha > 0 \Rightarrow P_N^\alpha = 0 \\ \tilde{U}_N^\alpha = 0 \Rightarrow P_N^\alpha > 0 \end{cases}. \quad (1.102)$$

La résolution du contact α revient donc à chercher le couple $(\vec{U}_f^\alpha, \vec{P}^\alpha)$, qui vérifie à la fois l'équation de la dynamique (1.100), la condition de Signorini (1.102) et la loi de Coulomb (1.84). L'activation de cette loi doit se faire tant que la distance δ_m^α est positive. On introduit donc une distance d'alerte autour des corps. De cette façon, quand les enveloppes correspondant aux distances d'alerte de deux corps s'intersectent, ceux-ci sont potentiellement en contact, sans être interpénétrés. On peut alors choisir un pas de temps aussi grand que l'on veut si on lui associe une distance d'alerte suffisamment grande pour que la dynamique ne crée pas d'interpénétration entre les corps.

D'un point de vue numérique, il est toujours possible de devoir traiter des distances δ_m^α négatives. Afin d'éviter d'injecter de l'énergie en utilisant la condition de Signorini dans le cas où δ_m^α devient négatif, l'équation (1.101) définissant \vec{U}_f^α est remplacée par :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_f^\alpha + \max\left(\frac{\delta_m^\alpha}{\Delta t}, 0\right) \vec{n}^\alpha, \quad (1.103)$$

et l'équation de la dynamique (1.100) par :

$$\vec{U}_f^\alpha = \vec{U}_{libre}^\alpha + \max\left(\frac{\delta_m^\alpha}{\Delta t}, 0\right) \vec{n}^\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \mathbb{W}^{\alpha\beta} \vec{P}^\beta + \mathbb{W}^{\alpha\alpha} \vec{P}^\alpha. \quad (1.104)$$

On a alors obtenu la forme discrétisée de la loi de quasi-choc inélastique.

1.3.4.4 Discussion des lois de contacts

Le choix de la loi de contact (loi en restitution ou loi de quasi-choc inélastique) dépend du système étudié. La loi en restitution est la seule indiquée si on veut représenter un choc élastique.

Dans le cas d'un choc inélastique, deux choix peuvent être envisagés : la loi en restitution avec un coefficient nul ou la loi de quasi-choc inélastique. Si le système est peu dynamique ou si la compacité est assez faible, la loi en restitution conduit à un nombre de contacts actifs plus petit, mais nécessite un pas de temps plus petit pour diminuer l'interpénétration. La loi de quasi-choc inélastique peut utiliser un pas de temps arbitraire sans générer d'interpénétration, mais plus le système sera dynamique, plus la distance d'alerte devra être grande et plus le nombre de contacts actifs sera grand.

On a vu dans la sous-section 1.3.3 que dans le cadre de cette étude, les pressions exercées sur les contacts les plus profonds peuvent être importantes. L'utilisation de la loi en restitution nécessiterait donc des pas de temps très petits, pour ne pas générer d'interpénétration. On a aussi rappelé dans cette sous-section que l'on souhaite réaliser cette étude à une échelle au-dessus de celle des ondes. L'utilisation de la méthode NSCD, avec la loi de quasi-choc inélastique, permettant de choisir l'échelle de temps, à condition de bien choisir la distance d'alerte, semble donc appropriée.

1.4 Méthodes de couplage fluide-grains

On présente dans cette section une sélection de différentes méthodes numériques développées pour simuler les écoulements fluide-grains. Parmi toutes les méthodes existantes, on a extrait un sous-ensemble représentatif des différentes stratégies utilisées. On les a classées selon deux critères : la description, eulérienne ou lagrangienne, choisie pour chacune des phases et l'échelle à laquelle le couplage entre les phases fluide et solide est opéré.

On présente dans une première sous-section les modèles, eulériens et lagrangiens, utilisés pour décrire la phase fluide. Les sous-sections suivantes présentent les différentes méthodes selon le type de représentation choisie pour chaque phase : Lagrange-Lagrange, Euler-Lagrange et Euler-Euler. Au sein de chaque sous-section les méthodes sont présentées par ordre croissant de taille de système. Enfin, une dernière sous-section propose une discussion des méthodes permettant de choisir la plus adaptée à ce travail.

1.4.1 Modèles eulériens pour la phase fluide

On présente ici deux modèles pour la phase fluide : les équations de Navier-Stokes (échelle mésoscopique) et l'équation de Boltzmann (échelle microscopique), ainsi que les méthodes de résolution adaptées. On présente aussi la méthode utilisée pour imposer la condition à la limite de non-glissement, qui est utilisée par la suite dans les méthodes de couplage fluide-grains pour modéliser le comportement à l'interface entre le fluide et les particules.

1.4.1.1 Equations de Navier-Stokes

Dans les modèles eulériens, la phase fluide est un milieu continu caractérisé par sa masse volumique locale $\rho_f(\vec{x}, t)$ et sa densité de quantité de mouvement locale $\vec{j}_f(\vec{x}, t)$. La masse volumique du fluide dépend de la position, excepté dans le cas d'un fluide incompressible. La vitesse locale d'écoulement est donc définie par $\vec{u}_f = 1/\rho_f \vec{j}_f$. Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent [78, 99] :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{u}_f) = 0, \quad (1.105)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \vec{u}_f) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho_f \vec{g}, \quad (1.106)$$

où p est la pression hydrostatique, $\vec{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses et \vec{g} est l'accélération de gravité. La forme générale du tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide newtonien est :

$$\vec{\tau} = \lambda \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_f \right) \vec{I} + \mu \left[\vec{\nabla} \vec{u}_f + \left(\vec{\nabla} \vec{u}_f \right)^T \right], \quad (1.107)$$

où μ est le coefficient de viscosité dynamique du fluide, λ est le deuxième coefficient de viscosité et \vec{I} est le tenseur unité du second ordre. Le coefficient de viscosité de volume est défini par

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu, \quad (1.108)$$

et s'annule lorsqu'on néglige les variations de volume du fluide. Le tenseur des contraintes dans le fluide $\vec{\sigma}$ s'écrit :

$$\vec{\sigma} = -p \vec{I} + \vec{\tau}. \quad (1.109)$$

Les méthodes de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) consistent à résoudre par Eléments Finis, Différences Finies ou Volumes Finis ces équations sur une grille eulérienne. On se référera à [33, 34] pour une revue des nombreux schémas de discrétisation développés dans la littérature.

Pour modéliser la présence d'une paroi, on utilise la condition à la limite de non glissement. On impose que la vitesse du fluide doit être égale à la vitesse du solide sur la paroi, *i.e.* une vitesse nulle pour une paroi fixe.

1.4.1.2 Méthode Lattice Boltzmann

Les méthodes de *Lattice Boltzmann* (LBM) ont été développées pour simuler des écoulements de gaz à l'échelle des particules (échelle microscopique). Dans ces méthodes [18, 100], on substitue aux équations de Navier-Stokes (1.105) et (1.106), l'équation de Boltzmann avec

un terme collisionnel linéaire en écart par rapport à l'état d'équilibre local, dont la validité s'étend à l'échelle d'une collection de particules de taille modérée :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(\vec{x}, \vec{v}, t) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x}, \vec{v}, t) = -\frac{1}{\tau_r} [f(\vec{x}, \vec{v}, t) - f^{eq}(\rho_f, \vec{u}_f, T_f)], \quad (1.110)$$

où f est la fonction de distribution d'une seule particule, $f^{eq}(\rho_f, \vec{u}_f, T_f)$ est la fonction de distribution de l'équilibre local à la température T_f et τ_r est le temps de relaxation. f représente la densité de particules dans l'espace des vitesses et des coordonnées :

$$\rho_f(\vec{x}, t) = \int f d\vec{v}, \quad (1.111)$$

$$\rho_f(\vec{x}, t) \vec{u}_f(\vec{x}, t) = \int f \vec{v} d\vec{v}, \quad (1.112)$$

où l'intégrale est prise sur l'ensemble des vitesses possibles.

On peut montrer que les champs obtenus par la méthode de *Lattice Boltzmann* sont équivalents à ceux obtenus par la résolution de l'équation de Navier-Stokes, où la viscosité dépend de τ_r .

Le schéma numérique de résolution de l'équation (1.110) est obtenu classiquement en la discrétisant par la méthode des différences finies. La particularité de ce modèle est de travailler dans l'espace vitesses-coordonnées plutôt que dans l'espace réel. Cet espace spécifique est discrétisé en utilisant un réseau où chaque nœud représente une position possible pour les particules et chaque élément représente une vitesse possible.

On définit les nœuds frontières par les centres des éléments du réseau traversant la frontière d'une particule. Pour imposer la condition à la limite de non-glissement sur une paroi, on laisse les distributions "rebondir" aux nœuds frontières [60], c'est à dire que la distribution revient par la direction dont elle est venue.

1.4.2 Un modèle lagrangien pour la phase fluide

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) est une méthode sans maillage pour résoudre les équations de l'hydrodynamique, où le fluide est représenté par un ensemble de particules. Elles suivent l'écoulement et servent de points d'interpolation pour évaluer les quantités physiques. Elle a été développée initialement pour simuler des phénomènes tridimensionnels en astrophysique [65, 38] et une revue est faite par Monaghan [73]. Le cœur de la méthode est la technique d'interpolation utilisée qui consiste pour l'essentiel à connaître la valeur d'une fonction en un point par une pondération (ou un lissage) de sa valeur aux points voisins (modèle local).

Soit A une fonction définie en tout point \vec{x} de l'espace, on a :

$$A(\vec{x}) = \int A(\vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}', \quad (1.113)$$

où l'intégrale est prise sur l'espace entier et δ est (sans confusion possible avec la distance algébrique entre deux objets) la fonction delta de Dirac. Considérons une fonction W telle que :

$$\int W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{x} - \vec{x}', h) = \delta(\vec{x} - \vec{x}', h). \quad (1.114)$$

On a alors :

$$A(\vec{x}) \approx \int A(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}'. \quad (1.115)$$

Dans la méthode originale, la fonction W utilisée est une gaussienne [38]. On a alors, dans le cas tridimensionnel :

$$W(\vec{u}, h) = \frac{1}{(h\sqrt{2\pi})^3} \exp\left(-\frac{\|\vec{u}\|^2}{h^2}\right), \quad (1.116)$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme euclidienne. Par la suite d'autres auteurs ont utilisé des splines [77].

La masse volumique du fluide est estimée en tout point par :

$$\rho_f(\vec{x}) = \sum_b m_b W(\vec{x} - \vec{x}_b, h), \quad (1.117)$$

où l'indice b désigne les particules, m_b et \vec{x}_b sont respectivement la masse et la position de la particule b . En approchant l'intégrale de l'équation (1.115) par une somme sur les particules, on peut alors estimer la quantité A en tout point :

$$A(\vec{x}) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_{f,b}} W(\vec{x} - \vec{x}_b, h), \quad (1.118)$$

où A_b est la valeur de la quantité A en \vec{x}_b et $\rho_{f,b}$ la masse volumique en \vec{x}_b . La fonction W étant différentiable, on peut estimer le gradient de A en tout point par :

$$\vec{\nabla} A(\vec{x}) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_{f,b}} \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}_b, h). \quad (1.119)$$

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement utilisées dans la méthode SPH sont dérivées des équations eulériennes. L'idée est de partir des équations originales, les multiplier par le noyau W et utiliser le théorème de Gauss, pour connaître l'équation que doivent satisfaire les opérateurs d'interpolation de la méthode SPH.

La méthode SPH a d'abord été écrite pour les fluides compressibles non visqueux. Elle a ensuite été étendue aux fluides visqueux en utilisant une viscosité artificielle [77, 19] et aux fluides incompressibles en utilisant une loi d'état assurant d'avoir un nombre de Mach suffisamment faible pour que les effets de la compressibilité soient négligeables [77].

La densité du fluide est obtenue par l'équation (1.117) ou en intégrant l'équation de continuité, selon le modèle utilisé pour le fluide. L'intégration de l'équation de conservation de la quantité de mouvement fournit les vitesses des particules. Leurs positions sont alors obtenues en les intégrant.

1.4.3 Une méthode Lagrange-Lagrange : SPH-DEM

Potapov *et al.* [88] ont proposé une méthode couplant deux modèles lagrangiens, un pour la phase fluide et un pour la phase solide. L'écoulement du fluide visqueux et incompressible est résolu par la méthode SPH et celui du solide par une méthode aux éléments discrets. Les particules utilisées pour discrétiser la phase fluide sont petites devant les particules solides. La phase fluide est donc résolue à l'échelle microscopique et la phase solide à l'échelle mésoscopique.

Pour appliquer la condition à la limite de non glissement à la surface des particules solides, on place à l'intérieur des particules solides des particules fluides fantômes. Ces particules fluides suivent le mouvement de la particule solide à laquelle elles sont attachées. On leur associe une densité artificielle afin d'empêcher les particules fluides suivant l'écoulement de pénétrer dans la particule solide.

La vitesse artificielle associée à chacune de ces particules est calculée de sorte à vérifier la condition de non glissement. La méthode utilisée, et présentée ici, a été proposée initialement par Morris *et al.* [77]. Soit a une particule dans l'écoulement et b une particule fantôme (cf. FIG. 1.9). Le segment reliant ces deux particules fluides coupe la frontière de la particule solide en O . Soit T le plan (en 3D, ou la droite en 2D) tangent à la frontière en O et \vec{n} la normale à la frontière en O . On suppose que les vecteurs vitesses \vec{v}_a et \vec{v}_b sont colinéaires à \vec{n} et on appelle d_a et d_b respectivement la distance de la particule a à T et la distance de la particule b à T . Le gradient de vitesse entre les particules a et b s'écrit alors :

$$\frac{1}{d_a + d_b}(\vec{v}_a - \vec{v}_b), \quad (1.120)$$

et la vitesse au point O s'écrit :

$$\vec{v}_O = \frac{d_b}{d_a + d_b}(\vec{v}_a - \vec{v}_b) + \vec{v}_b. \quad (1.121)$$

La vitesse du point O peut être calculée à partir des vitesses de translation et de rotation de la particule solide. La vitesse artificielle à appliquer à la particule b est donc :

$$\vec{v}_b = \vec{v}_O + \frac{d_b}{d_a}(\vec{v}_O - \vec{v}_a). \quad (1.122)$$

Les vitesses artificielles des particules fantômes servent à calculer les forces visqueuses \vec{F}_b apparaissant dans l'équation de conservation de quantité de mouvement. On calcule la résultante $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ et le moment $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j$ de la force exercée par le fluide sur une particule j en sommant les forces visqueuses liées aux particules fantômes :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = - \sum_b \vec{F}_b, \quad (1.123)$$

$$\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = - \sum_b (\vec{x}_b - \vec{x}^j) \wedge \vec{F}_b, \quad (1.124)$$

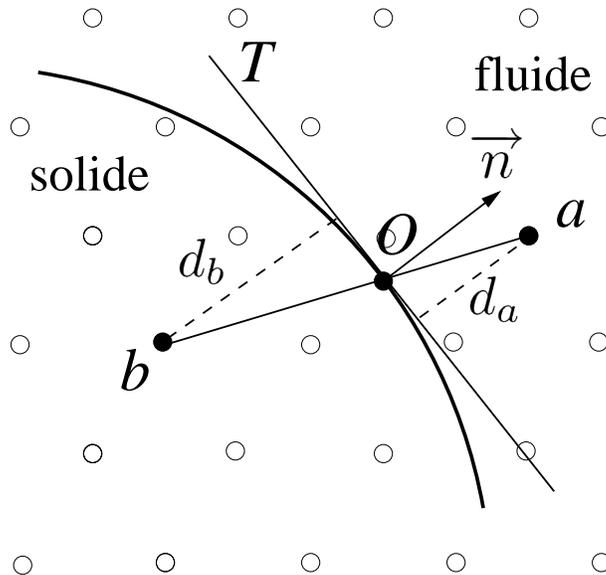


FIG. 1.9 – Illustration de l’implémentation de la condition à la limite de non glissement à la surface d’une particule solide.

où \vec{x}_b est la position de la particule fantôme b et \vec{x}^j la position du centre d’inertie de la particule j .

L’implémentation de la méthode SPH-DEM est peu coûteuse en termes de stockage, puisqu’il s’agit d’une méthode sans maillage. Cependant, les particules servant à discrétiser la phase fluide étant petites devant les particules solides, le nombre total de particules mis en jeu augmente rapidement avec le nombre de particules solides. Son utilisation se limite donc à des systèmes de petite taille.

1.4.4 Méthodes Euler-Lagrange

On présente ici les méthodes où on prend une représentation eulérienne pour le fluide et lagrangienne pour le solide. Parmi les méthodes existantes, pour réaliser ce type de couplage, on a choisi de ne présenter que les méthodes couplant un modèle eulérien pour le fluide avec une méthode aux éléments discrets pour le solide. En effet, les autres méthodes ne permettent pas de traiter efficacement les interactions entre particules, à cause d’hypothèses sur la loi d’interaction entre particules solides ou de contraintes géométriques.

Les méthodes présentées diffèrent par le modèle choisi pour représenter le fluide, mais utilisent toutes une méthode aux éléments discrets (DEM) pour calculer le comportement des grains. Les forces s’exerçant sur une particule j sont la gravité et la force $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ exercée par le fluide. La résultante \vec{F}_{ext}^j et le moment \vec{M}_{ext}^j des forces extérieures apparaissant dans les

équations de la dynamique (1.23) et (1.24) s'écrivent donc :

$$\vec{F}_{ext}^j = m^j \vec{g} + \vec{F}_{f \rightarrow s}^j, \quad (1.125)$$

$$\vec{M}_{ext}^j = \vec{M}_{f \rightarrow s}^j, \quad (1.126)$$

où \vec{g} est l'accélération de gravité et $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ et $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j$ sont respectivement la résultante et le moment de la force exercée par le fluide sur la particule j . On présente dans chaque cas la méthode utilisée pour modéliser la phase fluide et calculer la résultante \vec{F}_{ext}^j et le moment \vec{M}_{ext}^j de la force exercée par le fluide sur une particule j .

1.4.4.1 Méthodes LBM-DEM

Cette méthode consiste à coupler la résolution de l'écoulement de la phase fluide par la méthode de *Lattice Boltzmann* à la résolution de l'écoulement de la phase solide par une méthode DEM. Les éléments du réseau sont petits devant le diamètre des particules solides. La phase fluide est donc résolue à l'échelle microscopique et la phase solide à l'échelle macroscopique.

La présence des particules solides dans le fluide est modélisée par une condition de non glissement sur la paroi des particules et gérée par la règle du rebond. La force s'appliquant sur une particule solide j est obtenue à partir de la somme des variations de quantité de mouvement $\Delta \vec{p}_b$, pour tous les nœuds frontières b où on a appliqué la règle du rebond [60] :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = -\frac{1}{\Delta t} \sum_b \Delta \vec{p}_b, \quad (1.127)$$

$$\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = -\frac{1}{\Delta t} \sum_b (\vec{x}_b - \vec{x}^j) \wedge \Delta \vec{p}_b, \quad (1.128)$$

où on rappelle que \vec{x}_b est la position du nœud frontière b et \vec{x}^j est la position du centre d'inertie de la particule j .

La méthode LBM-DEM est une méthode sur réseau et donc peu coûteuse en termes de stockage. Néanmoins, les éléments du réseau étant petits devant le diamètre des particules, le nombre d'éléments augmente rapidement avec le nombre de particules. Un algorithme fondé sur cette méthode a été développé par Mansouri *et al.* au LMGC (Laboratoire de Mécanique et Génie Civil) pour l'étude des sols saturés [68]. Un avantage de cette méthode est sa potentialité pour la simulation des milieux granulaires non-saturés où le liquide se trouve sous la forme de ponts isolés ou potentiellement connectés entre les particules.

1.4.4.2 Méthodes CFD-DEM : fluide résolu

Les méthodes de résolutions numériques directes (*Direct Numerical Simulation*) consistent à résoudre directement les équations de Navier-Stokes, pour obtenir l'écoulement du fluide.

On présente dans cette section les méthodes qui couplent ce type de résolution pour la phase fluide, avec une méthode aux éléments discrets (DEM), pour la résolution de la phase solide. Ces méthodes utilisent un maillage pour la résolution du fluide dont les éléments sont petits devant la taille des particules. La phase fluide est donc résolue à l'échelle microscopique et la phase solide à l'échelle mésoscopique.

La prise en compte des conditions de non glissement à la surface de particules sphériques peut être réalisée efficacement par la méthode des frontières immergées [72, 86], en combinaison avec la méthode de forçage direct [107]. Dans cette méthode, on définit les points de force lagrangiens, qui sont uniformément répartis à la surface de la sphère. On calcule en chaque point de force la vitesse fluide à imposer pour que la condition de non glissement soit vérifiée, à partir des vitesses de translation et des vitesses angulaires de la sphère. On impose alors les vitesses obtenues aux points de force. Il en résulte, en chaque point de force m , une densité volumique de force $f_m(\vec{x}_m)$, que l'on sait calculer dans le cas de particules sphériques. En se donnant une fonction de distribution D , on peut alors calculer une densité volumique de force $\vec{f}_{s \rightarrow f}$, dans le cadre eulérien :

$$\vec{f}_{s \rightarrow f}(\vec{x}) = \sum_m D(\vec{x} - \vec{x}_m) \vec{f}_m(\vec{x}_m). \quad (1.129)$$

Il faut alors ajouter ce terme source au second membre de l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans le fluide (1.106) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \vec{u}_f) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho_f \vec{g} + \vec{f}_{s \rightarrow f}. \quad (1.130)$$

On obtient la force exercée par le fluide sur une particule j par :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = - \sum_m \vec{f}_m \delta l^3, \quad (1.131)$$

$$\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = - \sum_m (\vec{x}_m - \vec{x}^j) \wedge \vec{f}_m \delta l^3, \quad (1.132)$$

où \vec{x}^j est la position du centre d'inertie de la particule j et δl^3 est le volume d'un élément du maillage utilisé pour la résolution CFD.

Dans le cas de la méthode des domaines fictifs [39], couplée à une méthode DEM, on définit un ensemble de nœuds où imposer une vitesse de corps rigides. Cet ensemble est composé des nœuds du maillage fluide situés à l'intérieur des particules, auxquels on ajoute de nouveaux nœuds disposés sur leur surface. Comme dans le cas des frontières immergées, on calcule la vitesse à imposer en chaque nœud à partir des vitesses de translation et de rotation des particules. La méthode utilisée pour imposer cette contrainte peut être d'utiliser des multiplicateurs de Lagrange [114] ou une méthode de pénalisation [50]. Ils représentent des densités volumiques de force résultant de l'application de la contrainte. La résultante $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ de la force exercée par le fluide sur une particule j est donc obtenue en intégrant ces densités de force sur le volume de

la particule. De même, le moment $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j$ de cette force est obtenu en intégrant sur le volume de la particule les densités de moments, calculées à partir des densités de force précédentes.

Ce type de méthode fournit un écoulement de fluide calculé de façon précise, dans l'interface entre le fluide et les grains. Il peut être plus ou moins coûteux, selon la méthode choisie pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Il souffre du problème présenté dans la discussion des méthodes SPH-DEM et LB-DEM : les éléments étant petits devant les particules, le coût, en termes de temps de calcul, de ce type de méthode devient prohibitif quand il est appliqué à des systèmes de taille raisonnable.

1.4.4.3 Méthodes CFD-DEM : fluide non-résolu

Ce type de méthode [105, 47, 116] consiste à résoudre à l'échelle mésoscopique des équations de Navier-Stokes modifiées tenant compte de la présence de particules à l'échelle microscopique. Le processus de prise de moyenne utilisé pour dériver ces équations a d'abord été introduit par Anderson et Jackson [6] et consiste à appliquer aux équations de Navier-Stokes un opérateur d'interpolation.

On présente dans un premier temps l'opérateur d'interpolation utilisé, les équations de Navier-Stokes moyennées qui en découlent et les conséquences de la prise de moyenne sur le calcul du tenseur des contraintes visqueuses. On présente dans un second temps la mise en œuvre de ce type de méthode.

On définit la fonction de pondération h par

$$4\pi \int_0^{+\infty} h(r)r^2 dr = 1. \quad (1.133)$$

On peut ainsi définir la fraction volumique de fluide, *i.e.* la porosité de la matrice granulaire, au point \vec{x} par

$$\phi(\vec{x}) = \int_{V_f} h(\|\vec{x} - \vec{y}\|) dV_y, \quad (1.134)$$

où V_f est le volume total occupé par le fluide, et l'opérateur de prise de moyenne sur la phase fluide, $\langle A \rangle_f$ d'une quantité A , en un point \vec{x} , par

$$\phi(\vec{x}) \langle A \rangle_f(\vec{x}) = \int_{V_f} A(\vec{y}) h(\|\vec{x} - \vec{y}\|) dV_y. \quad (1.135)$$

On applique ces opérateurs, et leurs dérivées, aux équations de Navier-Stokes (1.105) et (1.106) pour aboutir aux équations de Navier-Stokes moyennées [6, 48] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \langle \rho_f \rangle_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi \langle \rho_f \rangle_f \langle \vec{u}_f \rangle_f) = 0, \quad (1.136)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi\langle\rho_f\rangle_f\langle\vec{u}_f\rangle_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi\langle\rho_f\rangle_f\langle\vec{u}_f\rangle_f \otimes \langle\vec{u}_f\rangle_f) = \\ - \vec{\nabla}\langle p\rangle_f + \vec{\nabla} \cdot \left(\phi \langle \vec{\tau} \rangle_f \right) + \phi\langle\rho_f\rangle_f\vec{g}. \end{aligned} \quad (1.137)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.137) fait intervenir un tenseur des contraintes visqueuses moyen sur la phase fluide dont l'expression s'écrit pour un fluide newtonien (cf. (1.107) et (1.135)) :

$$\begin{aligned} \phi(\vec{x}) \langle \vec{\tau} \rangle_f(\vec{x}) = \int_{V_f} \left[\lambda \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_f \right) \vec{I} + \right. \\ \left. \mu \left[\vec{\nabla} \vec{u}_f + \left(\vec{\nabla} \vec{u}_f \right)^T \right] \right] h(\|\vec{x} - \vec{y}\|) dV_y. \end{aligned} \quad (1.138)$$

Pour des particules rigides, les taux de déformation et la divergence du vecteur vitesse sont nuls en tout point des particules et l'intégrale précédente peut s'écrire sur le volume total du mélange V . L'opérateur de moyenne sur le volume total, $\langle A \rangle$ d'une quantité A , en un point \vec{x} , défini par

$$\langle A \rangle(\vec{x}) = \int_V A(\vec{y}) h(\|\vec{x} - \vec{y}\|) dV_y, \quad (1.139)$$

commute avec l'opérateur de dérivation en espace [48], et (1.138) devient :

$$\phi \langle \vec{\tau} \rangle_f = \lambda \left(\vec{\nabla} \cdot \langle \vec{u}_f \rangle \right) \vec{I} + \mu \left[\vec{\nabla} \langle \vec{u}_f \rangle + \left(\vec{\nabla} \langle \vec{u}_f \rangle \right)^T \right]. \quad (1.140)$$

De plus, les équations de Navier-Stokes moyennées s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi\rho_f\vec{u}_f) = 0, \quad (1.141)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho_f\vec{u}_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi\rho_f\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\vec{\nabla}p + \vec{\nabla} \cdot \left(\phi \vec{\tau}_f \right) + \phi\rho_f\vec{g}, \quad (1.142)$$

où ρ_f , p , \vec{u}_f et $\vec{\tau}_f$ sont respectivement les moyennes sur la phase fluide de la masse volumique, de la pression, du vecteur vitesse et du tenseur des contraintes visqueuses.

La résultante de la force exercée par le fluide sur une particule j se décompose en un terme provenant de l'intégration des efforts de pression sur la surface de la particule et un terme de traînée :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = -V^j \vec{\nabla} p + \frac{\beta V^j}{1 - \phi} (\vec{u}_f - \vec{v}^j), \quad (1.143)$$

où V^j est le volume de la particule j , \vec{v}^j sa vitesse et β le coefficient de frottement visqueux. La valeur de β varie avec le nombre de Reynolds et peut-être obtenue par l'équation d'Ergun [30], pour $\phi < 0,8$ et l'équation de Wen et Yu [115], pour $\phi > 0,8$. Les auteurs travaillant avec cette méthode annulent en général arbitrairement le moment de la force exercée par le fluide sur

une particule j , *i.e.* $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = \vec{0}$. On peut justifier ce choix dans le cas d'un gaz, en admettant que ce dernier ne peut transmettre de couple aux particules.

La densité volumique de force imposée au fluide par les particules, considérées ponctuelles, s'écrit donc :

$$\vec{f}_{s \rightarrow f}(\vec{x}) = -\frac{1}{V} \int_V \sum_j \delta(\vec{x} - \vec{x}^j) \vec{F}_{f \rightarrow s}^j dV, \quad (1.144)$$

où \vec{x}^j est la position de la particule j et on rappelle que δ est (sans confusion possible avec la distance algébrique entre deux objets) la fonction delta de Dirac.

Ce terme apparaît comme un terme source dans les équations de Navier-Stokes et (1.142) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_f \vec{u}_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi \rho_f \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{\tau}_f) + \phi \rho_f \vec{g} + \vec{f}_{s \rightarrow f}. \quad (1.145)$$

La discrétisation spatiale de ces quantités repose sur le calcul discret de la compacité de la matrice granulaire dans un élément du maillage qui s'obtient comme la somme des volumes des particules présentes dans cet élément divisée par le volume de l'élément. La porosité est le complémentaire de la compacité obtenue, soit :

$$\phi = 1 - \frac{\sum_j V^j}{\Delta V}, \quad (1.146)$$

où ΔV est le volume d'un élément de la discrétisation.

Ce type de méthode considère la phase fluide à l'échelle mésoscopique et les particules solides à l'échelle microscopique. Il calcule donc un écoulement moyen et fait intervenir un modèle macroscopique pour le calcul de la force exercée par le fluide sur les particules. En contrepartie de cette perte de précision, ce type de méthode utilise des éléments plus grands que les particules et permet ainsi de traiter des systèmes plus conséquents, que les méthodes considérant le fluide à l'échelle microscopique (*i.e.* SPH-DEM, LBM-DEM et CFD-DEM : fluide résolu).

1.4.4.4 Méthode FD-DEM : gaz parfait

McNamara *et al.* [70, 7] ont développé une autre méthode de couplage gaz (échelle mésoscopique)/grains (échelle microscopique), qui ne s'appuie ni sur les équations de Navier-Stokes, ni sur l'équation de Boltzmann. Cette méthode se limite aux gaz parfaits dont l'écoulement dans la matrice granulaire peut être convenablement modélisé par la loi de Darcy [24] (milieu poreux).

Pour un tel gaz parfait (inertie négligée) les seules équations de conservation de la masse du fluide et des grains, écrites dans une représentation eulérienne fournissent une équation d'évolution de la pression du gaz :

$$\phi \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p \right) = \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa}{\mu} \vec{\nabla} p \right) - p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \quad (1.147)$$

où \vec{u}_s est la vitesse eulérienne de la phase solide et κ est la perméabilité de la matrice granulaire. La loi de Kozeny-Carman [15], donnant la perméabilité de la matrice granulaire en fonction de sa porosité est alors utilisée comme équation de fermeture.

La viscosité du gaz étant très faible, la force de traînée est négligée. De même, l'inertie du gaz étant négligée, le moment de la force exercée par le fluide sur une particule j est nul, *i.e.* $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = \vec{0}$. La résultante $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ de la force exercée par le fluide sur une particule j provient uniquement de l'intégration des efforts de pression, et s'écrit :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = -\frac{m^j}{\rho_s^*} \vec{\nabla} p, \quad (1.148)$$

où m est la masse d'un grain, l'échantillon étant supposé monodisperse, et ρ_s^* est la masse volumique locale de la phase solide.

Pour discrétiser l'équation (1.147), McNamara *et al.* s'appuient sur la méthode des différences finies à maillage régulier, dont les éléments sont grands par rapport au diamètre des particules [70]. Pour réaliser les changements d'échelle, on définit une fonction de distribution D , qui vérifie la partition de l'unité. Considérons un élément du maillage et \vec{x} un point dans cette maille, D doit vérifier :

$$\sum_k D(\vec{x} - \vec{x}_k) = 1, \quad (1.149)$$

où on somme sur les nœuds sommets k de l'élément considéré. Pour chaque particule j dans cet élément, on calcule la force résultant de la force exercée par le fluide sur cette particule par :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = \vec{F}_{f \rightarrow s}(\vec{x}^j) = -\sum_k D(\vec{x}^j - \vec{x}_k) \frac{m}{\rho_s^*(\vec{x}_k)} \vec{\nabla} p(\vec{x}_k). \quad (1.150)$$

La masse volumique locale ρ_s^* et la vitesse de la phase solide \vec{u}_s s'écrivent, avec ces notations :

$$\rho_s^*(\vec{x}) = \frac{1}{\Delta V} \sum_j D(\vec{x} - \vec{x}^j) m, \quad (1.151)$$

$$\rho_s^*(\vec{x}) \vec{u}_s(\vec{x}) = \frac{1}{\Delta V} \sum_j D(\vec{x} - \vec{x}^j) m \vec{v}^j. \quad (1.152)$$

La porosité de la matrice granulaire s'écrit alors :

$$\phi = 1 - \frac{\rho_s^*}{\rho_s}, \quad (1.153)$$

où ρ_s est la masse volumique du matériau constitutif des grains.

Cette méthode se rapproche des méthodes de type CFD-DEM : fluide non-résolu, puisqu'elle traite aussi le fluide à l'échelle mésoscopique. Elle partage ses avantages : les éléments utilisés étant grands devant les particules, elle est adaptée aux systèmes de taille conséquente et ses inconvénients : l'écoulement de la phase fluide obtenu est peu précis. Elle possède cependant l'avantage d'être plus simple à mettre en œuvre, puisqu'elle ne nécessite pas d'utiliser un code de CFD. De plus, c'est la seule méthode conçue spécifiquement pour traiter des gaz.

1.4.5 Méthodes Euler-Euler

Les méthodes type Euler-Lagrange sont adaptées aux écoulements mettant en jeu un nombre raisonnable de particules (typiquement moins de 10^4). Les systèmes industriels comportent un nombre beaucoup plus élevé de particules et nécessitent une modélisation plus macroscopique de la phase solide. La phase solide et la phase fluide sont alors représentées par un continuum interpénétré et gouvernées par des équations de Navier-Stokes généralisées [37, 59]. La phase fluide obéit aux équations de Navier-Stokes moyennées :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi\rho_f \vec{u}_f) = 0, \quad (1.154)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho_f \vec{u}_f) + \vec{\nabla} \cdot (\phi\rho_f \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\vec{\nabla} p_f + \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{\tau}_f) + \phi\rho_f \vec{g} + \vec{f}_{s \rightarrow f}, \quad (1.155)$$

où l'indice p_f est la pression de la phase fluide.

La densité volumique de force $\vec{f}_{s \rightarrow f}$ s'écrit dans ce cas (version moyenne de 1.143) :

$$\vec{f}_{s \rightarrow f} = -c\vec{\nabla} p_f + \beta(\vec{u}_f - \vec{u}_s), \quad (1.156)$$

où $c = 1 - \phi$ est la fraction volumique de solide, ou la compacité de la phase solide, et on rappelle que β est un coefficient de frottement visqueux macroscopique. Le terme faisant intervenir la pression du fluide provient d'une prise de moyenne sur la phase solide et le terme de traînée est défini par analogie avec l'expression de la force de traînée pour une particule.

Les équations régissant l'évolution de la phase solide s'écrivent de façon analogue à celles régissant la phase fluide :

$$\frac{\partial}{\partial t}(c\rho_s) + \vec{\nabla} \cdot (c\rho_s \vec{u}_s) = 0, \quad (1.157)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(c\rho_s \vec{u}_s) + \vec{\nabla} \cdot (c\rho_s \vec{u}_s \otimes \vec{u}_s) = -\vec{\nabla} p_s + \vec{\nabla} \cdot (c \vec{\tau}_s) + c\rho_s \vec{g} - \vec{f}_{s \rightarrow f}, \quad (1.158)$$

où on rappelle que ρ_s est la masse volumique du matériau constitutif des grains, \vec{u}_s la vitesse d'écoulement (vitesse eulérienne de la phase solide), p_s la pression hydrostatique et $\vec{\tau}_s$ le tenseur des contraintes visqueuses de la phase solide.

On peut choisir de garder la forme générale du tenseur des contraintes visqueuses d'un fluide newtonien (1.107) pour écrire le tenseur $\vec{\tau}_s$. On ne peut alors représenter les interactions entre particules qu'indirectement, par l'intermédiaire de la pression effective p_s et des coefficients de viscosité effectifs λ_s et μ_s . Dans les premiers modèles hydrodynamiques [6, 5, 106, 58], la viscosité est définie par une constante empirique et l'expression de la pression de la phase solide en fonction de la compacité provient d'expériences. Le modèle obtenu est simple mais peu représentatif de la rhéologie des milieux granulaires. Les modèles dérivant de la théorie cinétique des écoulements granulaires [55, 66, 25] expriment les coefficients de viscosité et la pression en

fonction de la compacité c , du coefficient de restitution normal e_n et de la température granulaire $T_g = \langle \vec{C} \cdot \vec{C} \rangle / 3$ (cas tridimensionnel), où $\vec{C} = \vec{u}_s - \langle \vec{u}_s \rangle$ représente les fluctuations des vitesses des particules. L'évolution de la température granulaire est alors donnée par l'équation de conservation de l'énergie (cas tridimensionnel) :

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (c \rho_s T_g) \right] = -p_s \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s + c \vec{\tau}_s : \vec{\nabla} \vec{u}_s - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{q}_s) - 3\beta\theta - \gamma_c, \quad (1.159)$$

où \vec{q}_s est le flux d'énergie cinétique et γ_c est la dissipation d'énergie cinétique due aux collisions inélastiques entre les particules.

1.4.6 Discussion des méthodes

Les méthodes traitant la phase fluide à l'échelle microscopique et la phase solide à l'échelle mésoscopique (fluide micro et particules méso) permettent d'obtenir le comportement macroscopique du mélange fluide-grains. La méthode SPH-DEM pour les fluides incompressibles permet ainsi de retrouver, à l'échelle mésoscopique, la solution analytique de Navier-Stokes pour les écoulements de Poiseuille et de Couette *i.e.* pour des écoulements à faible nombre de Reynolds [77]. Une comparaison avec une méthode aux éléments finis a permis de montrer qu'elle fournissait des résultats satisfaisants dans le cas d'un écoulement autour d'un cylindre, dans une boîte périodique [77]. La méthode des domaines fictifs (CFD-DEM : fluide résolu) a permis à Komiwes *et al.* [56] de retrouver des lois classiques : la loi de Richardson-Zaki [95] et la loi de perte de charge d'Ergun [30]. Les méthodes fluide micro et particules méso permettent aussi de fournir des fermetures pour les méthodes traitant la phase fluide à l'échelle mésoscopique et la phase solide à l'échelle microscopique (fluide méso et particules micro). Les méthodes LBM-DEM ont été utilisées par Hill *et al.* [45] et Beetstra *et al.* [10] pour dériver la forme du coefficient de traînée, en fonction du nombre de Reynolds et de la compacité. Les exemples précédents d'utilisation de ces méthodes fluide micro et particules méso considèrent des domaines fluides de petite taille et des conditions périodiques, afin de garantir la finesse de la discrétisation du domaine fluide nécessaire pour assurer leur validité (plusieurs éléments dans une particule). Ces méthodes ne sont donc adaptées qu'aux cas où on considère un faible nombre de particules, ce qui n'est pas l'objectif envisagé ici.

Les méthodes traitant la phase fluide à l'échelle mésoscopique et la phase solide à l'échelle microscopique (fluide méso et particules micro) permettent aussi de retrouver qualitativement des comportements macroscopiques. La méthode FD-DEM, développée pour modéliser des écoulements faisant intervenir des gaz parfaits, a permis de retrouver des résultats en accord avec l'expérience dans le cas de l'effet Boycott [32] et dans le cas de l'instabilité de Rayleigh-Taylor granulaire [110]. Ces méthodes se basent sur un calcul par interpolation, sur la phase solide, de quantités moyennes comme la porosité. La discrétisation du domaine fluide est donc bien plus grossière que dans le cas des méthodes fluide micro et particules méso (plusieurs particules dans un élément de discrétisation) et elles peuvent donc traiter un plus grand nombre de particules. Néanmoins, les équations moyennées sous-jacentes font dépendre le résultat de la

condition de fermeture choisie. Bokkers *et al.* [13] ont montré que des simulations de fluidisation réalisées avec une méthode CFD-DEM (fluide non-résolu) donnent des résultats en accord avec l'expérience, mais qu'ils dépendent de la loi choisie pour le coefficient de traînée.

Les méthodes traitant les phases fluide et solide à l'échelle macroscopique (fluide macro et particules macro) utilisent un modèle pour la phase solide qui a perdu la notion de particule. Il est donc valide seulement si un élément peut contenir, dans le cas de la compacité maximale, un nombre suffisamment représentatif de particules. Ces méthodes peuvent ainsi traiter des problèmes d'échelle industrielle. A cette échelle on doit manipuler des quantités moyennées qui intègrent la rhéologie d'un milieu dans un modèle continu et sont donc très difficiles à évaluer. Goldschmidt et Kuipers [41] ont montré qu'une méthode Euler-Euler fournit des résultats réalistes vis-à-vis de l'expérience pour des lits fluidisés, mais au prix d'un ajustement de paramètres, comme le coefficient de restitution.

On peut en conclure que le choix d'une méthode pour simuler des mélanges fluide-grains est conditionné par l'usage que l'on souhaite en faire. Les méthodes fluide micro et particules méso sont à réserver aux petites échelles, notamment pour la recherche de fermetures pour les modèles travaillant à des échelles plus élevées. Pour des systèmes de grande taille le choix entre une méthode fluide méso et particules micro et fluide macro et particules macro dépend du niveau de détail que l'on souhaite pouvoir conserver, malgré les approximations du modèle. Ainsi, l'utilisation d'une méthode fluide macro et particules macro n'a de sens que dans le cadre d'un problème industriel où on souhaite seulement obtenir une réponse macroscopique moyenne. Pour des systèmes de taille intermédiaire les méthodes fluide méso et particules micro semblent les plus adaptées. Ce propos doit toutefois être modéré par des considérations techniques, puisqu'il paraît difficile de coupler deux méthodes numériques aux philosophies différentes, sans coupler deux codes de calcul.

1.5 Conclusion

Les études réalisées dans le cadre de cette thèse visent à développer des modèles numériques permettant d'évaluer la stabilité d'un empilement de fragments de combustible. Les développements réalisés doivent de plus permettre de prendre en compte la présence des gaz de fission. On modélise les fragments par des corps rigides, et on se place à une échelle au-dessus du temps de réponse élastique du matériau, car on fait l'hypothèse que les fragments ne peuvent plus être divisés. Les fragments constituent alors un matériau granulaire, dont on a présenté quelques caractéristiques rhéologiques. La description des avalanches sur un plan incliné fournit des pistes pour l'analyse de la stabilité. En raisonnant par analogie, on peut supposer l'existence d'un régime de blocage, dans lequel l'écoulement est stochastique. On doit alors chercher à le caractériser avec les paramètres du système et avoir recours à des outils statistiques pour l'analyse (*cf.* deuxième chapitre).

Conserver une représentation discrète des fragments est un point clef de cette analyse. On doit donc utiliser une méthode aux éléments discrets pour simuler la phase solide. La méthode

classique de Cundall semble inadaptée dans notre cas, dans la mesure où elle suppose de travailler avec une échelle de temps suffisamment petite pour rendre compte de la propagation des ondes élastiques dans le matériau. La méthode NSCD, utilisée avec la loi de quasi-choc inélastique, permet de choisir l'échelle de temps, et donc de travailler à une échelle au-dessus de l'échelle des ondes. Cette dernière est donc retenue pour la suite. Pour cela on dispose de la plate-forme logicielle LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact écrit en Fortran 90), développée initialement au LMGC par F. Dubois et M. Jean [27, 64], qui implémente cette méthode et propose cette loi.

De nombreuses méthodes numériques permettant de simuler des mélanges fluide-particules ont été développées depuis les années 1990. Elles peuvent être classées en fonction des échelles où sont représentées la phase fluide et la phase solide. Les méthodes traitant le fluide à l'échelle microscopique et les particules à l'échelle mésoscopique modélisent finement le fluide mais ne peuvent gérer qu'un faible nombre de particules. Celles traitant les phases fluide et solide à l'échelle macroscopique, considèrent cette dernière comme un milieu continu. Elles ne peuvent donc pas réellement rendre compte des caractéristiques rhéologiques des milieux granulaires. La classe de méthodes la plus adaptée pour ce travail est la catégorie des méthodes traitant le fluide à l'échelle mésoscopique et les particules à l'échelle microscopique. En effet, au prix d'une représentation plus grossière du fluide, elles peuvent traiter un nombre raisonnable de particules tout en conservant les caractéristiques d'un milieu divisé. Au sein de cette classe, une seule méthode est conçue pour les gaz, celle développée par McNamara *et al.* De plus, elle possède aussi l'avantage d'être techniquement plus abordable : le calcul de l'écoulement du fluide requiert la résolution d'une unique équation d'advection-diffusion et ne nécessite pas de recourir à un logiciel de CFD. Elle n'est toutefois pas pleinement satisfaisante pour cette étude. En effet, elle est écrite pour des échantillons monodisperses et le schéma aux différences finies utilisé pour résoudre l'écoulement du fluide suppose que le domaine est cubique (dans le cas tridimensionnel, ou rectangulaire dans le cas bidimensionnel). On se propose ainsi dans la suite (*cf.* troisième chapitre) de développer une nouvelle méthode s'inspirant de la philosophie de celle-ci, mais applicable aux échantillons polydisperses et aux domaines de géométrie quelconque. Son implémentation se basera sur un couplage avec la méthode NSCD, via la plate-forme LMGC90.

Stabilité d'une méso-structure

Sommaire

2.1	Introduction	54
2.2	Description du système	55
2.3	Analyse des débits	57
2.4	Blocage et statistique d'avalanche	63
2.5	Application au cas de la relocalisation	67
2.5.1	Hypothèses géométriques	67
2.5.2	Définition du taux de relocalisation	69
2.5.3	Recherche de bornes et d'estimations pour le taux de relocalisation	70
2.5.4	Evolution de la taille des fragments de combustible en fonction du taux de combustion	71
2.5.5	Estimation de l'évolution du taux de relocalisation avec le taux de combustion	73
2.5.6	Discussion	75
2.6	Conclusion	75

2.1 Introduction

On s'intéresse dans ce chapitre à la stabilité de l'empilement de fragments de combustible *sec*, *i.e.* en l'absence de gaz de fission.

Le problème physique réel est celui d'un empilement compact tridimensionnel de fragments polyédriques au sein d'un tube cylindrique. Selon le temps de séjour en réacteur la distribution en taille de ces fragments peut avoir une évolution spatiale : typiquement, de plus gros fragments au voisinage de l'axe du tube et de plus petits fragments en périphérie. Certaines constatations expérimentales révèlent par ailleurs que l'interaction pastille-gaine en fonctionnement normal peut conduire par des mécanismes de type physico-chimique à une adhésion des plus petits fragments périphériques à la paroi interne du tube. La situation est alors celle d'un empilement dans un tube à parois rugueuses (*cf.* [75] et références citées).

L'étude de la stabilité d'un tel empilement consiste ici à étudier son écoulement potentiel sous gravité. La zone par laquelle cet empilement s'écoule est alors une section circulaire transversale du tube. En plus de la rugosité interne de cette section, des fragments de plus grande taille peuvent rester adhérents au tube diminuant ainsi cette section efficace d'écoulement.

La modélisation qui est faite dans ce chapitre de cette situation physique complexe consiste en quelques éléments de simplification géométrique suivants (*cf.* FIG. 2.1) :

- on se limite à une situation bidimensionnelle dans un plan axial (plan r-z),
- les fragments sont modélisés en première approximation par des disques dont la polydispersion moyenne sera précisée,
- la rugosité des parois est représentée par une collection de disques possédant une taille unique quel que soit l'altitude (position z) considérée,
- la section efficace d'écoulement est modélisée par une ouverture centrale sur une paroi de fond représentée par des disques similaires à ceux des parois rugueuses.

Comme on s'intéresse aux grands réarrangements et déplacements, cette étude peut se faire avec des grains rigides en utilisant la méthode NSCD avec la loi de quasi-choc inélastique (*cf.* section 1.3.4).

Le problème modèle que l'on considère est analogue à la géométrie de silo. Zuriguel *et al.* ont réalisé une étude expérimentale approfondie des écoulements granulaires dans cette géométrie [118, 119]. Elle indique clairement que pour une ouverture étroite par rapport aux diamètres des particules (typiquement en dessous de cinq diamètres de particule), l'écoulement s'arrête en temps fini et qu'il s'écoule un nombre important de particules suivant une distribution exponentielle. On peut donc faire une analogie étroite entre cette observation et les avalanches sur un plan incliné (*cf.* section 1.2.5).

Lors d'un accident, la relocalisation du combustible dans le ballonnement fait suite à un écoulement de fragments et la quantité relocalisée dépend du nombre de grains écoulés avant le blocage de l'écoulement par une arche. On a donc étudié les deux phases du processus : l'écoulement et le blocage pour différentes tailles de fragment entravant l'écoulement, *i.e.* différentes tailles d'orifice au fond du silo, pour un grand nombre de simulations. Afin d'obtenir plusieurs

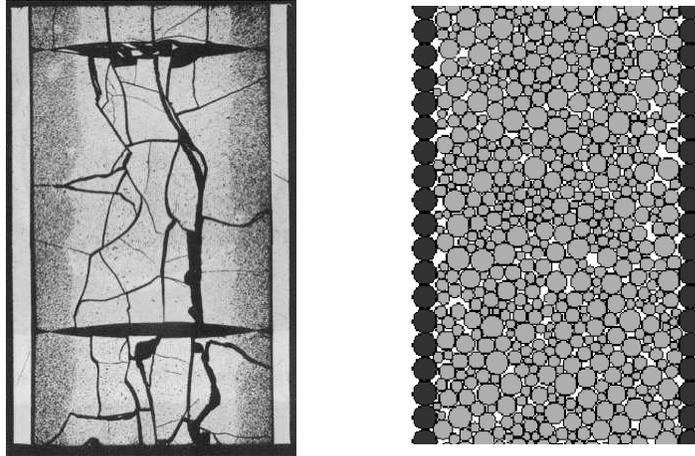


FIG. 2.1 – Exemple de situation réelle d’empilement de fragments de combustible, d’après [21] (gauche) et représentation du système discret par des disques, dont la taille relative est un paramètre d’analyse (droite).

séquences écoulement-blocage à partir d’une même configuration initiale, un protocole de déblocage simple a été mis en place.

On présente dans une première section le système étudié et le protocole mis en place pour casser les arches. La deuxième section est consacrée à l’étude de la phase d’écoulement, en termes de débit. La troisième section est dédiée à l’étude du blocage, en termes de durées de vie d’écoulement et de probabilité de blocage. La dernière section présente l’application des résultats obtenus au problème de la relocalisation.

2.2 Description du système

On considère un silo 2D de forme rectangulaire de largeur L et d’ouverture variable de largeur d_o à la base. Les parois sont faites de collections de disques rigides de diamètre d_w (cf. FIG. 2.2). Les échantillons granulaires sont préparés en remplissant le silo par le haut sous l’action de la gravité d’intensité g , et sont obtenus à l’aide du programme de dépôt géométrique 2D développé par C. Voivret [112]. Afin d’éviter l’effet de cristallisation 2D, les échantillons sont polydisperses et les diamètres des particules sont tirés dans l’intervalle $[d_{min}, d_{max}]$, où $d_{max} = d_w = 3d_{min}$, suivant une distribution uniforme par fraction volumique. Voivret *et al.* ont montré que cette distribution conduit à l’arrangement le plus compact des particules avec une compacité $c \simeq 0,85$ [112, 113]. La compacité baisse pendant la décharge du silo vers des valeurs plus faibles dépendantes de l’ouverture (voir ci-dessous). Les simulations ont été réalisées avec $L \simeq 10d_{max}$. Le coefficient de friction entre particules et entre les particules et les parois est $\mu_C = 0,5$. Les parois rugueuses et le coefficient de frottement élevé ont été prévus pour augmenter la probabilité de blocage et aussi parce qu’on représente par des disques des polyèdres rugueux. Les particules tombant par le trou sont réintroduites dans l’échantillon

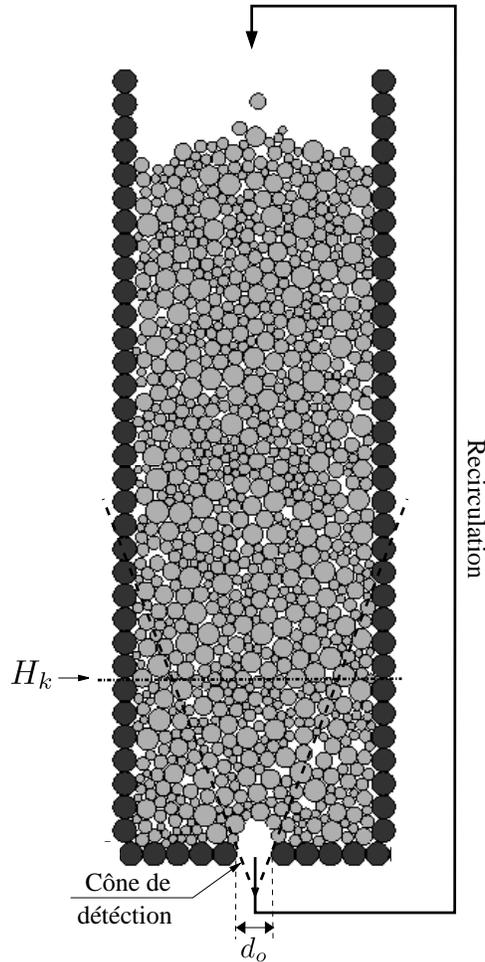


FIG. 2.2 – Schéma du dispositif. La zone de détection et la procédure de recirculation sont représentées.

par le haut avec une vitesse nulle. Le nombre total de particules reste donc constant durant la décharge. On a utilisé environ 10^3 particules, ce qui correspond à une hauteur de remplissage de $H \simeq 3L$.

D'un point de vue numérique, la détection d'une arche stable est un problème non trivial. En effet, une arche peut être considérée stable seulement quand toutes les particules sont au repos. Une arche métastable située juste au dessus de l'orifice peut être déstabilisée à la suite du mouvement d'autres particules. C'est pourquoi on utilise comme critère de détection la moyenne quadratique normalisée des vitesses des particules dans un volume de contrôle

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{g\langle d \rangle}} \sqrt{\sum_j \|\vec{v}^j\|^2}, \quad (2.1)$$

où $\langle d \rangle$ est le diamètre moyen des particules et la somme est prise sur toutes les particules contenues dans le volume de contrôle : le caractère non localisé d'une arche est alors interprété à l'aide du second moment de la vitesse. Le volume de contrôle comporte toutes les particules

dont la coordonnée verticale est en dessous d'une hauteur H_k donnée. On considère qu'une arche stable s'est formée quand v_m est suffisamment petit (typiquement $< 10^{-4}$). La plateforme LMGC90 fournit une bibliothèque de fonctions permettant de réaliser un calcul aux éléments discrets. Le déroulement d'une simulation est décrit dans un fichier de commandes, écrit dans un langage dépendant de l'interpréteur utilisé. Ces simulations ont été réalisées à l'aide du superviseur Python de LMGC90, nommé ChiPy (cf. section 3.3.5.3). L'implémentation du protocole de recirculation des grains et des méthodes de détection/destruction d'une arche ont donné lieu à l'écriture, en Python, d'une bibliothèque de fonctions dédiées.

Afin de redéclencher l'écoulement, on déstabilise l'arche obstruant l'orifice en enlevant la particule de plus faible altitude dans un cône de détection visible sur la FIG. 2.2. La particule retirée de l'arche est remise dans le silo par le haut et traitée comme une "particule passante" (particule quittant le silo). Neuf séries de simulations avec différentes valeurs de l'ouverture d_o ont été réalisées. On note que, seuls les rapports $R = d_o/\langle d \rangle$ (à ne pas confondre avec la norme de la réaction de contact \vec{R} , notée $\|\vec{R}\|$) et $L/\langle d \rangle$ sont pertinents du fait de la rigidité des particules. On fait varier R tout en gardant la même distribution de tailles de particule et la même largeur L pour le silo. Il est important de noter ici que des statistiques suffisantes des événements de blocage requièrent de longues simulations. Par exemple, on a obtenu la meilleure statistique dans le cas du rapport le plus faible ($R = 2,75$), le temps physique total requis pour avoir 10^3 événements est d'environ 3×10^3 s.

L'écoulement dans un silo implique trois quantités naturelles, à savoir la taille moyenne des particules $\langle d \rangle$, l'accélération de pesanteur g et la compacité c . Dans la suite, on normalise toutes les longueurs et tous les déplacements par $\langle d \rangle$, et tous les temps par $\sqrt{\langle d \rangle/g}$. Par conséquent, les vitesses seront mises à l'échelle par $\sqrt{g\langle d \rangle}$ et les débits (nombre de particules passant par unité de temps) par $\sqrt{g/\langle d \rangle}$. De la même façon, les forces sont normalisées par mg , où m est la masse d'une particule de taille $\langle d \rangle$ (dans le cas bidimensionnel et pour des disques : $m = \rho_s \pi \langle d \rangle^2 / 4$ où ρ_s est la masse volumique des particules).

2.3 Analyse des débits

Le comportement temporel de la décharge d'un silo dans le régime de blocage, *i.e.* quand l'écoulement s'arrête en temps fini, comporte des périodes d'écoulement consécutives et des arrêts. L'écoulement s'arrête naturellement à la suite de la formation d'une arche mais est redéclenché artificiellement par la déstabilisation de l'arche. Chaque période d'écoulement doit donc être considérée comme une expérience indépendante. La durée d'une période de blocage dépend du protocole de détection (cf. section 2.2) et de sa précision. Ces périodes actives et passives peuvent être distinguées clairement en considérant les séries temporelles des particules passant par l'orifice, les vitesses des particules et les forces de contact. Par analogie avec les écoulements granulaires sur plan incliné, on désigne chaque période d'écoulement consécutive à un blocage par une *avalanche*.

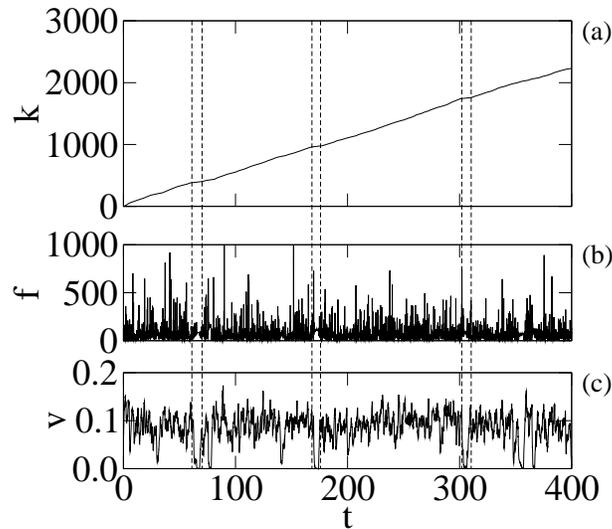


FIG. 2.3 – Une partie des séries temporelles du nombre cumulé de particules s’écoulant hors du silo k (a), la force exercée par les particules sur le fond du silo (b) et la moyenne quadratique des vitesses des particules dans la zone fluidisée (c). Trois intervalles de temps différents correspondant à des blocages sont indiqués par des lignes pointillées.

La FIG. 2.3(a) présente la série temporelle du nombre cumulé $k(t)$ de particules s’écoulant hors du silo en fonction du temps t pour $R = 2,75$. La fonction réciproque $t(k)$ est l’instant où la k -ème particule est passée par l’orifice. Les séries de la moyenne quadratique des vitesses des particules dans la zone de détection $v_m(t)$ et de la force totale exercée par les particules sur le fond du silo $f(t)$ correspondantes sont présentées respectivement par les figures FIG. 2.3(c) et FIG. 2.3(b). Les périodes d’écoulement sont caractérisées par la pente $Q = \Delta k / \Delta t > 0$ (débit non nul). Ces périodes d’écoulement sont interrompues par des plateaux qui reflètent le blocage avec $Q \simeq 0$ (indiqués sur la FIG. 2.3 par des lignes pointillées verticales). La valeur quasi-constante de Q est remarquable puisque les particules s’écoulent par un orifice étroit et on pourrait plutôt s’attendre à un débit irrégulier. D’un autre côté, le nombre total de particules passantes N , ou de façon équivalente, la durée de vie de l’écoulement $T_e = N/Q$, est une quantité hautement fluctuante qui nécessite d’être décrite par sa distribution. L’écoulement dans le régime de blocage doit donc être caractérisé par (1) le débit Q quand l’écoulement a lieu (cette section) et (2) les durées de vie T_e reflétant la probabilité de blocage (section suivante).

La moyenne quadratique de la vitesse fluctue durant l’écoulement et les transitions de l’écoulement vers le blocage et, inversement, du blocage vers l’écoulement sont généralement bien plus courtes que la durée de vie de l’écoulement. L’arrêt de l’écoulement est initié au niveau de l’orifice et se propage sous la forme d’une onde cinématique vers le haut de la colonne granulaire. Mais, comme on peut le voir sur la FIG. 2.3(c), la moyenne quadratique de la vitesse ne baisse pas toujours vers zéro de façon monotone. L’écoulement est très souvent réactif alors qu’une arche est en train de se former et que la vitesse décroît. Cependant, ces *arches dynamiques* ont apparemment un faible impact sur le débit, qui est remarquablement constant durant une avalanche.

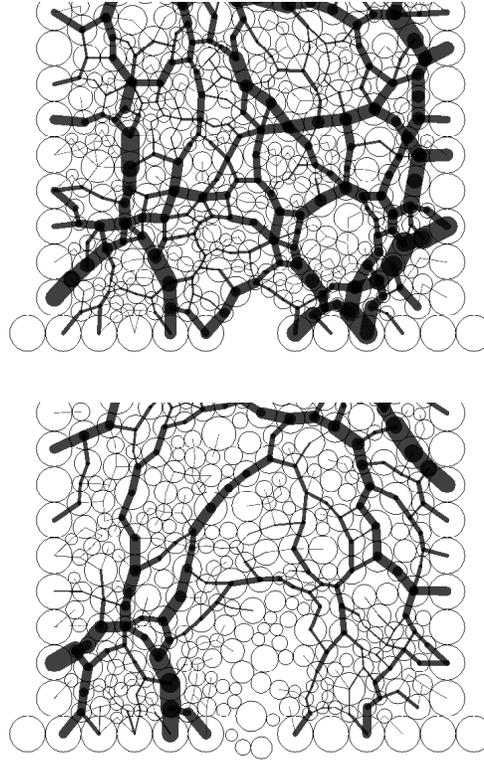


FIG. 2.4 – Instantanés du réseau de force près du fond pendant un blocage (haut) et pendant l’écoulement (bas). L’épaisseur d’une ligne est proportionnelle à la force normale.

De la même façon, la série temporelle des forces, présentée sur la FIG. 2.3(b), montre que la *force dynamique* agissant sur le fond du silo pendant l’écoulement est une quantité fluctuante, généralement bien au-dessus de la force statique pendant un blocage et due au poids des particules. De plus, le niveau de la force statique pendant le blocage varie légèrement pour des blocages consécutifs du fait de l’effet Janssen. La FIG. 2.4 montre deux exemples du réseau de force, l’un dans un état bloqué et l’autre pendant l’écoulement. On note que les structures ressemblant à des arches sont présentes autour du trou aussi bien pendant l’écoulement que lorsqu’une arche est formée. Cela signifie que la pression moyenne ne s’annule pas à proximité de l’orifice et que toutes les particules ne décrivent pas une trajectoire balistique.

Le débit moyen Q en fonction de l’ouverture R est représenté sur la FIG. 2.5. Les barres d’erreur sont les écarts-types calculés pour les fluctuations autour de la moyenne. Les points sont bien approchés par la loi de Beverloo en 2D [11] :

$$Q = C(R - R_e)^{3/2}, \quad (2.2)$$

avec $C \simeq 1,47$ et $R_e \simeq 1$.

Afin de comprendre la pertinence de cette loi et d’évaluer mécaniquement le coefficient C , les hypothèses sous-jacentes à (2.2) sont ici discutées. Le débit exprimé en nombre de particules

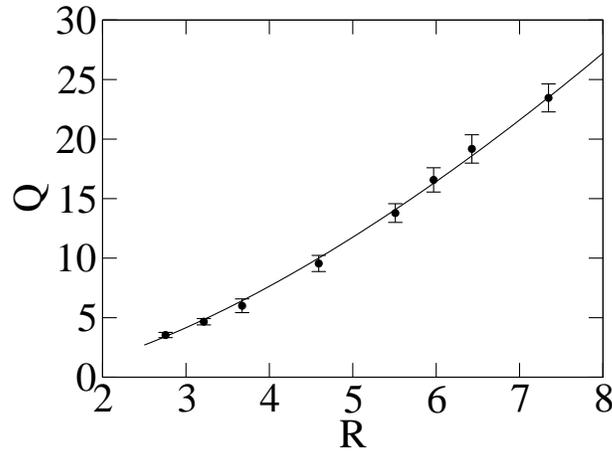


FIG. 2.5 – Le débit en fonction de l'ouverture normalisée. Les barres d'erreur représentent l'écart-type.

par unité de temps est donné par

$$Q = n_p v_{out} (R - R_e), \quad (2.3)$$

où n_p est le nombre de particules par unité de volume normalisé dans la zone fluidisée au-dessus du trou (densité numérique), v_{out} est la vitesse normalisée (composante verticale) des particules quittant le silo (au-dessous de l'orifice) et $R - R_e$ représente la section transversale (ici en 2D, cf. FIG. 2.9). La loi de Beverloo est basée sur l'argument que dans la zone fluidisée les particules tombent balistiquement. On suppose que la hauteur caractéristique de cette zone est de l'ordre de la section transversale effective et s'écrit $s(R - R_e)$, où s est le rapport d'aspect de la zone fluidisée. On suppose également que les particules tombent sans vitesse initiale (la moyenne quadratique de la vitesse est plus faible que 10^{-4} dans l'état bloqué). La composante verticale de la vitesse des particules quittant le silo s'écrit alors $\sqrt{2gs(R - R_e)\langle d \rangle}$ et sa valeur normalisée est donc

$$v_{out} = \sqrt{2s(R - R_e)}. \quad (2.4)$$

La combinaison des équations (2.4) et (2.3) mène à la loi (2.2) en supposant que n_p est indépendant de R .

La densité de probabilité (pdf) des composantes verticales des vitesses des particules v_{out} est présentée sur la FIG. 2.6 pour deux valeurs différentes de l'ouverture. Ces vitesses présentent deux modes centrés respectivement sur une faible vitesse et une vitesse plus élevée. Le premier mode semble assez diffus alors que le second est assez bien défini avec une forme presque gaussienne. La présence du premier mode suggère que toutes les particules ne décrivent pas une trajectoire balistique dans la zone fluidisée. La vitesse au pic du mode prédominant et la vitesse moyenne sont tracées en fonction de R sur la FIG. 2.7. Les barres d'erreur pour la vitesse au pic représentent la largeur à mi-hauteur du mode. Les deux séries de points sont en accord avec l'hypothèse d'une trajectoire balistique. Pour les vitesses au pic, on a

$$v_{out} = C_v \sqrt{s(R - R_e)}, \quad (2.5)$$

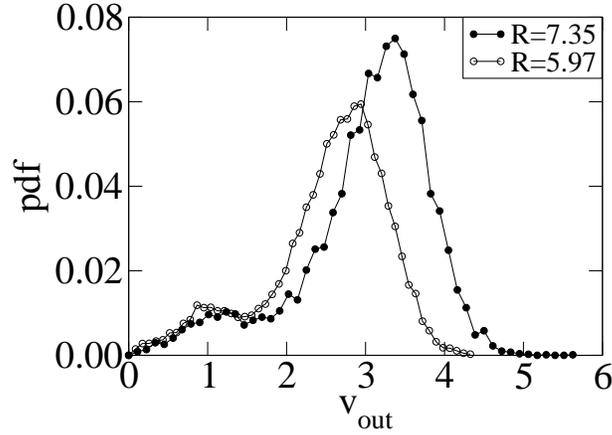


FIG. 2.6 – Densité de probabilité de la composante verticale des vitesses normalisées des particules au-dessous de l’orifice pour deux valeurs de l’ouverture normalisée R .

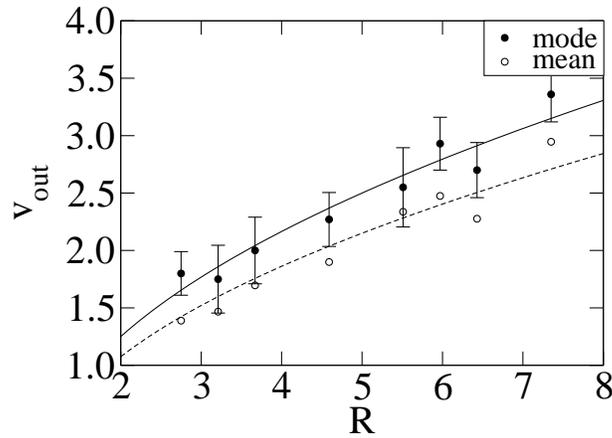


FIG. 2.7 – Vitesse au pic pour le mode prédominant et vitesse moyenne en fonction de l’ouverture normalisée R . Les barres d’erreur représentent la largeur à mi-hauteur du mode balistique. La ligne continue représente une fonction obtenue par (2.5) qui approche les points pour le mode. La ligne en pointillés représente une fonction obtenue par la même équation, avec une valeur du préfacteur plus faible qui approche les points pour la vitesse moyenne, *i.e.* incluant les événements non balistiques.

où $C_v \sqrt{s} \simeq 1,25$.

La FIG. 2.8 montre la densité numérique des particules n_p avec son écart-type dans la zone fluidisée. On peut approcher les points par une exponentielle croissante, comme suggéré par Mankoc *et al.* [67]. On a

$$n_p = C_n \{1 - A_1 \exp(-A_2(R - R_e))\}, \quad (2.6)$$

où $C_n \simeq 0,87$, $A_1 \simeq 0,5$ et $A_2 \simeq 0,47$. La densité numérique paraît presque constante au-delà de $R = 4$, en incluant le régime d’écoulement continu, *i.e.* pour les deux points correspondant aux R les plus élevés. D’un autre côté, la grande incertitude observée sur la densité numérique dans la gamme des petites ouvertures (de l’ordre de la taille d’une particule) est la conséquence

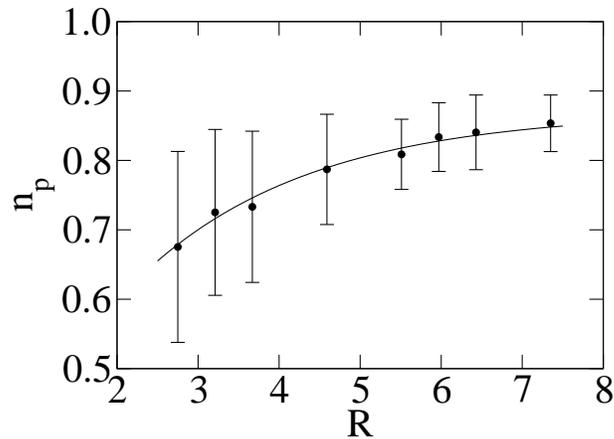


FIG. 2.8 – Densité numérique des particules en fonction de l’ouverture normalisée dans la zone fluidisée au-dessus de l’orifice. Les barres d’erreur représentent l’écart-type.

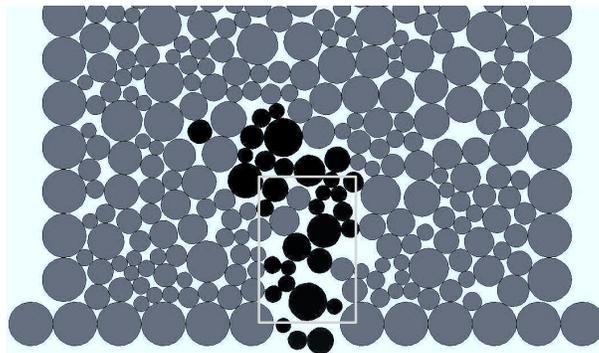


FIG. 2.9 – Un instantané des particules dans la zone fluidisée. Les particules dont la composante verticale de la vitesse normalisée est supérieure à 0,38 sont représentées en noir. La ligne continue délimite une représentation de forme rectangulaire de la zone.

directe des effets de taille finie. Ce phénomène est renforcé par la polydispersion de l’échantillon étudié. On ne peut pas se fier aux mesures de n_p dans cette limite et il semble plus raisonnable de négliger l’accroissement exponentiel (de l’ordre de 20%) dans la limite de notre précision statistique. On pose donc simplement $n_p = C_n \simeq 0,87$.

En injectant cette valeur de n_p et l’expression de v_{out} donnée par (2.5) dans (2.3), on obtient

$$Q = C_v C_n \sqrt{s} (R - R_e)^{3/2}, \quad (2.7)$$

qui donne $C = \sqrt{s} C_v C_n$ selon (2.2). Pour $s = 1$ on obtient $C = 1,07$, qui est du bon ordre de grandeur mais légèrement au-dessous de la valeur 1,47 utilisée pour obtenir à partir de (2.2) la fonction de R approchant les débits représentée par une ligne continue sur la FIG. 2.5. On retrouve la bonne valeur de C seulement en posant $s \simeq 1,7$. Ce rapport d’aspect est en accord avec l’observation de la zone fluidisée, dont un instantané est présenté sur la FIG. 2.9.

L’analyse des écoulements entre deux blocages successifs, pour différentes valeurs de l’ou-

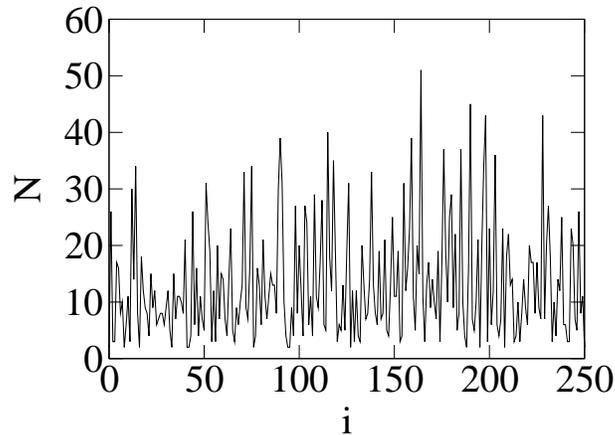


FIG. 2.10 – Une série temporelle des tailles d’avalanche pour $R = 2,75$, en fonction du pas i .

verture a permis d’étudier les débits. Les résultats obtenus sont en accord avec la loi de Beverloo, pour toutes les ouvertures considérées. On a observé que la distribution des vitesses des particules à la sortie du silo est étendue. On propose donc d’expliquer la forme de la loi de Beverloo en se basant sur le mode prépondérant de cette distribution et pas sur sa moyenne, comme il est d’usage dans la théorie classique.

2.4 Blocage et statistique d’avalanche

Dans cette section, on étudie la distribution des tailles d’avalanche. Le nombre N de particules s’écoulant entre deux blocages est la taille d’avalanche. Le débit est quasiment constant pour une ouverture R donnée, les résultats peuvent donc être exprimés de façon équivalente en termes de durées de vie d’écoulement $T_e = N/Q$.

La FIG. 2.10 montre une série temporelle de N pour $R = 2,75$. N fluctue considérablement au cours du temps. Le diagramme de corrélation entre deux avalanches consécutives est présenté sur la FIG. 2.11. On n’observe aucune corrélation apparente entre les tailles de deux avalanches successives. Cette absence de mémoire indique que le système (l’ensemble des grains dans le silo et dans la zone fluidisée) est dans un état auto-organisé. La densité numérique de particules dans cet état est constante en moyenne et presque indépendante de l’ouverture (*cf.* section 2.3).

La FIG. 2.12 montre la densité de probabilité P de la taille d’avalanche pour deux valeurs de R . Les pdf sont bien approchées par une exponentielle dans la mesure de la précision statistique disponible. Pour les avalanches de grande taille, cette forme exponentielle est en accord avec les expériences de Zuriguel *et al.*, ce qui n’est pas le cas pour les avalanches de petite taille, malgré la précision plus importante dans cette gamme [118]. En fait, on n’observe quasiment aucune avalanche d’une ou deux particules, et les avalanches les plus nombreuses entraînent trois ou quatre particules, comme on peut le voir sur la FIG. 2.12. Cette différence avec l’expérience peut être attribuée au protocole de suppression de l’arche. Retirer une particule de l’arche

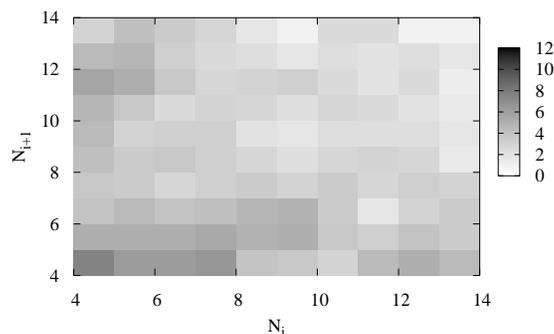


FIG. 2.11 – Diagramme d'auto-corrélation entre deux avalanches consécutives.

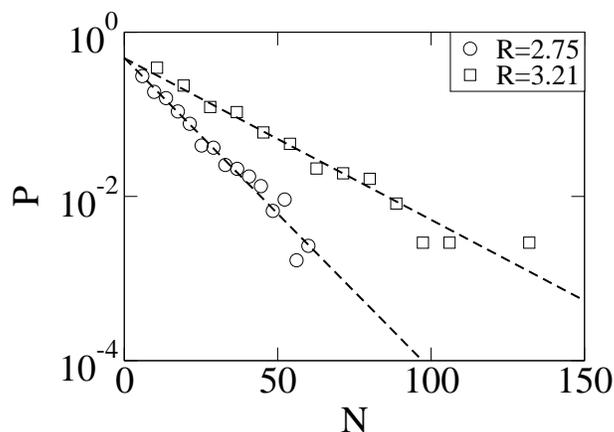


FIG. 2.12 – Densité de probabilité de la taille d'avalanche N pour deux ouvertures R . Des fonctions exponentielles approchant les points sont représentées par des lignes pointillées (échelle semi-logarithmique).

affecte seulement le voisinage de la particule alors que le jet d'air utilisé dans les expériences déstabilise l'arche entière. En effet, la pression de l'air semble affecter les statistiques des avalanches de petite taille obtenues dans les expériences [118]. Quand une arche est détruite, toutes les particules formant l'arche peuvent tomber sans générer un nouveau blocage si la pression de l'air est élevée.

Les pdf pour différentes ouvertures R se superposent sur une même exponentielle obtenue en normalisant la taille d'avalanche N par sa moyenne $\langle N \rangle$, comme on peut le voir sur la FIG. 2.13. Cela signifie que seul le nombre de particules entraînés dans une avalanche varie avec R tandis que la dynamique conduisant au blocage reste qualitativement la même. La forme exponentielle de la distribution indique que des avalanches de taille plusieurs fois supérieure à la moyenne ont lieu avec une probabilité significative. Il s'agit d'une caractéristique des régimes métastables [98].

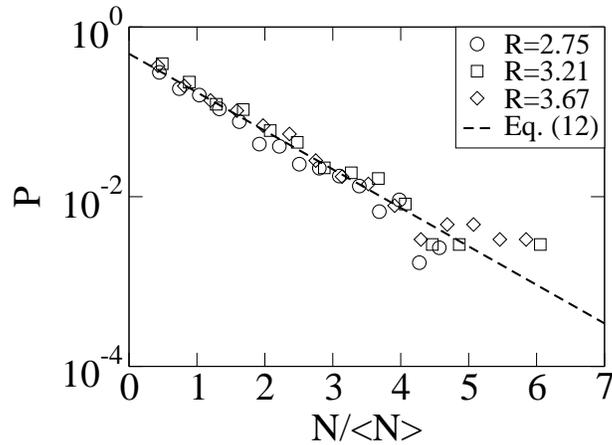


FIG. 2.13 – Densité de probabilité des tailles d’avalanche réduites $N/\langle N \rangle$ pour trois valeurs différentes de l’ouverture R . Une fonction exponentielle approchant les points, en accord avec l’équation (2.13), est représentée par une ligne pointillée.

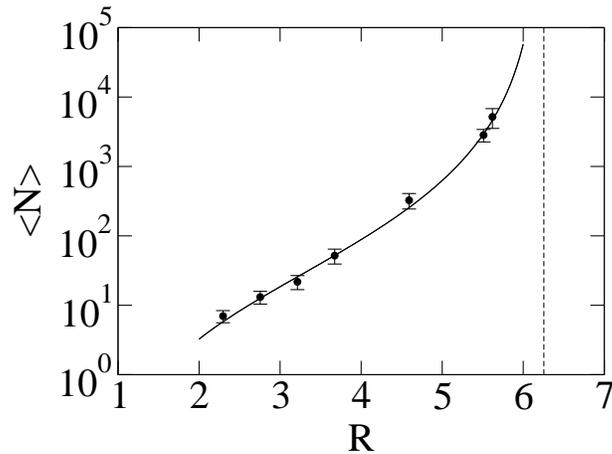


FIG. 2.14 – Evolution de la taille moyenne d’avalanche en fonction de l’ouverture normalisée.

La FIG. 2.14 présente la taille moyenne d’avalanche $\langle N \rangle$ en fonction de R . La taille moyenne d’avalanche croît rapidement avec R et semble diverger à l’approche de la transition vers l’écoulement permanent pour une ouverture normalisée critique R_f . Puisque $\langle N \rangle = QT_e$ et Q varie comme $(R - R_e)^{3/2}$ (cf. (2.2)), cette divergence doit être attribuée à la durée de vie de l’écoulement T_e . En s’inspirant des résultats de Zuriguel *et al.* [118], on choisit cette durée de vie proportionnelle à $(R_f - R)^{-\gamma}$. Une fonction de la forme suivante approche les points :

$$\langle N \rangle = C_N (R_f - R)^{-\gamma} (R - R_e)^{3/2}, \quad (2.8)$$

avec $\gamma \simeq 2,6$, $C_N \simeq 140$, $R_f \simeq 6,25$ et en gardant $R_e = 1$. L’avantage de cette forme est qu’elle approche bien les points pour toutes les valeurs de R étudiées, comme on peut le voir sur la FIG. 2.14. On note que les deux derniers points ($R = 6,43$ et $R = 7,35$) ne sont pas présentés sur la FIG. 2.14 puisqu’ils appartiennent au domaine du régime d’écoulement permanent et

donc les tailles d'avalanche sont pratiquement infinies pour ces points, *i.e.* aucun blocage n'a lieu. L'ouverture normalisée critique R_f marquant la transition entre le régime de blocage et le régime d'écoulement permanent joue le même rôle pour le silo que l'angle maximum θ_f dans le cas de l'écoulement sur un plan incliné. De plus, on souligne que (2.8) indique que les avalanches n'ont lieu que pour des ouvertures normalisées R prises entre $R_e = 1$ et $R_f = 6,25$, *i.e.* pour une ouverture d_o plus grande que le diamètre moyen des particules $\langle d \rangle$ et plus petit que $6,25\langle d \rangle$. La borne inférieure *naturelle* pour les échantillons monodisperses $R_e = 1$ semble être encore valide ici pour la classe d'échantillons polydisperses considérée. La borne supérieure $R_f = 6,25$ est le résultat pertinent de cette étude.

On considère maintenant un modèle simple inspiré encore une fois du travail de Zuriguel *et al.* [118]. On suppose que durant chaque avalanche les particules passent par l'orifice une par une. On note 1 les événements "passage" et 0 les événements "blocage". Un événement "passage" est le passage d'une particule après une autre ou un blocage, et se produit avec une probabilité $P(1)$. Un événement "blocage", *i.e.* un blocage après le passage d'un certain nombre de particules, se produit avec une probabilité $P(0)$. En supposant que les événements successifs sont décorrélés, comme suggéré par la FIG. 2.10, la probabilité d'observer N événements "passage" interrompus par un événement "blocage" est

$$P(N) = P(0) P(1)^N = P(0) \exp(N \ln[P(1)]). \quad (2.9)$$

La condition de normalisation implique que $\sum_{N=0}^{\infty} P(N) = 1$. La probabilité de blocage dans le processus entier $P(0)$ supposant plusieurs avalanches est différente de $1 - P(\infty)$, qui définit la probabilité qu'aucune avalanche de taille infinie n'aie lieu, ou, en d'autres termes, la probabilité de blocage en temps fini. Dans le régime de blocage, cette dernière vaut 1, ce qui signifie que $P(\infty) = 0$.

On peut voir le processus entier comme une séquence d'événements "passage" indépendants séparés par une instance de l'événement "blocage" : 1110110111110... Soit M le nombre total d'événements, incluant S blocages et $M - S$ passages. Par définition, on a

$$P(0) = \frac{S}{M}. \quad (2.10)$$

D'autre part, puisque chaque avalanche se termine par un blocage, la taille moyenne d'avalanche est

$$\langle N \rangle = \frac{M - S}{S}. \quad (2.11)$$

En combinant les équations (2.10) et (2.11), on obtient

$$P(0) = \frac{1}{\langle N \rangle + 1}. \quad (2.12)$$

Il s'agit d'une relation intéressante puisqu'elle montre que la probabilité de blocage varie comme l'inverse de la taille moyenne d'avalanche. De plus, les deux limites du régime de blocage sont prédites correctement : pour $\langle N \rangle = 0$, on a $P(0) = 1$ (état stable où tout est bloqué), et pour $\langle N \rangle = \infty$, on a $P(0) = 0$ (état instable ou régime d'écoulement permanent).

A partir de l'équation (2.9), la condition de normalisation et l'expression de $P(0)$ dans (2.12), on obtient

$$P(N) = \frac{1}{\langle N \rangle + 1} \exp\left(-\frac{N}{\langle N \rangle + 1}\right). \quad (2.13)$$

Cette expression est en accord avec la forme exponentielle des pdf des tailles d'avalanche et la normalisation des données par rapport à la taille moyenne d'avalanche. A partir de l'équation (2.13), on peut définir la densité de probabilité $P_n(n)$ de la variable réduite $n = N/(\langle N \rangle + 1)$. On a

$$P_n(n) = \exp(-n). \quad (2.14)$$

Il s'agit d'une fonction simple qui approche correctement les données normalisées et qui ne nécessite aucun paramètre d'ajustement.

L'étude des statistiques d'avalanche nous a permis de montrer que la densité de probabilité des tailles d'avalanche, normalisées par la taille moyenne d'avalanche est une exponentielle décroissante, quelle que soit l'ouverture considérée. On a aussi montré que la taille moyenne d'avalanche, seule à dépendre de l'ouverture, diverge à l'approche d'une ouverture critique. L'utilisation d'une divergence en loi de puissance pour les durées de vie d'écoulement, combinée à la loi de Beverloo obtenue dans la section précédente, a fourni une fonction qui approche les données obtenues pour toutes les ouvertures considérées. Enfin, on a proposé un modèle probabiliste simple expliquant la statistique des avalanches.

2.5 Application au cas de la relocalisation

On cherche maintenant à utiliser les statistiques obtenues dans les sections précédentes (équation (2.8)), de manière à donner des estimations concrètes des taux de relocalisation, durant une situation accidentelle de type APRP.

2.5.1 Hypothèses géométriques

L'analyse proposée ici repose sur deux hypothèses principales.

- H1 - Le ballon est supposé de forme "triangulaire", *i.e.* un triangle en situation 2D axisymétrique. Cette hypothèse pourra être discutée par la suite.
- H2 - On suppose que les statistiques obtenues dans les sections précédentes sont valides dans le cas du combustible 3D. D'une part, cette hypothèse revient à supposer que les résultats de l'analyse 2D sont transposables au cas 3D. Cette transposition est communément admise dans le cas des écoulements granulaires. D'autre part, cette hypothèse impose que les fragments de combustible soient assimilés à des sphères, avec un niveau de dispersion granulométrique assez faible, *i.e.* le diamètre maximal des particules est trois fois plus grand que le diamètre minimal. Malheureusement, à faible taux de combustion les pastilles de combustible sont fragmentées en gros fragments dont la distribution est assez

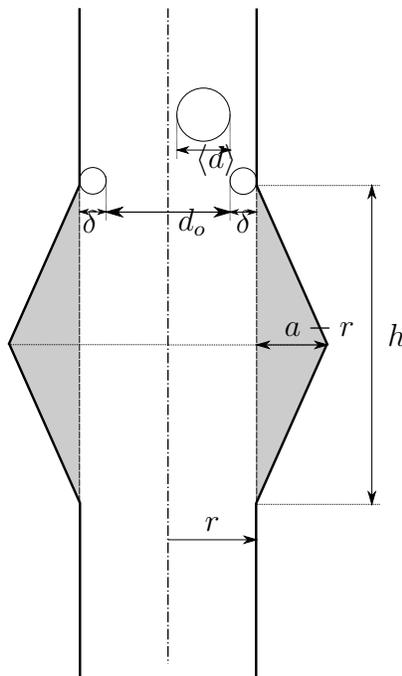


FIG. 2.15 – Schéma du ballonnement illustrant les paramètres géométriques introduits.

peu polydisperse mais dont la forme est assez éloignée des sphères, et à fort taux de combustion, le combustible est fragmenté en plus petits fragments, plus assimilables à des sphères mais dont les tailles caractéristiques peuvent s'étendre de quelques millimètres à quelques microns. Par conséquent, cette seconde hypothèse peut être un facteur limitant de la pertinence de l'analyse proposée ici. Une correction *a posteriori* pourra être proposée.

La FIG. 2.15 présente la configuration géométrique considérée : un tube initialement circulaire qui se déforme en "triangle". Le rayon initial du tube est noté r , la hauteur du ballon h et le plus grand rayon du ballon a . On note δ la taille des fragments potentiellement adhérents aux parois du tube. Le diamètre de l'espace libre pour l'écoulement des fragments de combustible est alors :

$$d_o = 2(r - \delta).$$

Le TAB. 2.1 fournit les plages typiques pour les données géométriques dans le cas d'un ballonnement en APRP. La plage de validité pour le rayon maximal du ballon correspond ici à une plage de déformation de 20% à 90%, en termes de rapport périmètre déformé sur périmètre initial. Par ailleurs, les paramètres adimensionnés suivants sont introduits :

$$\bar{a} = \frac{a}{r}, \quad \bar{h} = \frac{h}{r}, \quad \bar{\delta} = \frac{\delta}{r}, \quad \bar{d}_o = \frac{d_o}{r}.$$

a	h	δ	r
5,80 mm-9,3 mm	60 mm-200 mm	0 mm-1 mm	4,9 mm

TAB. 2.1 – Plages typiques des données géométriques dans le cas d'un ballonnement en APRP.

Enfin, la taille moyenne des fragments, supposés sphériques, est notée $\langle d \rangle$ et on introduit le diamètre moyen adimensionné des fragments :

$$\langle \bar{d} \rangle = \frac{\langle d \rangle}{r}.$$

2.5.2 Définition du taux de relocalisation

On définit le taux de relocalisation, noté y , comme le rapport de volume de matière relocalisée dans le ballon V_r sur le volume disponible dans le ballon V :

$$y = \frac{V_r}{V}. \quad (2.15)$$

On note que V est le volume initialement libre dans le ballon et que le volume total du ballon est obtenu en ajoutant V au volume initial du tube cylindrique sur une hauteur h .

Dans l'hypothèse d'un ballon "triangulaire", le volume disponible V est le volume d'un tronc de cône de révolution évidé et s'écrit :

$$V = h \frac{\pi}{3} (a^2 + r^2 + ar) - h\pi r^2,$$

soit en introduisant les grandeurs adimensionnées :

$$V = \frac{\pi}{3} \bar{h} (-2 + \bar{a} + \bar{a}^2) r^3. \quad (2.16)$$

On postule de plus que le volume de matière relocalisable V_r correspond à la quantité moyenne $\langle N \rangle$ de particules, de diamètre $\langle d \rangle$, écoulée par le trou de diamètre d_o multipliée par le volume v de chaque particule. On suppose ici que les particules sont des sphères, $v = \frac{4}{3}\pi(\langle d \rangle/2)^3$, soit :

$$V_r = \langle N \rangle \frac{\pi}{6} \langle \bar{d} \rangle^3 r^3. \quad (2.17)$$

En combinant, les équations (2.15), (2.16) et (2.17), on obtient pour le taux de relocalisation, après simplifications :

$$y = \frac{\langle \bar{d} \rangle^3}{2\bar{h}(-2 + \bar{a} + \bar{a}^2)} \langle N \rangle. \quad (2.18)$$

L'analyse statistique réalisée dans les sections précédentes a permis de relier la quantité écoulée $\langle N \rangle$ à la taille relative du trou $R = d_o/\langle d \rangle$. On rappelle le résultat (2.8) :

$$\langle N \rangle = C_N \left(R_f - \frac{d_o}{\langle d \rangle} \right)^{-\gamma} \left(\frac{d_o}{\langle d \rangle} - R_e \right)^{3/2}, \quad (2.19)$$

où $C_N \simeq 140$, $R_f = 6,25$, $R_e = 1$ et $\gamma = 2,6$.

Le taux de relocalisation est ainsi obtenu comme :

$$y = \frac{C_N \langle \bar{d} \rangle^3}{2\bar{h}(-2 + \bar{a} + \bar{a}^2)} \left(R_f - \frac{\bar{d}_o}{\langle \bar{d} \rangle} \right)^{-\gamma} \left(\frac{\bar{d}_o}{\langle \bar{d} \rangle} - R_e \right)^{3/2}. \quad (2.20)$$

2.5.3 Recherche de bornes et d'estimations pour le taux de relocalisation

Dans le cadre d'une approche de sûreté il est légitime de chercher à borner le taux de relocalisation y . Compte tenu de la forme de l'équation (2.20), les bornes suivantes peuvent être obtenues :

1. borne supérieure y^+ : la quantité relocalisée sera maximale pour \bar{a} et \bar{h} minimaux et \bar{d}_o maximal.
2. borne inférieure y^- : la quantité relocalisée sera minimale pour \bar{a} et \bar{h} maximaux et \bar{d}_o minimal.

Le fait que la borne supérieure y^+ soit obtenue pour une taille de ballon minimale, *i.e.* avec \bar{a} et \bar{h} minimaux, indique que la probabilité de remplir intégralement un ballon de petite taille est supérieure à celle pour un ballon de plus grande taille : *le taux de relocalisation est plus important lorsque la taille du ballon est petite*, bien que la *quantité* relocalisée soit plus importante lorsque la taille du ballon est grande. L'explication en est la suivante. Le scénario de relocalisation envisagé ici est illustré sur la FIG. 2.16. Dans ce scénario, quelle que soit la taille du ballon, seule une partie de la colonne de combustible située au-dessus du ballon peut être relocalisée ; il s'agit de la portion inférieure de cette colonne qui ne peut être concernée par l'apparition d'une arche (cette quantité correspond aux avalanches de petite taille dans l'analyse de silos). Ainsi, si le volume du ballon est inférieur au volume de cette quantité "sous arche", tout le ballon peut être rempli et le taux de relocalisation peut potentiellement atteindre 100%.

L'évolution des bornes y^- et y^+ en fonction de la taille des fragments est donnée sur la FIG. 2.17. Comme attendu, le taux de relocalisation diminue lorsque la taille des fragments augmente. En particulier, ce taux devient quasiment nul pour la borne inférieure lorsque la taille moyenne normalisée des fragments atteint environ $\langle \bar{d} \rangle \simeq 0,7$, soit une taille moyenne de fragments de l'ordre de 3,4 mm. Pour la borne supérieure, ce taux devient aussi rigoureusement nul pour $\langle \bar{d} \rangle \simeq 2$, *i.e.* pour une taille de fragments égale au diamètre de la gaine. Ainsi, on peut estimer que la relocalisation est négligeable lorsque la taille des fragments est suffisamment grande pour être de l'ordre du rayon de la gaine *i.e.* égale à la valeur moyenne entre les deux bornes. Inversement, lorsque cette taille est inférieure à 1,5 mm, le taux de relocalisation est voisin de 100%.

Afin d'orienter davantage ces résultats vers une utilisation directement applicable pour les critères APRP, on cherche à établir dans le paragraphe suivant une corrélation entre la taille de fragments de combustible et le taux de combustion.

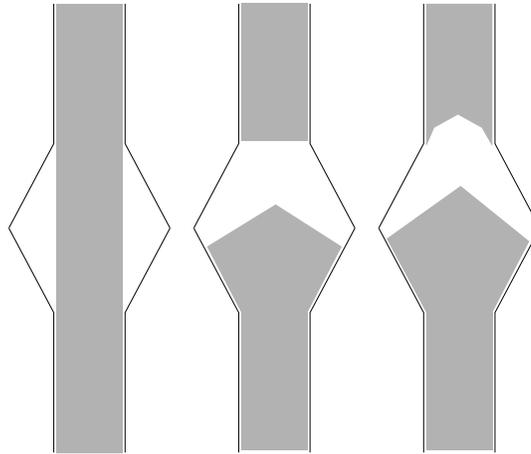


FIG. 2.16 – Schématisation d'un scénario de relocalisation. De gauche à droite : (1) création du ballon, (2) relocalisation de la partie de la colonne de combustible située dans le ballon, (3) relocalisation de toute ou partie de la colonne de combustible située au-dessus du ballon.

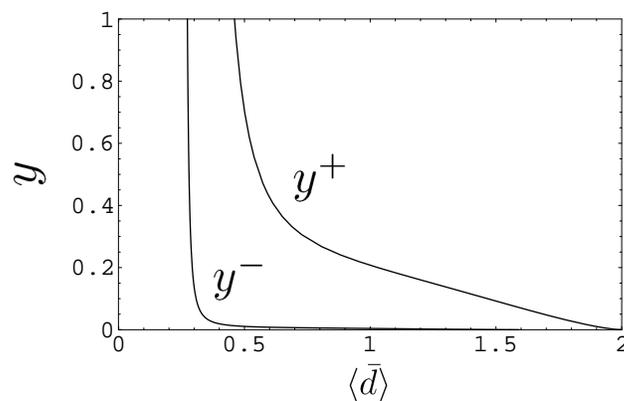


FIG. 2.17 – Bornes inférieure y^- et supérieure y^+ de la fraction relocalisée en fonction de la taille moyenne normalisée des fragments de combustible $\langle \bar{d} \rangle$.

2.5.4 Evolution de la taille des fragments de combustible en fonction du taux de combustion

L'étude bibliographique de [21] permet d'estimer l'évolution de la taille moyenne des fragments de combustible pour différents taux de combustion (BU), exprimés en méga-watt jour par tonne d'uranium : 2500 MWj/tU, 8000 MWj/tU, 20000 MWj/tU et 35000 MWj/tU.

La FIG. 2.18 montre, pour ces quatre taux de combustion, la densité de probabilité non cumulée par taille de fragments. Une répartition gaussienne est identifiée pour chaque taux de combustion permettant de définir la taille moyenne des fragments $\langle d \rangle$ comme la valeur centrée de la distribution. Une évolution de $\langle d \rangle$ avec le taux de combustion en est déduite (cf. FIG. 2.19). La taille moyenne de fragments pour un taux de combustion nul, *i.e.* le combustible vierge, notée

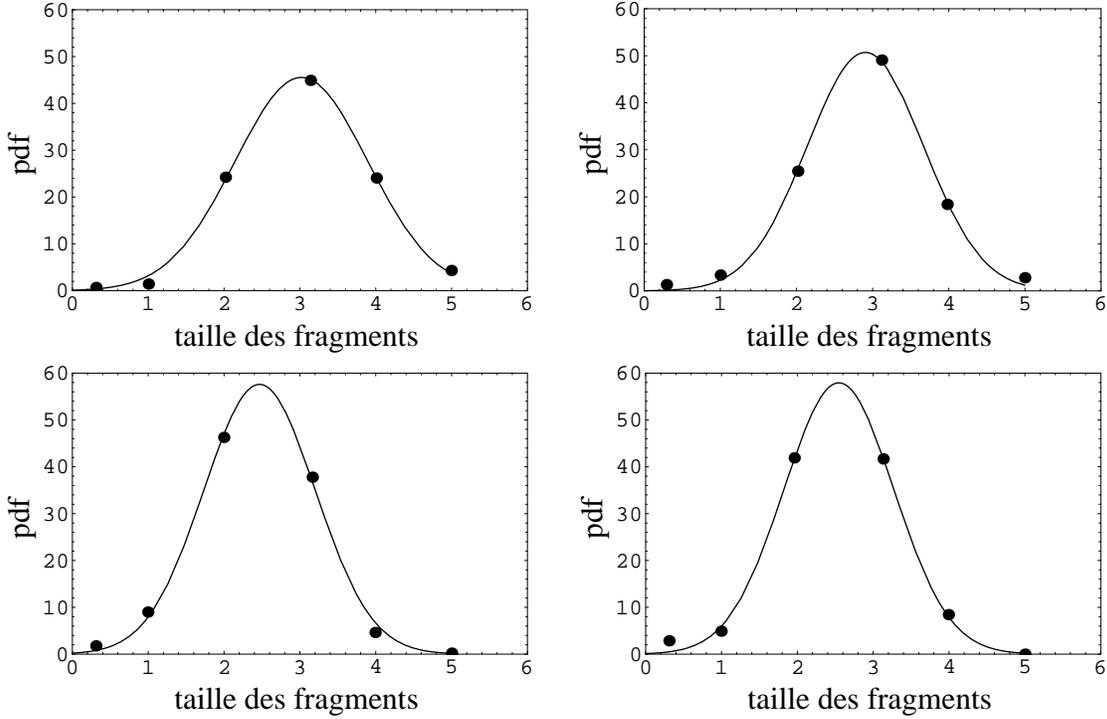


FIG. 2.18 – Densités de probabilité non cumulées (en %) de la taille des fragments de combustible (en mm), pour différents taux de combustion (de gauche à droite et de haut en bas : 2500 MWj/tU, 8000 MWj/tU, 20000 MWj/tU et 35000 MWj/tU, d’après [21]). Données expérimentales (points) et identification gaussienne (lignes continues).

$\langle d_v \rangle$, correspond au rayon de la sphère équivalente possédant le même volume que la pastille initiale. En notant L la hauteur de la pastille cylindrique, on obtient :

$$\frac{4}{3}\pi \left(\frac{\langle d_v \rangle}{2} \right)^3 = \pi r^2 L.$$

Avec $L = 13$ mm et les données du TAB. 2.2, on trouve : $\langle d_v \rangle \simeq 12,32$ mm, et l’évolution de $\langle d \rangle$ avec le taux de combustion est convenablement approchée par une fonction exponentielle décroissante :

$$\langle d \rangle = A_3 \left(1 + \left[\frac{\langle d_v \rangle}{A_3} - 1 \right] e^{-\frac{BU}{A_4}} \right), \quad (2.21)$$

où BU est en MWj/tU, $\langle d \rangle$ en mm. Les valeurs de A_3 et A_4 identifiées sur la FIG. 2.18 sont : $A_3 \simeq 2,4$ mm et $A_4 \simeq 2500$ MWj/tU.

Dans le paragraphe suivant, cette dernière relation est utilisée conjointement avec la relation (2.20) pour déterminer l’évolution du taux de relocalisation avec le taux de combustion.

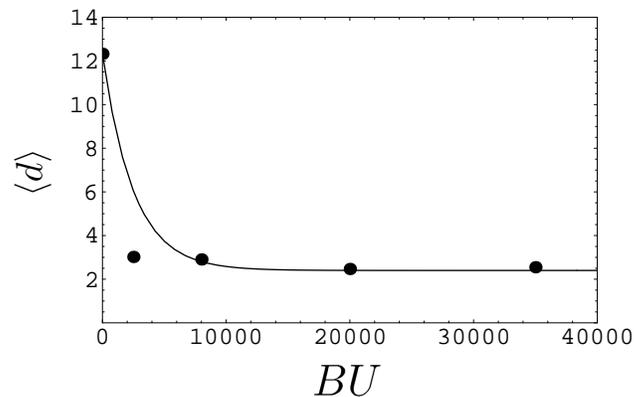


FIG. 2.19 – Evolution de la taille moyenne des fragments $\langle d \rangle$ (en mm) en fonction du taux de combustion BU (en MWj/tU). Données expérimentales déduites de la FIG. 2.18 (points) et identification d'une décroissance exponentielle (ligne continue).

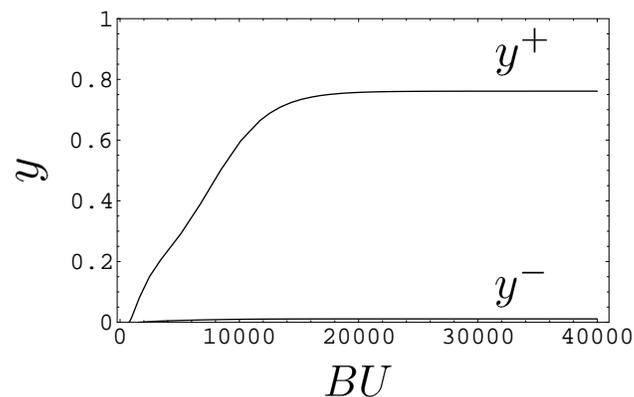


FIG. 2.20 – Borne inférieure y^- et supérieure y^+ de la fraction relocalisée en fonction du taux de combustion BU (en MWj/tU).

2.5.5 Estimation de l'évolution du taux de relocalisation avec le taux de combustion

En utilisant la corrélation précédente entre le taux de combustion et la taille des fragments, l'approche par bornes pour le taux de relocalisation fournit le résultat de la FIG. 2.20. Cette figure indique que :

- le taux de relocalisation augmente avec le taux de combustion,
- au-delà de 20000 MWj/tU environ, le taux de relocalisation n'évolue presque plus,
- le taux de relocalisation ne dépasse pas 80% (borne supérieure),
- la borne inférieure n'est pas pertinente dans cette situation, le taux de relocalisation étant supérieur à 2%.

Avec les plages de variations fournies par le TAB. 2.1 et les hypothèses géométriques fortes formulées, il s'avère que les bornes y^+ et y^- sont relativement éloignées l'une de l'autre. On

a	h	δ	r
7.35 mm	100 mm	0 mm	4.9 mm

TAB. 2.2 – Valeurs typiques des données géométriques dans le cas d'un ballonnement en APRP.

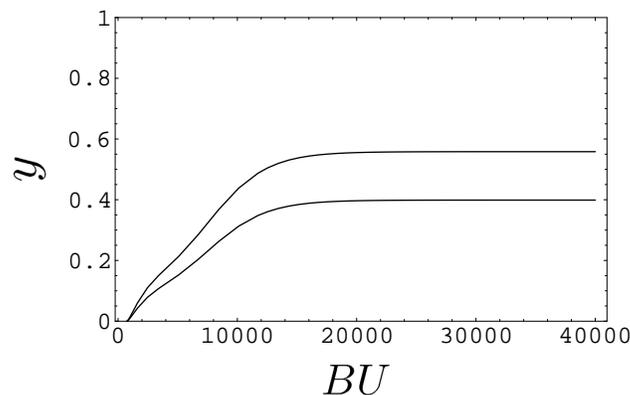


FIG. 2.21 – Estimation du taux de relocalisation y en fonction du taux de combustion BU (en MWj/tU) pour une hypothèse de ballon “triangulaire” (en haut) et de ballon “rectangulaire” (en bas).

souhaite ici compléter cette approche par bornes par une *estimation* représentant une situation typique rencontrée en APRP : un ballon “moyen”. Un tel ballon peut être défini par les données du TAB. 2.2 (d’après [42]). Le rayon maximal du ballon a correspond à une déformation de 50%.

L’hypothèse de sphéricité des fragments conduit plutôt à une sous-estimation du taux de relocalisation tandis que l’hypothèse sur la forme “triangulaire” du ballon tend plutôt à sur-estimer le taux de relocalisation. L’objectif étant ici de proposer une estimation à la fois réaliste et plutôt majorante (approche *conservative* d’un critère de type *best-estimate*), ces hypothèses sont reconsidérées. En premier lieu, l’hypothèse de sphéricité monodisperse conduit à minimiser le taux de relocalisation. A l’inverse, une hypothèse de polydispersion extrême donnerait un taux de compaction maximal. Dans cet esprit, remplir un cube de même rayon que la sphère considérée revient à multiplier le volume relocalisable, et donc le taux de relocalisation y , par un facteur $6/\pi$. Cette hypothèse est dite de *compaction maximale*. En deuxième lieu, l’hypothèse d’un ballon “triangulaire”, défini par son rayon maximal et sa hauteur, conduit à minorer la taille des ballons observés expérimentalement (*i.e.* majorer le taux de relocalisation). Une hypothèse majorante (*i.e.* minorant le taux de relocalisation) revient alors à considérer un ballon “rectangulaire” *i.e.* un cylindre, toujours en situation axisymétrique. Dans ce cas, le volume disponible V doit être modifié et l’équation (2.16) devient : $V = (\pi/3)\bar{h}(-1 + \bar{a}^2)r^3$. Cette hypothèse est dite de *ballon rectangulaire*.

L’évolution du taux de relocalisation correspondant à l’hypothèse de compaction maximale et aux données du TAB. 2.2 est présentée sur la FIG. 2.21 pour les deux situations géométriques envisagées : ballon “triangulaire” ou “rectangulaire”.

Cette figure indique que pour un ballon “standard”, *i.e.* possédant les caractéristiques géométriques du TAB. 2.2, une estimation haute du taux de relocalisation à fort taux de combustion est comprise entre 40% et 60% selon la forme du ballon. Cette conclusion n’est ici valable qu’en l’absence d’éjection de combustible.

2.5.6 Discussion

L’analyse proposée ici permet, à partir de l’étude des statistiques d’avalanche dans une géométrie de silo, d’estimer pour un taux de combustion donné la fraction de combustible relocalisable lors d’une situation accidentelle de type APRP.

Une approche par bornes a été proposée en vue de contribuer à la définition d’un critère de sûreté sur le taux de combustion admissible. Ces bornes reposent sur des hypothèses relativement minorantes et majorantes. On s’attend donc à ce qu’en pratique, ces bornes soient plus resserrées et dans cet esprit, une estimation a été proposée. Il s’agit d’une estimation haute *i.e.* plutôt majorante.

Il ressort de cette analyse que :

- le taux de relocalisation est d’au maximum 80% quelles que soient les situations considérées, en l’absence d’éjection,
- le taux de relocalisation augmente quand : (1) la taille de fragments diminue, (2) la taille du ballon diminue, ou (3) le taux de combustion augmente,
- pour les combustibles à fort taux de combustion, typiquement au-delà de 25000-30000 MWj/tU, un taux de relocalisation de 40-60% peut être attendu,
- le modèle proposé est très sensible à la taille des fragments de combustible ancrés à la gaine ; cette analyse indique ainsi qu’un effort de caractérisation expérimentale doit être fait dans ce sens.

Enfin, les résultats présentés ne valent qu’en absence d’un effet moteur de la pression et en l’absence d’éjection de combustible.

2.6 Conclusion

On a réalisé des simulations du processus de blocage sur des temps physiques longs par la méthode NSCD dans une configuration simplifiée représentant l’écoulement d’un ensemble polydisperse de particules circulaires sortant d’un silo. En analysant un grand nombre d’écoulements (avalanches) entre deux blocages consécutifs pour des valeurs croissantes de l’ouverture, on a étudié les débits et les statistiques des durées de vie d’écoulement et des blocages. Les données obtenues sont en accord avec la loi de Beverloo décrivant le débit comme une fonction de l’ouverture aussi bien dans le régime de blocage que dans la transition vers l’écoulement continu. On a observé que la distribution des vitesses des particules à la sortie est étendue. On propose donc d’exprimer le débit en faisant intervenir le mode prépondérant plutôt que la

vitesse moyenne, comme c'est le cas dans l'analyse classique. De plus, les résultats obtenus suggèrent que la hauteur de la zone fluidisée est plus grande que la largeur de l'ouverture.

Concernant les statistiques d'avalanche, on a trouvé que la densité de probabilité des tailles d'avalanche normalisées par la taille moyenne d'avalanche est une exponentielle décroissante indépendante de l'ouverture. Seule la taille moyenne d'avalanche dépend de l'ouverture et elle diverge à l'approche d'une ouverture critique. En combinant la loi de Beverloo et une divergence en loi de puissance pour les durées de vie de l'écoulement on a pu proposer une fonction qui approche les données obtenues pour l'ensemble des ouvertures considérées. On a aussi montré qu'un modèle simple décrivant les événements "passages" comme un processus sans mémoire fournit une fonction sans paramètre d'ajustement qui approche de très près la statistique des avalanches.

Les résultats obtenus sont en accord avec les données expérimentales publiées par Zuriguel *et al.* en ce qui concerne la forme exponentielle de la distribution des tailles d'avalanche. La nature stochastique de la décharge d'un silo dans le régime de blocage est une caractéristique générique des écoulements granulaires. On peut par exemple, définir une analogie entre le problème du blocage dans une géométrie de silo et le problème des avalanches sur un plan incliné. Dans ce cadre, la taille de l'ouverture joue le même rôle que l'angle de la pente tandis que le nombre de particules passant entre deux blocages correspond à la taille d'avalanche. C'est pourquoi, on pense que les caractéristiques remarquables des écoulements granulaires dans une géométrie de silo sont communes à tous les matériaux granulaires dans le régime de blocage.

On a proposé une modélisation du ballonnement permettant de calculer, pour un taux de combustion donné, la fraction de combustible relocalisable lors d'un APRP, en absence d'éjection de combustible. Afin de contribuer à la définition d'un critère de sûreté sur le taux de combustion admissible, on a calculé des bornes sur la fraction de combustible relocalisable. L'intervalle obtenu étant assez large, par suite des hypothèses minorantes et majorantes considérées, on a proposé une estimation haute, *i.e.* plutôt majorante, correspondant à une situation typique.

Cette étude a été menée sans tenir compte de la présence des gaz de fission. Le chapitre suivant présente les méthodes de couplage gaz-particules qui ont été développées, pour étendre l'étude au cas saturé.

Couplage gaz-grains

Sommaire

3.1	Introduction	78
3.2	Les modèles	78
3.2.1	Equations de conservation	78
3.2.2	Loi d'évolution de la pression	80
3.2.3	Calcul de la perméabilité et validité de la loi de Darcy	83
3.2.4	Action du fluide sur les particules	85
3.3	Les méthodes numériques	86
3.3.1	Résolution éléments finis	86
3.3.2	Changement d'échelle	98
3.3.3	Cas bidimensionnel	101
3.3.4	Résolution du problème couplé	102
3.3.5	Architecture du code	105
3.3.6	Discussion des méthodes	108
3.4	Test de sédimentation	109
3.5	Conclusion	112

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, on a étudié la stabilité de l'empilement de fragments par le biais de l'étude des écoulements dans les silos. Cette analyse a fourni une première réponse au problème de la relocalisation, dans un cas drainé, *i.e.* sans prendre en compte la présence des gaz de fission.

On s'intéresse dans ce chapitre à l'écriture d'une méthode de couplage gaz-particules dans le but d'étendre l'analyse au cas saturé, *i.e.* en tenant compte de la présence des gaz de fission. On a vu dans le chapitre d'introduction que la méthode de couplage FD-DEM proposée par McNamara *et al.* semble intéressante de par son modèle, adapté au gaz, et son apparente simplicité de mise en œuvre, mais elle n'est pas directement applicable ici. En effet, elle ne gère que des échantillons monodisperses, alors qu'un échantillon polydisperse a été utilisé dans le cas sans fluide. De plus, l'analyse du cas saturé, nécessite que le domaine fluide couvre l'intérieur du silo et de l'orifice, alors que cette méthode ne traite que les rectangles (dans le cas bidimensionnel).

On se propose donc de développer une nouvelle méthode s'appuyant sur la philosophie de la méthode originale, mais gérant les échantillons polydisperses et les domaines de géométrie quelconque, par le biais d'un couplage FEM-DEM. La première section propose une démonstration originale pour établir les équations du modèle. Elle présente aussi une extension au cas des fluides incompressibles, basée sur des travaux plus récents. La deuxième section présente la dérivation de méthodes numériques à partir des modèles obtenus dans la première section. Une place importante est consacrée à des considérations techniques, menant à une discussion des méthodes développées et au choix d'une méthode unique pour réaliser l'analyse du cas saturé. La troisième section présente une validation de celle-ci sur un test de sédimentation.

3.2 Les modèles

3.2.1 Equations de conservation

On considère dans un volume Ω un mélange fluide/particules (*cf.* FIG. 3.1). A l'échelle de ce volume le mélange est considéré comme homogène. On considère de plus qu'en chaque point matériel \vec{x} de Ω un élément de volume $\omega(t)$ du mélange puisse être exhibé.

La microstructure de ce mélange est constituée d'un fluide occupant un domaine $\omega^0(t)$ et d'une collection de phases solides (les particules) occupant un domaine ω^α ($\alpha = 1, \dots, N_b$).

La masse et le volume de chaque constituant α ($\alpha = 0, \dots, N_b$) sont respectivement notés m^α et $|\omega^\alpha|$. On a :

$$\omega(t) = \bigcup_{\alpha=0}^{N_b} \omega^\alpha. \quad (3.1)$$

On note encore pour chaque constituant α :

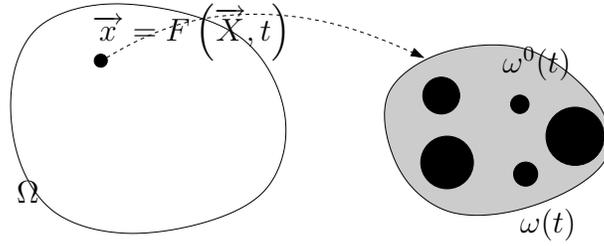


FIG. 3.1 – Volume élémentaire représentatif au point matériel $x = F(X, t)$.

- $\rho^\alpha = \frac{m^\alpha}{|\omega^\alpha|}$ la masse volumique,
- \vec{u}^α la vitesse au point \vec{x} ,
- $c^\alpha = \frac{|\omega^\alpha|}{|\omega|}$ la fraction volumique au point \vec{x} .

On indice par f (resp. s) les quantités relatives au fluide (resp. au solide) et on note c la fraction volumique de solide, *i.e.* la compacité de la matrice granulaire, et ϕ la fraction volumique de fluide, *i.e.* la porosité de la matrice granulaire :

$$\phi = \frac{|\omega_f|}{|\omega|} = \frac{|\omega^0|}{|\omega|}, \quad c = \frac{|\omega_s|}{|\omega|} = \frac{\sum_1^{N_b} |\omega^\alpha|}{|\omega|} = 1 - \phi. \quad (3.2)$$

Pour chaque domaine ω^α ($\alpha=1, \dots, N_b$), la loi de conservation de la masse s'écrit, par application du lemme de transport de Maxwell :

$$\frac{dm^\alpha}{dt}(\vec{x}) = \int_\omega \left[\frac{\partial(c^\alpha \rho^\alpha)}{\partial t}(\vec{x}) + \vec{\nabla} \cdot (c^\alpha \rho^\alpha \vec{u}^\alpha)(\vec{x}) \right] dV = 0. \quad (3.3)$$

L'expression sous l'intégrale dans l'équation (3.3) est indépendante de la variable d'intégration. On a par conséquent :

$$\frac{\partial(c^\alpha \rho^\alpha)}{\partial t}(\vec{x}) + \vec{\nabla} \cdot (c^\alpha \rho^\alpha \vec{u}^\alpha)(\vec{x}) = 0. \quad (3.4)$$

Pour la phase fluide ($\alpha = 0$), on a directement :

$$\frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi \rho_f \vec{u}_f) = 0, \quad (3.5)$$

où ρ_f et \vec{u}_f sont respectivement la masse volumique et la vitesse du fluide. On retrouve l'équation de conservation de la masse du fluide des équations de Navier-Stokes moyennées (1.141) décrites dans le premier chapitre. On note que dans le cas présent aucun opérateur d'interpolation continue n'a été défini (*cf.* chapitre 1) pour obtenir ce résultat.

Pour la phase solide, la somme sur $\alpha = 1, \dots, N_b$ de l'équation (3.4), conduit à :

$$\frac{\partial(c \rho_s)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (c \rho_s \vec{u}_s) = 0, \quad (3.6)$$

où on a noté :

– ρ_s la masse volumique de la phase solide :

$$\rho_s = \frac{\sum_1^{N_b} \rho^\alpha |\omega^\alpha|}{|\omega_s|} = \frac{\sum_1^{N_b} m^\alpha}{\sum_1^{N_b} |\omega^\alpha|}, \quad (3.7)$$

– \vec{u}_s la vitesse de la phase solide (vitesse barycentrique des particules) :

$$\vec{u}_s = \frac{1}{c\rho_s} \sum_1^{N_b} c^\alpha \rho^\alpha \vec{u}^\alpha = \frac{1}{\sum_1^{N_b} m^\beta} \sum_1^{N_b} m^\alpha \vec{u}^\alpha. \quad (3.8)$$

On remarque qu'avec les notations introduites dans le premier chapitre, on obtient :

$$\rho_s = \frac{\sum_{k=1}^{N_b} m^{j(k)}}{\sum_{k=1}^{N_b} V^{j(k)}}, \quad (3.9)$$

$$\vec{u}_s = \frac{1}{\sum_{l=1}^{N_b} m^{j(k)}} \sum_{k=1}^{N_b} m^{j(k)} \vec{v}^{j(k)}, \quad (3.10)$$

où $j(k)$ est l'indice de la particule correspondant à la phase k du mélange et m^j , V^j et \vec{v}^j sont respectivement la masse, le volume et la vitesse de la particule j .

On considère une collection de particules constituées du même matériau pour assurer que la masse volumique du solide ρ_s soit constante. En utilisant la relation (3.2), on obtient alors :

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot ((1 - \phi) \vec{u}_s) = 0. \quad (3.11)$$

3.2.2 Loi d'évolution de la pression

On a vu que l'expression de la loi de conservation de la masse du fluide à l'échelle mésoscopique est :

$$\frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi \rho_f \vec{u}_f) = 0, \quad (3.12)$$

où les quantités ϕ et $\phi \vec{u}_f$ sont évaluées à l'échelle mésoscopique (rapprocher (3.5) et (1.136)). On introduit à cette échelle la vitesse relative du fluide $\vec{u}_{f/s}$ dans la phase fluide par rapport à la vitesse barycentrique des particules \vec{u}_s :

$$\vec{u}_{f/s} = \vec{u}_f - \vec{u}_s. \quad (3.13)$$

Par définition, la quantité $\vec{u}_{f/s}$ est constante dans la phase fluide et la vitesse relative de l'écoulement à l'échelle de l'élément de volume vaut ainsi :

$$\vec{U}_{f/s} = \phi \vec{u}_{f/s}. \quad (3.14)$$

En multipliant (3.13) par $\rho_f \phi$ et en utilisant (3.14), on obtient :

$$\rho_f \phi \vec{u}_f = \rho_f \left(\phi \vec{u}_s + \vec{U}_{f/s} \right). \quad (3.15)$$

L'équation de conservation de la masse (3.12) s'écrit alors :

$$\frac{\partial(\rho_f \phi)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left[\rho_f \left(\phi \vec{u}_s + \vec{U}_{f/s} \right) \right] = 0. \quad (3.16)$$

3.2.2.1 Cas du gaz parfait

On considère que le fluide suit la loi des gaz parfaits à l'échelle mésoscopique, soit :

$$p|\omega_f| = n_f R_m T_f, \quad (3.17)$$

où n_f est la quantité de fluide dans le volume $|\omega_f|$, R_m est la constante des gaz parfaits et T_f est la température dans le fluide. En notant m_f la masse de fluide contenue dans le volume $|\omega_f|$, et en notant M_f la masse molaire du gaz, on obtient :

$$n_f = \frac{m_f}{M_f}. \quad (3.18)$$

En injectant (3.18) dans (3.17), on obtient l'expression de la masse volumique de fluide :

$$\rho_f = \frac{m_f}{|\omega_f|} = \frac{M_f}{R_m T_f} p. \quad (3.19)$$

Par définition, p est constante dans la phase fluide, à l'échelle mésoscopique. En injectant (3.19) dans (3.16), on trouve après simplification par $M_f/(R_m T_f)$:

$$\frac{\partial(\phi p)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi p \vec{u}_s) + \vec{\nabla} \cdot (p \vec{U}_{f/s}) = 0. \quad (3.20)$$

En notant que l'on peut réécrire l'équation de conservation de la masse du solide (3.11) sous la forme :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s - \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{u}_s), \quad (3.21)$$

on a :

$$\frac{\partial(\phi p)}{\partial t} = \phi \frac{\partial p}{\partial t} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s - p \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{u}_s). \quad (3.22)$$

De plus, on remarque que :

$$\vec{\nabla} \cdot (\phi p \vec{u}_s) = p \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{u}_s) + \phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p. \quad (3.23)$$

On peut alors réécrire (3.20) sous la forme :

$$\phi \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p \right) = -\vec{\nabla} \cdot (p \vec{U}_{f/s}) - p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s. \quad (3.24)$$

L'équation (3.19) montre que la masse volumique de fluide varie linéairement avec la pression. Le fluide est donc barotrope et on peut ainsi utiliser la loi de Darcy [8], qui relie la vitesse superficielle $\vec{U}_{f/s}$ au gradient de pression par :

$$\vec{U}_{f/s}(\vec{x}) = -\frac{\kappa(\phi(\vec{x}))}{\mu} \vec{\nabla} p(\vec{x}), \quad (3.25)$$

où κ est la perméabilité de la matrice granulaire. En injectant cette relation dans (3.24), on obtient finalement :

$$\phi \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p \right) = \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) - p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \quad (3.26)$$

où l'on reconnaît un terme de convection, qui traduit le transport du fluide par la matrice granulaire et un terme de diffusion, qui représente la diffusion du fluide dans le milieu poreux formé par la matrice. Le dernier est le terme de Biot, qui traduit l'évolution de la pression due au changement de taille des pores, *i.e.* des interstices entre les particules.

En décomposant la pression en pression moyenne (p_0) et fluctuation (\tilde{p}) :

$$p(\vec{x}) = p_0 + \tilde{p}(\vec{x}), \quad (3.27)$$

et en supposant que la fluctuation de pression \tilde{p} est très petite devant la pression moyenne p_0 , *i.e.* $\tilde{p} \ll p_0$, l'équation (3.26) devient, d'après McNamara *et al.* [70] :

$$\phi \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = p_0 \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} \tilde{p} \right) - p_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \quad (3.28)$$

que l'on peut réécrire, pour plus de commodité, en termes de pression totale :

$$\phi \frac{\partial p}{\partial t} = p_0 \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) - p_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s. \quad (3.29)$$

On introduit le temps caractéristique τ_c défini par

$$\tau_c = \frac{\mu}{p_0}, \quad (3.30)$$

et le temps adimensionné t' défini par

$$t = \tau_c t'. \quad (3.31)$$

En injectant (3.31) dans (3.29), on obtient l'équation d'évolution de la pression en fonction du temps adimensionné

$$\phi \frac{\partial p}{\partial t'} = \vec{\nabla} \cdot \left(\kappa(\phi) \vec{\nabla} p \right) - \mu \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s. \quad (3.32)$$

La structure de l'équation (3.32) montre que l'évolution de la pression ne dépend pas de la pression moyenne p_0 . Toutefois, la valeur de p_0 fixe l'échelle de temps au travers du temps caractéristique τ_c .

3.2.2.2 Cas du fluide incompressible

Dans l'article original de McNamara *et al.* [70], le modèle du gaz parfait est le seul envisagé pour le fluide. Vinningland *et al.* ont proposé d'étendre la méthode aux cas des fluides incompressibles [111]. Dans cette sous-section, on utilise la nouvelle démonstration pour établir l'équation vérifiée par la pression, dans le cas d'un fluide incompressible.

Dans le cas d'un fluide incompressible, la masse volumique du fluide ρ_f est une constante et l'équation de conservation de la masse (3.16) peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{u}_s) + \vec{\nabla} \cdot \vec{U}_{f/s} = 0. \quad (3.33)$$

On remarque que l'on peut réécrire l'équation de conservation de la masse du solide (3.11) sous la forme :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{u}_s) = \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s. \quad (3.34)$$

En injectant (3.34) dans (3.33), on obtient :

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{u}_s + \vec{U}_{f/s}) = 0, \quad (3.35)$$

d'où :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_f = 0. \quad (3.36)$$

On retrouve donc à l'échelle mésoscopique la condition d'incompressibilité du fluide classique.

Ayant fait l'hypothèse d'un fluide incompressible, on peut utiliser la loi de Darcy. On obtient alors :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{u}_s - \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) = 0, \quad (3.37)$$

soit :

$$- \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) = - \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s. \quad (3.38)$$

Donc, pour une cinématique des particules donnée (*i.e.* ϕ et \vec{u}_s donnés) à un instant donné, la résolution de l'équation (3.38) fournit directement le champ de pression, à l'échelle mésoscopique.

On remarque que la solution de cette équation est la solution stationnaire de l'équation linéarisée obtenue en considérant un gaz parfait.

3.2.3 Calcul de la perméabilité et validité de la loi de Darcy

Le milieu poreux est constitué de l'assemblage des particules. Le calcul de la perméabilité équivalente d'un tel milieu est un point difficile dès que l'on considère des matériaux poreux

complexes [43]. En l'absence d'informations complémentaires, la relation de Kozeny-Carman [15] :

$$\kappa = \frac{1}{6\mathcal{T}} \frac{\phi^3}{S_v^2}, \quad (3.39)$$

relie la perméabilité κ du milieu à sa porosité ϕ , à son aire spécifique S_v et à sa tortuosité \mathcal{T} . Dans le cas présent d'un empilement poreux de particules sphériques de diamètre d , l'aire spécifique S_v et la tortuosité \mathcal{T} valent :

$$S_v = \frac{6(1-\phi)}{d} \quad \text{et} \quad \mathcal{T} = \frac{5}{6}. \quad (3.40)$$

En combinant ces deux relations, on obtient :

$$\kappa = \frac{\phi^3 d^2}{180(1-\phi)^2}. \quad (3.41)$$

La loi de Kozeny-Carman n'est valable que pour des porosités faibles. La relation précédente est ainsi bornée par $\kappa(\phi) = \kappa(\phi_{max})$ pour $\phi > \phi_{max}$, où la porosité limite ϕ_{max} est fixée à 0,75 d'après Zick et Homsy [117]. Dans le cas polydisperse, la loi de Kozeny-Carman reste valable en utilisant le diamètre moyen d défini par $\left(\int_{d_{min}}^{d_{max}} \lambda^3 P(\lambda) d\lambda \right) / \left(\int_{d_{min}}^{d_{max}} \lambda^2 P(\lambda) d\lambda \right)$, où P est la fonction de distribution des tailles de particules, et d_{min} et d_{max} sont les bornes des diamètres de particules [28].

La loi de Darcy n'est valable que si le nombre de Reynolds local (Re) reste inférieur à l'unité [31] :

$$Re = \frac{\rho_f \|\vec{u}_{f/s}\| d_H}{\mu} < 1, \quad (3.42)$$

où d_H désigne le diamètre hydraulique des pores.

Par analogie avec un réseau capillaire on peut définir un diamètre hydraulique pour un milieu quelconque :

$$d_H = \frac{4\phi}{S_v}. \quad (3.43)$$

Dans le cas des sphères on obtient alors :

$$Re = \frac{2}{3} \frac{\rho_f \phi \|\vec{u}_{f/s}\| d}{\mu(1-\phi)} = \frac{2}{3} \frac{\rho_f \|\vec{U}_{f/s}\| d}{\mu(1-\phi)} = \frac{2}{3} \frac{Re_p}{(1-\phi)}, \quad (3.44)$$

où Re_p est le nombre de Reynolds particulaire. On retrouve que la condition de validité proposée par Dullien [28] : $Re_p/(1-\phi) < 1$ permet de garantir la validité du modèle.

On peut évaluer la vitesse superficielle $\vec{U}_{f/s}$ avec la relation de Richardson-Zaki [95] :

$$\|\vec{U}_{f/s}\| = \|\vec{U}_t\| \phi^{n_{RZ}}, \quad (3.45)$$

où :

- \vec{U}_t est la vitesse terminale atteinte par une sphère de rayon r tombant en chute libre dans un fluide visqueux (vitesse de Stokes) :

$$\vec{U}_t = \frac{2}{9} \frac{r^2(\rho_s - \rho_f)}{\mu} \vec{g}, \quad (3.46)$$

- n_{RZ} est un exposant plus grand que 1 qui dépend du nombre de Reynolds terminal [95] :

$$Re_t = \frac{\rho_f \|\vec{U}_t\| d}{\mu}. \quad (3.47)$$

3.2.4 Action du fluide sur les particules

L'équilibre du fluide à l'échelle microscopique s'écrit, sous forme lagrangienne :

$$\frac{d}{dt} (\rho_f \vec{u}'_f) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}' + \rho_f \vec{g} + \vec{f}_{s \rightarrow f}, \quad (3.48)$$

où \vec{u}'_f et $\vec{\sigma}'$ sont définis à l'échelle microscopique et désignent respectivement la vitesse du fluide et le tenseur des contraintes dans le fluide et $\vec{f}_{s \rightarrow f}$ est la densité volumique de force imposée au fluide par les particules. Le terme inertiel peut être négligé puisqu'on considère un faible nombre de Reynolds ($Re < 1$). De plus, le fluide considéré étant un gaz, on peut négliger sa masse et sa viscosité. Dans ces conditions, on a $\vec{\sigma}' = -p' \vec{I}$ où p' est la pression dans le fluide à l'échelle microscopique et \vec{I} le tenseur unité. Ainsi, l'intégrale sur ω de (3.48) s'écrit :

$$\int_{\omega} \vec{\nabla} p'(\vec{X}) dV = \int_{\omega} \vec{f}_{s \rightarrow f}(\vec{X}) dV = - \sum_1^{N_b} \vec{F}_{f \rightarrow s}^{\alpha}. \quad (3.49)$$

On suppose que le gradient de pression $\vec{\nabla} p'(\vec{X})$ est constant dans l'élément de volume et égal au gradient de pression à l'échelle mésoscopique $\vec{\nabla} p(\vec{x})$. On a alors

$$\int_{\omega} \vec{\nabla} p'(\vec{X}) dV = \int_{\omega} \vec{\nabla} p(\vec{x}) dV = |\omega| \vec{\nabla} p(\vec{x}), \quad (3.50)$$

et finalement :

$$\sum_1^{N_b} \vec{F}_{f \rightarrow s}^{\alpha} = -|\omega| \vec{\nabla} p(\vec{x}). \quad (3.51)$$

Si on suppose que les résultantes des forces exercées sur les phases sont proportionnelles à leur volume, on en déduit :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^{\alpha} = -\frac{|\omega^{\alpha}|}{1 - \phi} \vec{\nabla} p. \quad (3.52)$$

On remarque qu'avec les notations introduites dans le chapitre d'introduction, on obtient :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = -\frac{V^j}{1-\phi} \vec{\nabla} p, \quad (3.53)$$

où V^j et $\vec{F}_{f \rightarrow s}^j$ sont respectivement le volume et la résultante de la force exercée sur la particule j . L'inertie du fluide étant négligée, le moment de la force exercée par le fluide sur la particule j est nul, *i.e.* $\vec{M}_{f \rightarrow s}^j = \vec{0}$.

La forme de la force exercée par le fluide sur les particules donnée par l'équation (3.53) n'est *a priori* ni la résultante des forces de pression, ni une force de traînée (*cf.* section 1.4.4.3). La forme classique de la résultante des forces de pression pour une particule isolée est $-V^j \vec{\nabla} p$. Dans le cas présent, on applique la formule pour la particule isolée à l'élément de volume entier, et on en déduit une force sur chaque particule dans l'élément de volume. Ce calcul "global" explique l'apparition de la compacité $c = 1 - \phi$ dans l'expression de l'équation (3.53).

3.3 Les méthodes numériques

3.3.1 Résolution éléments finis

Dans cette section, on utilise des notations classiques dans la littérature traitant des éléments finis. Les matrices sont ainsi écrites entre crochets et les vecteurs entre accolades.

3.3.1.1 Cas du gaz parfait : équation linéarisée

Formulation variationnelle L'équation linéarisée s'écrit :

$$\phi \frac{\partial p}{\partial t} = p_0 \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) - p_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \text{ dans } \Omega, \quad (3.54)$$

ou :

$$\phi \frac{\partial p}{\partial t} - p_0 \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) + p_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s = 0, \text{ dans } \Omega. \quad (3.55)$$

Les conditions aux limites sont :

$$p = p_D, \text{ sur } \Gamma_D, \quad (3.56)$$

$$\vec{\nabla} p = \vec{0}, \text{ sur } \Gamma_N, \quad (3.57)$$

où $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ est la frontière de Ω .

Soit $\mathcal{D}(\Omega)$ l'ensemble des fonctions test et $q \in \mathcal{D}(\Omega)$, une fonction qui s'annule sur Γ_D . En multipliant l'équation (3.55) par q et en l'intégrant sur tout le domaine, on obtient (formellement) :

$$\int_{\Omega} q \phi \frac{\partial p}{\partial t} dV - p_0 \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV + p_0 \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV = 0. \quad (3.58)$$

En utilisant la relation :

$$\vec{\nabla} \cdot (f \vec{v}) = f \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f, \quad (3.59)$$

on obtient :

$$- \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = \int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} q \cdot \vec{\nabla} p dV + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV. \quad (3.60)$$

On a, à l'aide du théorème de flux-divergence :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = \int_{\Gamma} q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS, \quad (3.61)$$

et par définition :

$$\int_{\Gamma} q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS = \int_{\Gamma_D} q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS + \int_{\Gamma_N} q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS. \quad (3.62)$$

La fonction test q étant par définition nulle sur Γ_D , l'intégrale sur Γ_D apparaissant au second membre de l'équation (3.62) est nulle. De plus, par application des conditions aux limites, $\vec{\nabla} p$ est nul sur Γ_N , ce qui annule la seconde intégrale au second membre de cette équation.

Il vient :

$$\int_{\Gamma} q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS = 0. \quad (3.63)$$

Soit :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(q \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = 0. \quad (3.64)$$

D'où :

$$\int_{\Omega} q \phi \frac{\partial p}{\partial t} dV + p_0 \int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} q \cdot \vec{\nabla} p dV + p_0 \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV = 0. \quad (3.65)$$

Discrétisation en espace On utilise la discrétisation par éléments finis :

$$p = [N]\{p\}, \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = [N] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\}, \quad (3.67)$$

$$\vec{\nabla} p = [B]\{p\}, \quad (3.68)$$

$$q = \{q\}^T [N]^T, \quad (3.69)$$

$$\vec{\nabla} q = \{q\}^T [B]^T, \quad (3.70)$$

où $[N(\vec{x})]$ est la matrice d'interpolation, $\{p(t)\}$ le vecteur des pressions nodales et $[B(\vec{x})]$ la matrice des gradients ; pour aboutir à :

$$\int_{\Omega} \phi \{q\}^T [N]^T [N] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} dV + p_0 \int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \{q\}^T [B]^T [B] \{p\} dV + p_0 \int_{\Omega} \{q\}^T [N]^T \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV = 0, \quad (3.71)$$

soit,

$$\{q\}^T \left[\int_{\Omega} \phi [N]^T [N] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} dV + p_0 \int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} [B]^T [B] \{p\} dV + p_0 \int_{\Omega} [N]^T \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV \right] = 0. \quad (3.72)$$

Posons,

$$[C] = \int_{\Omega} \phi [N]^T [N] dV, \quad (3.73)$$

$$[K] = p_0 \int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} [B]^T [B] dV, \quad (3.74)$$

$$\{f\} = -p_0 \int_{\Omega} [N]^T \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV, \quad (3.75)$$

où, par analogie avec la thermique, $[C]$ est la matrice de capacité, $[K]$ la matrice conductivité et f est le vecteur des flux externes.

On obtient finalement :

$$\{q\}^T \left([C] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} + [K] \{p\} - \{f\} \right) = 0. \quad (3.76)$$

Cette dernière équation doit être vraie pour toute fonction test q . On a alors :

$$[C] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} + [K] \{p\} - \{f\} = 0. \quad (3.77)$$

Intégration en temps La θ -méthode, appliquée à l'équation (3.77) nous donne :

$$[C]^n \frac{1}{\Delta t} (\{p\}^{n+1} - \{p\}^n) + [K]^m ((1 - \theta)\{p\}^n + \theta\{p\}^{n+1}) = \{f\}^m, \quad (3.78)$$

où les exposants représentent l'instant où la quantité est évaluée :

- n : pour le début du pas de temps,
- $n + 1$: pour la fin du pas de temps,

– m : pour l'instant milieu $t^m = (1 - \theta)t^n + \theta t^{n+1}$.

Contrairement à la thermique, dans notre cas la matrice de capacité est implicitement dépendante du temps (par l'intermédiaire de la porosité). Il faut donc choisir l'instant où elle est évaluée. On choisit un schéma semi-implicite en évaluant la matrice de capacité au début du pas de temps.

On réécrit cette équation sous la forme d'un système linéaire où le vecteur inconnu est l'incrément de pression entre le début et la fin du pas de temps :

$$([C]^n + \theta \Delta t [K]^m) (\{p\}^{n+1} - \{p\}^n) = \Delta t (\{f\}^m - [K]^m \{p\}^n). \quad (3.79)$$

Pour le calcul de la matrice de conductivité, on choisit d'utiliser la méthode du point milieu, *i.e.* calculer $[K]^m$ à partir de $\{\phi\}^m = (1 - \theta)\{\phi\}^n + \theta\{\phi\}^{n+1}$ plutôt que la méthode des trapèzes, *i.e.* calculer $[K]^n$ à partir de $\{\phi\}^n$ et $[K]^{n+1}$ à partir de $\{\phi\}^{n+1}$ pour obtenir $[K]^m = (1 - \theta)[K]^n + \theta[K]^{n+1}$. En effet, il est reconnu que la méthode du point milieu est plus adaptée pour le traitement des non-linéarités, comme celles apparaissant dans l'expression de $\kappa(\phi)$.

Ce problème ne se pose pas pour le calcul du flux externe $\{f\}^m$, puisque l'opérateur divergence est linéaire. On choisit cependant d'utiliser la méthode du point milieu (calcul de $\{f\}^m$ à partir de $\vec{u}_s^m = (1 - \theta)\vec{u}_s^n + \theta\vec{u}_s^{n+1}$) pour des raisons de commodité.

Implémentation La plate-forme LMGC90 dispose d'un module de résolution de problèmes de thermique instationnaire par la méthode des éléments finis. Il permet de calculer la matrice de capacité $[C]$, à partir d'un champ de capacité thermique spécifique, et la matrice de conductivité $[K]$, à partir d'un champ de conductivité thermique, ces deux champs étant définis aux points de Gauss. Il suffit donc de lui spécifier que le champ de porosité au début du pas de temps ϕ^n et le champ $p_0\kappa(\phi^m)/\mu$ doivent être utilisés respectivement comme champ de capacité thermique spécifique et champ de conductivité thermique, pour qu'il puisse calculer les matrices $[C]^n$ et $[K]^m$.

Il reste à résoudre le problème du flux externe $\{f\}$. Ce module sait aussi assembler le flux externe $\{f\}$ à partir de flux externes élémentaires. On va donc décrire ici comment calculer les flux externes élémentaires. On doit pour cela être capable de calculer la divergence de \vec{u}_s aux points de Gauss.

Soit e un élément du maillage. La matrice d'interpolation associée à l'élément e est $[N_e(\vec{x})] = [N_e^1(\vec{x}), \dots, N_e^{N_n(e)}(\vec{x})]$, où $N_e^i(\vec{x})$ est la fonction de forme associée au nœud i et $N_n(e)$ est le nombre de nœuds de e . Soit \vec{x} un point dans l'élément e . On a par définition :

$$\vec{u}_s(\vec{x}) = \sum_i N_e^i(\vec{x}) \vec{u}_s^i, \quad (3.80)$$

où \vec{u}_s^i est la vitesse solide au nœud i et la somme est prise sur les nœuds i de l'élément e . On a, en dérivant par rapport à la position :

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = \sum_i u_j^i \frac{\partial N_e^i}{\partial x_j}, \quad (3.81)$$

où u_j et u_j^i sont respectivement la composante j des vecteurs vitesse \vec{u}_s et \vec{u}_s^i . D'où :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s = \sum_i \sum_{j=1}^{Dim} u_j^i \frac{\partial N_e^i}{\partial x_j}, \quad (3.82)$$

où Dim est le nombre de dimensions spatiales (*i.e.* $Dim = 2$ dans le cas bidimensionnel et $Dim = 3$ dans le cas tridimensionnel). La matrice des gradients élémentaire est définie par :

$$[B_e] = \left(\frac{\partial N_e^i}{\partial x_j} \right)_{ji} = [\{B_e\}^1, \dots, \{B_e\}^{N_n(e)}], \quad (3.83)$$

où $\{B_e\}^i = \left(\frac{\partial N_e^i}{\partial x_j} \right)_j$. On obtient alors :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s = \sum_i \vec{u}_s^i \cdot \{B_e\}^i. \quad (3.84)$$

Le vecteur flux externe élémentaire s'écrit :

$$\{f_e\} = -p_0 \int_{\Omega_e} [N_e]^T \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV_e, \quad (3.85)$$

où Ω_e est le domaine correspondant à l'élément e . On a :

$$\Omega = \bigcup_e \Omega_e, \quad (3.86)$$

où l'union est prise sur tous les éléments e du maillage. On effectue un changement de variable pour écrire l'intégrale sur l'élément de référence Ω_0 . On obtient

$$\{f_e\} = -p_0 \int_{\Omega_0} [N_e]^T \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s J_e dV_0, \quad (3.87)$$

où J_e est la matrice jacobienne de la transformation envoyant l'élément de référence Ω_0 sur l'élément réel Ω_e . On peut alors calculer le vecteur flux externe élémentaire $\{f_e\}$, en utilisant la formule de la quadrature de Gauss. La composante i du vecteur flux externe élémentaire, associée au nœud i de l'élément e s'écrit alors :

$$f_e^i = -p_0 \sum_{PG} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right) (\vec{x}^{PG}) N_i^e(\vec{x}^{PG}) J_e(\vec{x}^{PG}) w^{PG}, \quad (3.88)$$

où on somme sur les points de Gauss PG , et \vec{x}^{PG} et w^{PG} sont respectivement la position et le poids associé au point de Gauss PG .

3.3.1.2 Cas du gaz parfait : équation complète

Formulation variationnelle L'équation complète s'écrit :

$$\phi \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p \right) = \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) - p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \text{ dans } \Omega, \quad (3.89)$$

ou :

$$\phi \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p - \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s = 0, \text{ dans } \Omega. \quad (3.90)$$

Les conditions aux limites sont, en conservant les notations de la section 3.3.1.1 :

$$p = p_D, \text{ sur } \Gamma_D, \quad (3.91)$$

$$\vec{\nabla} p = \vec{0}, \text{ sur } \Gamma_N. \quad (3.92)$$

Soit $q \in \mathcal{D}(\Omega)$, une fonction qui s'annule sur Γ_D . En multipliant l'équation (3.90) par q et en l'intégrant sur tout le domaine, on obtient (formellement) :

$$\int_{\Omega} q \phi \frac{\partial p}{\partial t} dV + \int_{\Omega} q \phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p dV - \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV + \int_{\Omega} q p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV = 0. \quad (3.93)$$

En utilisant la relation :

$$\vec{\nabla} \cdot (f \vec{v}) = f \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f, \quad (3.94)$$

on obtient :

$$- \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \left(p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = \int_{\Omega} p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} q \cdot \vec{\nabla} p dV + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV. \quad (3.95)$$

On a, à l'aide du théorème de flux-divergence :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = \int_{\Gamma} q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS, \quad (3.96)$$

et par définition :

$$\int_{\Gamma} q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS = \int_{\Gamma_D} q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS + \int_{\Gamma_N} q p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p dS. \quad (3.97)$$

La fonction test q étant par définition nulle sur Γ_D , l'intégrale sur Γ_D apparaissant au second membre de l'équation (3.97) est nulle. De plus, par application des conditions aux limites, $\vec{\nabla} p$ est nul sur Γ_N , ce qui annule la seconde intégrale au second membre de cette équation.

Il vient :

$$\int_{\Gamma} qp \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} p \, dS = 0. \quad (3.98)$$

Soit :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(qp \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) \, dV = 0. \quad (3.99)$$

D'où :

$$\int_{\Omega} \phi q \frac{\partial p}{\partial t} \, dV + \int_{\Omega} p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} q \cdot \vec{\nabla} p \, dV + \int_{\Omega} q \left(\phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \right) \, dV = 0. \quad (3.100)$$

Discrétisation en espace On utilise la discrétisation par éléments finis et les notations présentées dans la section 3.3.1.1, pour aboutir à :

$$\int_{\Omega} \phi \{q\}^T [N]^T [N] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} \, dV + \int_{\Omega} p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \{q\}^T [B]^T [B] \{p\} \, dV + \int_{\Omega} \{q\}^T [N]^T \left(\phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \right) \, dV = 0, \quad (3.101)$$

soit,

$$\{q\}^T \left[\int_{\Omega} \phi [N]^T [N] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} \, dV + \int_{\Omega} p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} [B]^T [B] \{p\} \, dV + \int_{\Omega} [N]^T \left(\phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \right) \, dV \right] = 0. \quad (3.102)$$

Posons,

$$[C] = \int_{\Omega} \phi [N]^T [N] \, dV, \quad (3.103)$$

$$[K] (\{p\}) = \int_{\Omega} p \frac{\kappa(\phi)}{\mu} [B]^T [B] \, dV, \quad (3.104)$$

$$\{f\} (\{p\}) = \int_{\Omega} [N]^T \left(\phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \right) \, dV, \quad (3.105)$$

où, par analogie avec la thermique, $[C]$ est la matrice de capacité, $[K]$ la matrice conductivité et $\{f\}$ est le vecteur des flux externes.

On obtient finalement :

$$\{q\}^T \left([C] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} + [K] (\{p\}) \{p\} - \{f\} (\{p\}) \right) = 0. \quad (3.106)$$

Cette dernière équation doit être vraie pour toute fonction test q . On a alors :

$$[C] \left\{ \frac{\partial p}{\partial t} \right\} + [K] (\{p\}) \{p\} - \{f\} (\{p\}) = 0. \quad (3.107)$$

Intégration en temps L'équation (3.107) est non-linéaire. La θ -méthode, appliquée à l'équation (3.107) nous donne, en conservant les notations de la section 3.3.1.1 :

$$[C]^n \frac{1}{\Delta t} (\{p\}^{n+1} - \{p\}^n) + [K]^m (\{p\}^m) ((1 - \theta)\{p\}^n + \theta\{p\}^{n+1}) = \{f\}^m (\{p\}^m). \quad (3.108)$$

Contrairement à la thermique, dans notre cas la matrice de capacité est implicitement dépendante du temps (par l'intermédiaire de la porosité). Il faut donc choisir l'instant où elle est évaluée. On choisit un schéma semi-implicite en évaluant la matrice de capacité au début du pas de temps.

Cette équation est non-linéaire. On s'affranchit de cette difficulté en explicitant le champ de pression dans les termes non-linéaires. On obtient :

$$[C]^n \frac{1}{\Delta t} (\{p\}^{n+1} - \{p\}^n) + [K]^m (\{p\}^n) ((1 - \theta)\{p\}^n + \theta\{p\}^{n+1}) = \{f\}^m (\{p\}^n). \quad (3.109)$$

De plus, pour arriver à la même équation en discrétisant d'abord en temps, puis en espace, on utilise le champ de porosité au début du pas de temps, dans le second membre. On a finalement :

$$[C]^n = \int_{\Omega} \phi^n [N]^T [N] dV, \quad (3.110)$$

$$[K]^m (\{p\}^n) = \int_{\Omega} p^n \frac{\kappa(\phi^m)}{\mu} [B]^T [B] dV, \quad (3.111)$$

$$\{f\}^m (\{p\}^n) = \int_{\Omega} [N]^T \left(\phi^n \vec{u}_s^m \cdot \vec{\nabla} p^n + p^n \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s^m \right) dV. \quad (3.112)$$

On réécrit cette équation sous la forme d'un système linéaire où le vecteur inconnu est l'incrément de pression entre le début et la fin du pas de temps :

$$([C]^n + \theta \Delta t [K]^m (\{p\}^n)) (\{p\}^{n+1} - \{p\}^n) = \Delta t (\{f\}^m (\{p\}^n) - [K]^m (\{p\}^n) \{p\}^n). \quad (3.113)$$

Pour le calcul de la matrice de conductivité, on choisit d'utiliser la méthode du point milieu, *i.e.* calculer $[K]^m$ à partir de $\{\phi\}^m = (1 - \theta)\{\phi\}^n + \theta\{\phi\}^{n+1}$ plutôt que la méthode des trapèzes, *i.e.* calculer $[K]^n$ à partir de $\{\phi\}^n$ et $[K]^{n+1}$ à partir de $\{\phi\}^{n+1}$ pour obtenir $[K]^m = (1 - \theta)[K]^n + \theta[K]^{n+1}$. En effet, il est reconnu que la méthode du point milieu est plus adaptée pour le traitement des non-linéarités, comme celles apparaissant dans l'expression de $\kappa(\phi)$.

Ce problème ne se pose pas pour le calcul du flux externe $\{f\}^m$, puisque l'opérateur divergence est linéaire. On choisit cependant d'utiliser la méthode du point milieu (calcul de $\{f\}^m$ à partir de $\vec{u}^m = (1 - \theta)\vec{u}^n + \theta\vec{u}^{n+1}$) pour des raisons de commodité.

Implémentation On a vu à la section 3.3.1.1 comment calculer, la matrice de capacité $[C]^n$, la matrice de conductivité $[K]^m$ et le terme de Biot, pour le cas de l'équation linéarisée, avec la plate-forme LMGC90.

Dans le cas de l'équation complète, il faut modifier le calcul de la matrice de conductivité $[K]^m(\{p^n\})$, en utilisant le champ $p^n \kappa(\phi^m)/\mu$ comme champ de conductivité thermique et calculer le terme d'advection apparaissant au second membre.

On va maintenant décrire comment calculer le terme d'advection pour le calcul des flux externes élémentaires. Soit \vec{v} un vecteur vitesse évalué aux nœuds du maillage. Soit e un élément du maillage et \vec{x} un point dans l'élément e . On a par définition :

$$\vec{v}(\vec{x}) = \sum_i N_e^i(\vec{x}) \vec{v}^i, \quad (3.114)$$

où la somme est prise sur les nœuds i de l'élément e et \vec{v}^i est la vitesse au nœud i , et

$$\vec{\nabla} p(\vec{x}) = [B_e](\vec{x}) \{p\}. \quad (3.115)$$

On a donc :

$$\left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} p \right) (\vec{x}) = \left(\sum_i N_e^i(\vec{x}) \vec{v}^i \right) \cdot ([B_e](\vec{x}) \{p\}). \quad (3.116)$$

Il suffit d'appliquer cette méthode au champ $\vec{v} = \phi^n \vec{u}_s^m$ défini par :

$$\vec{v}^i = \phi^{i,n} \vec{u}_s^{i,m}, \quad (3.117)$$

pour tout nœud du maillage i , où $\phi^{i,n}$ est la porosité au nœud i au début du pas de temps et $\vec{u}_s^{i,m}$ est la vitesse au nœud i à l'instant milieu, pour obtenir le terme d'advection apparaissant dans le second membre.

On peut alors calculer le vecteur flux externe élémentaire $\{f_e\}$. On a pour la composante i correspondant au nœud i de l'élément e :

$$f_e^i = \sum_{PG} \left(p^{PG} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \right) (\vec{x}^{PG}) + \left(\phi \vec{u}_s \cdot \vec{\nabla} p \right) (\vec{x}^{PG}) \right) N_e^i(\vec{x}^{PG}) J_e(\vec{x}^{PG}) w^{PG}, \quad (3.118)$$

où on somme sur les points de Gauss PG et p^{PG} est la pression, au point de Gauss PG , obtenue par interpolation :

$$p^{PG} = [N^e(\vec{x}^{PG})] \{p\}. \quad (3.119)$$

3.3.1.3 Cas du fluide incompressible

Formulation variationnelle L'équation s'écrit :

$$-\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s, \text{ dans } \Omega. \quad (3.120)$$

Les conditions aux limites sont, en conservant les notations de la section 3.3.1.1 :

$$p = p_D, \text{ sur } \Gamma_D, \quad (3.121)$$

$$\vec{\nabla} p = \vec{0}, \text{ sur } \Gamma_N. \quad (3.122)$$

Soit $q \in \mathcal{D}(\Omega)$, une fonction qui s'annule sur Γ_D . Le calcul de la formulation variationnelle correspondante à l'équation (3.120) est analogue au calcul de la formulation variationnelle correspondante à l'équation d'évolution de la pression dans le cas d'un gaz parfait, linéarisée (3.55). On aboutit à la formulation variationnelle suivante :

$$\int_{\Omega} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} q \cdot \vec{\nabla} p \, dV = - \int_{\Omega} q \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s \, dV. \quad (3.123)$$

Discrétisation en espace De même, en utilisant la discrétisation par éléments finis et en conservant les définitions du vecteur $\{p\}$, de la matrice $[K]$ et du vecteur $\{f\}$ présentées dans la section 3.3.1.1, on aboutit à l'équation suivante :

$$[K]\{p\} = \{f\}. \quad (3.124)$$

Discrétisation en temps La donnée d'un champ de porosité et d'un champ de vitesse barycentrique des particules à un instant donné suffit à déterminer un champ de pression au même instant. La discrétisation en temps de l'équation (3.124) est donc, en utilisant les notations précédentes :

$$[K]^{n+1}\{p\}^{n+1} = \{f\}^{n+1}. \quad (3.125)$$

La résolution de ce système d'équations linéaires dépend des conditions aux limites choisies.

Conditions de Dirichlet ou Dirichlet-Neumann Dans ce cas $\Gamma_D \neq \emptyset$ et l'équation (3.38) admet toujours une solution unique. Le système linéaire qui en découle admet donc lui aussi une solution unique.

Conditions de Neumann Dans ce cas $\Gamma = \Gamma_N$ et l'équation (3.38) admet une infinité de solutions. En effet, si p est une solution, $p + c$, où c est une constante est encore solution. Le système linéaire qui découle de cette équation admet lui aussi une infinité de solutions. Le champ dont on a réellement besoin est le champ des fluctuations de la pression $\vec{\nabla} p$. Il suffit donc de fixer $\langle p \rangle$ la moyenne de p pour retrouver une solution unique. Cela se traduit de façon analytique par :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} p \, dV = \langle p \rangle. \quad (3.126)$$

De plus, le champ \vec{u}_s doit satisfaire une équation de compatibilité. En intégrant l'équation (3.38) sur Ω , on obtient :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \right) dV = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_s dV, \quad (3.127)$$

qui donne, après utilisation du théorème de flux-divergence :

$$\int_{\Gamma} \frac{\kappa(\phi)}{\mu} \vec{\nabla} p \cdot \vec{n} dS = \int_{\Gamma} \vec{u}_s \cdot \vec{n} dS. \quad (3.128)$$

Le gradient de pression étant nul sur tout le bord du domaine, on a finalement :

$$\int_{\Gamma} \vec{u}_s \cdot \vec{n} dS = 0. \quad (3.129)$$

Cette équation traduit le fait que pour que le champ de vitesse fluide soit incompressible, et donc ait un flux nul à travers la surface du domaine, sachant que la vitesse du fluide par rapport au solide a un flux nul, le champ de vitesse solide doit lui aussi avoir un flux nul.

Le champ \vec{u}_s étant obtenu par prise de moyenne, on ne peut pas assurer la validité de l'équation de compatibilité dans le cas général. On peut cependant penser qu'elle sera vérifiée dans le cas où les conditions limites pour le granulaire sont bi-périodiques.

Dans la suite, on suppose que l'équation de compatibilité (3.129) est vérifiée.

Première implémentation : Méthode des éléments finis Imposer la valeur moyenne de la pression revient à imposer :

$$\int_{\Omega} p dV = |\Omega| \langle p \rangle. \quad (3.130)$$

En utilisant la discrétisation par éléments finis, on obtient :

$$\int_{\Omega} p dV = \int_{\Omega} [N] \{p\} dV = \left(\int_{\Omega} [N] dV \right) \{p\}. \quad (3.131)$$

Imposer cette condition revient donc à ajouter une nouvelle ligne à la matrice du système :

$$\left(\int_{\Omega} [N] dV \right) \{p\} = |\Omega| \langle p \rangle. \quad (3.132)$$

Second membre On a, par définition :

$$|\Omega| = \int_{\Omega} dV. \quad (3.133)$$

Dans le cadre de la discrétisation en espace par la méthode des éléments finis, on a :

$$|\Omega| = \sum_e \int_{\Omega_e} dV_e. \quad (3.134)$$

En ramenant l'intégration sur chaque élément à l'intégration sur l'élément de référence Ω_0 , on obtient :

$$|\Omega| = \sum_e \int_{\Omega_0} J_e dV_0, \quad (3.135)$$

où J_e est la jacobienne de la transformation envoyant Ω_0 sur Ω_e . Enfin, en utilisant la formule de la quadrature de Gauss, on a :

$$|\Omega| = \sum_e \sum_{PG} J_e(\vec{x}^{PG}) w^{PG}. \quad (3.136)$$

Equation La ligne supplémentaire s'obtient par assemblage de vecteurs élémentaires :

$$\int_{\Omega} [N] dV = \bigcup_e \int_{\Omega_e} [N_e] dV. \quad (3.137)$$

En se ramenant à une intégration sur l'élément de référence et en utilisant la formule de la quadrature de Gauss, on a finalement :

$$\int_{\Omega} [N] dV = \bigcup_e \sum_{PG} J_e(\vec{x}^{PG}) w^{PG} [N_e](\vec{x}^{PG}). \quad (3.138)$$

Seconde implémentation : Méthode probabiliste La méthode précédente consistait à discrétiser par la méthode des éléments finis l'équation supplémentaire imposant la moyenne de la pression. Une façon plus rapide de procéder est d'écrire la condition imposant la moyenne de la pression aux nœuds :

$$\sum_{i=1}^{N_n} p^i = N_n \langle p \rangle, \quad (3.139)$$

où N_n est le nombre de nœuds du maillage.

La loi des grands nombres prédit que :

$$\lim_{N_n \rightarrow \infty} \frac{1}{N_n} \sum_{i=1}^{N_n} p_i = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} p dV. \quad (3.140)$$

Cette écriture fournit directement une équation supplémentaire à ajouter au système linéaire.

Résolution du système linéaire Quelle que soit la méthode utilisée pour discrétiser la condition imposant la valeur moyenne de la pression, on aboutit à un système à N_n inconnues et $N_n + 1$ équations. On résout ce système par la méthode des moindres carrés linéaires. On peut pour cela utiliser la fonction dédiée de la bibliothèque LAPACK [4, 61]. Le problème continu admettant une solution unique, le résidu des moindres carrés est nul.

3.3.2 Changement d'échelle

L'équation d'évolution de la pression est écrite à une échelle plus grande que celle des particules. Il faut donc être capable de relever les informations sur la cinématique des particules à l'échelle du fluide et projeter les forces exercées par le fluide sur les particules à leur échelle.

3.3.2.1 Opérateurs de relèvement et de projection

On présente dans cette section des opérateurs de relèvement et de projection inspirés des travaux de Dureisseix et Bavestrello sur le transfert d'information entre deux maillages éléments finis incompatibles [29].

Relèvement Soit $\{F_C\}$ un champ (scalaire ou vectoriel) défini sur un ensemble de points cibles.

Soit j un point cible, \vec{x}_C^j sa position et $e(j)$ l'élément du maillage qui le contient, soit :

$$\vec{x}_C^j \in \Omega_{e(j)}, \quad (3.141)$$

où $\Omega_{e(j)}$ est le domaine correspondant à l'élément $e(j)$.

Soit $[N_{e(j)}(\vec{x})]$ la matrice d'interpolation élémentaire, associée à l'élément $e(j)$.

On répartit F_C^j sur les nœuds de l'élément $e(j)$ comme suit : soit i un nœud de l'élément $e(j)$, on lui associe $N_{e(j)}^i(\vec{x}_C^j)F_C^j$. On construit ainsi un vecteur élémentaire $\{F_{e(j)}\}$ associé à l'élément $e(j)$:

$$\{F_{e(j)}\} = [N_{e(j)}(\vec{x}_C^j)]^T F_C^j. \quad (3.142)$$

On construit le relèvement du champ défini sur les points cibles en assemblant les contributions de tous les points cibles j :

$$\{F\} = \bigcup_j \{F_{e(j)}\}. \quad (3.143)$$

On définit alors l'opérateur de relèvement $\mathcal{R} : \{F_C\} \mapsto \{F\}$.

Projection Soit $[F] = (F_e^i)_{1 \leq e \leq N_c, 1 \leq i \leq N_n(e)}$, où N_c est le nombre d'éléments, un champ défini par élément et par nœud.

Soit j un point cible, \vec{x}_C^j sa position et $e(j)$ l'élément du maillage qui le contient.

On projette le champ $[F]$ sur le point cible j comme suit :

$$F_j^C = \sum_{i=1}^{N_n(e(j))} N_{e(j)}^i(\vec{x}_C^j) F_{e(j)}^i. \quad (3.144)$$

On définit alors l'opérateur de projection $\mathcal{P} : [F] \mapsto \{F^C\}$.

3.3.2.2 Passage des particules au fluide

Porosité Le calcul de la porosité ϕ passe par le calcul de la compacité c . En définissant l'ensemble des centres d'inertie des particules comme notre ensemble de points cibles, on peut utiliser les deux opérateurs définis précédemment.

On utilise l'opérateur de relèvement pour répartir le volume des particules aux nœuds du maillage :

$$\{V_s\} = \mathcal{R}(\{V\}), \quad (3.145)$$

où $\{V\} = (V^j)_j$ est un vecteur concaténant les volumes de toutes les particules.

Pour chaque élément, on calcule une part de son volume à attribuer à chacun de ses nœuds. Soit un nœud i d'un élément e , la part du volume de l'élément à attribuer au nœud i , notée V_e^i est donnée par

$$V_e^i = \int_{\Omega_e} N_e^i dV. \quad (3.146)$$

En ramenant l'intégration sur l'élément réel Ω_e à l'intégration sur l'élément de référence Ω_0 et en utilisant la formule de la quadrature de Gauss, on a finalement :

$$V_e^i = \sum_{PG} N_e^i(\vec{x}^{PG}) J_e(\vec{x}^{PG}) w^{PG}. \quad (3.147)$$

On construit ainsi un vecteur élémentaire $\{V_e\} = (V_e^i)_i$ associé à l'élément e .

En assemblant ces parts de volumes élémentaires, on obtient une répartition du volume du domaine aux nœuds :

$$\{V_T\} = \bigcup_e \{V_e\}. \quad (3.148)$$

On peut alors calculer la compacité pour un nœud du maillage i :

$$c_i = \frac{V_s^i}{V_T^i}. \quad (3.149)$$

On en déduit la porosité au nœud i :

$$\phi_i = 1 - c_i. \quad (3.150)$$

Vitesse moyenne des particules On utilise l'opérateur de relèvement pour répartir les quantités de mouvement des particules aux nœuds du maillage :

$$\left\{ \vec{j}_s \right\} = \mathcal{R}(\{m \vec{v}\}), \quad (3.151)$$

où le vecteur $\{m \vec{v}\} = (m^j \vec{v}^j)_j$ concatène les quantités de mouvement des particules.

On utilise le même opérateur pour répartir les masses des particules aux nœuds :

$$\{m_s\} = \mathcal{R}(\{m\}), \quad (3.152)$$

où le vecteur $\{m\} = (m^j)_j$ concatène les masses des particules.

On obtient alors la vitesse moyennée pour un nœud du maillage i par :

$$\vec{u}_s^i = \frac{1}{m_s^i} \vec{j}_s^i. \quad (3.153)$$

3.3.2.3 Passage du fluide aux particules

On utilise les pressions nodales pour calculer le champ de gradient de pression défini par nœud et par élément $[\vec{\nabla} p]$.

On corrige ce champ en multipliant en chaque nœud du maillage i sa valeur par $1/(1 - \phi_i)$, si $\phi_i < \phi_{max}$ et $1/(1 - \phi_{max})$ sinon. On obtient le champ défini par nœud et par élément $[1/(1 - \phi) \vec{\nabla} p]$.

On le projette sur les particules pour obtenir la contribution du fluide à la résultante de la force exercée par le fluide sur les particules :

$$\left\{ \vec{F}_{f \rightarrow s} \right\} = \mathcal{P} \left(\left[1/(1 - \phi) \vec{\nabla} p \right] \right). \quad (3.154)$$

Il reste à multiplier la quantité projetée sur chaque particule par son volume et à prendre son opposé pour obtenir la résultante de la force exercée par le fluide à appliquer à la particule j :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s}^j = -V^j \vec{F}_{f \rightarrow s}^j. \quad (3.155)$$

3.3.2.4 Implémentation

Les calculs de champ nécessaires pour réaliser les étapes de changement d'échelle : passages du fluide aux particules et des particules au fluide, demandent d'implémenter les opérateurs de projection et de relèvement définis dans la section 3.3.2.1. Ce travail avait déjà été réalisé par D. Dureisseix, qui nous a fourni sa bibliothèque de fonctions dédiées, écrite en Fortran (77 et 90).

On peut classer ces fonctions en deux catégories. Une première classe de fonction permet à la fois, de détecter dans quel élément du maillage (discrétisant le domaine fluide) se trouve chaque point cible (les centres d'inertie des particules) et de calculer la valeur de la fonction de forme en chaque nœud. A partir de ces informations, la seconde classe est capable de réaliser les opérations d'interpolation et d'assemblage nécessaires à la programmation des opérateurs de projection et de relèvement.

3.3.3 Cas bidimensionnel

Les équations du modèle ont été écrites dans un cadre tridimensionnel. De même, la résolution de l'équation d'évolution de la pression et le changement d'échelle sont *a priori* écrits dans un cadre tridimensionnel. On va maintenant voir comment adapter le modèle et la méthode numérique au cas bidimensionnel.

Dans le cas bidimensionnel, les équations du modèle restent valides si on remplace les volumes, utilisés dans le cas tridimensionnel, par les surfaces, utilisées dans le cas bidimensionnel, multipliées par une longueur unitaire. Le seul réel problème provient de l'étape de changement d'échelle permettant de calculer le champ de porosité à partir des volumes des particules. La règle précédente, garantissant la validité des équations lors du passage au cas bidimensionnel, revient à considérer un empilement de disques, comme une coupe d'un empilement de cylindres, dans le cas tridimensionnel. Dans le cadre de ce modèle, le gaz est piégé entre les particules dans le cas d'un empilement compact. On ne peut alors plus considérer l'écoulement du fluide entre les particules comme un écoulement dans un milieu poreux.

On va donc, au moins du point de vue du calcul de la porosité, considérer l'empilement de disques, du cas bidimensionnel, comme la coupe d'un empilement de sphères, dans le cas tridimensionnel. Cette modélisation permet au gaz de contourner virtuellement les particules en exploitant un réseau de pores qui n'a de sens que dans un cadre tridimensionnel. Ce choix traduit d'un point de vue de la méthode numérique par une correction de la porosité obtenue par la méthode décrite dans la section 3.3.2.2. On applique une règle qui permet de transformer la porosité obtenue pour un disque inscrit dans un carré ($1 - \pi/4$) en la porosité obtenue pour une sphère inscrite dans un cube ($1 - \pi/6$) :

$$\phi = \frac{2\phi_{2D} + 1}{3}, \quad (3.156)$$

où ϕ_{2D} est la porosité obtenue comme un rapport de surfaces, dans le cas bidimensionnel, et ϕ

est la porosité utilisée par le calcul, correspondant au cas tridimensionnel.

3.3.4 Résolution du problème couplé

Les sections précédentes ont expliqué comment résoudre la loi d'évolution de la pression, connaissant des champs représentant la phase solide et comment les calculer à partir des positions et des vitesses des particules. La résolution de la dynamique de la phase granulaire, connaissant la force exercée par le fluide sur chaque particule, par la méthode NSCD, a été expliquée dans le chapitre d'introduction. On va voir maintenant comment résoudre le problème de couplage, *i.e.* comment calculer la cinématique des particules et le champ de force exercé par le fluide à la fin du pas de temps. On choisit d'utiliser une méthode de coupage faible : le point fixe.

L'algorithme de résolution varie selon le modèle utilisé pour le fluide. Cependant, les données et la phase d'initialisation sont les mêmes dans tous les cas :

données : $\{p\}(t=0)$, $\vec{v}(t=0)$, $\vec{x}(t=0)$, $\kappa(\phi)$, μ

initialisation de la boucle en temps : $n=0$

- $\{p\}^n = p(t=0)$, $\vec{v}^n = \vec{v}(t=0)$, $\vec{x}^n = \vec{x}(t=0)$
- calcul des poids pour les interpolations : $(N(\vec{x}^{j,n}))_j$
- calcul de la porosité initiale : $\{\phi\}^n = f(\vec{x}^n)$
- calcul de la vitesse barycentrique des particules, initiale : $\{\vec{u}_s\}^n = f(\vec{x}^n, \vec{v}^n)$
- calcul des résultantes des forces exercées par le fluide sur les particules initiales : $\vec{F}_{f \rightarrow s}^n = f(\vec{x}^n, \{\phi\}^n, \{p\}^n)$

Dans cette écriture, l'exposant n indique que les quantités sont évaluées au début du pas de temps, et les vecteurs position des particules $\vec{x}^n = (\vec{x}^{j,n})_j$ et vitesse des particules $\vec{v}^n = (\vec{v}^{j,n})_j$ concatènent respectivement les positions et les vitesses de toutes les particules, au début du pas de temps.

On va maintenant présenter les différentes boucles en temps obtenues pour les différents modèles pour le fluide. Dans chaque cas on voit apparaître une boucle de point fixe, l'exposant $n+1$, k indique les quantités évaluées la fin du pas de temps, au k -ème itéré de l'algorithme de point fixe.

3.3.4.1 Cas d'un gaz parfait

boucle en temps :

- détection du contact
- calcul des poids pour les interpolations : $(N(\vec{x}^{j,n}))_j$
- boucle de point fixe :

- initialisation de la boucle de point fixe : $k = 0$: $\vec{v}^{n+1,k} = \vec{v}^n$
- prédiction des positions des centres d'inertie des particules à la fin du pas de temps :
 $\vec{x}^{n+1,k} = \vec{x}^n + \Delta t \left((1 - \theta) \vec{v}^n + \theta \vec{v}^{n+1,k} \right)$
- calcul de la porosité à la fin du pas de temps : $\{\phi\}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k})$
- calcul de la vitesse barycentrique des particules à la fin du pas de temps :
 $\{\vec{u}_s\}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k}, \vec{v}^{n+1,k})$
- calcul de la pression à la fin du pas de temps :
 - calcul des matrices élémentaires à partir :
 - du champ de “capacité thermique spécifique” ϕ^n
 - du champ de “conductivité thermique” :
 $p_0 \kappa(\phi^m) / \mu$, dans le cas de l'équation linéarisée
 $p^n \kappa(\phi^m) / \mu$, dans le cas de l'équation complète
 - du champ de vitesse barycentrique des particules \vec{u}_s^m
 - calcul des vecteurs des flux externe élémentaires, à partir de p^n , ϕ^n et \vec{u}_s^m
 - assemblage du système linéaire
 - calcul de l'incrément de pression sur le pas de temps, Δp , par inversion du système linéaire
 - calcul de la pression à la fin du pas de temps : $\{p\}^{n+1,k} = \{p\}^n + \Delta p$
- calcul des résultantes des forces exercées par le fluide sur les particules à la fin du pas de temps : $\vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k}, \{\phi\}^{n+1,k}, \{p\}^{n+1,k})$
- calcul des nouvelles vitesses à la fin du pas de temps :
 - calcul des vitesses libres :
 $\vec{v}_{libre} = \vec{v}^n + \Delta t \mathbb{M}^{-1} \left[\theta \vec{F}_{ext}^{n+1,k} + (1 - \theta) \vec{F}_{ext}^n \right]$
 $\vec{\omega}_{libre} = \vec{\omega}^n + \Delta t \mathbb{J}^{-1} \left[\vec{M}_{rot}^n + \theta \vec{M}_{ext}^{n+1} + (1 - \theta) \vec{M}_{ext}^n \right]$
 - résolution du contact : calcul des impulsions \vec{p} et \vec{M}_p
 - calcul des vitesses à la fin du pas de temps :
 $\vec{v}^{n+1,k+1} = \vec{v}_{libre} + \mathbb{M}^{-1} \vec{p}$
 $\vec{\omega}^{n+1,k+1} = \vec{\omega}_{libre} + \mathbb{J}^{-1} \vec{M}_p$
- calcul des positions des centres d'inertie des particules à la fin du pas de temps :
 $\vec{x}^{n+1,k+1} = \vec{x}^n + \Delta t \left((1 - \theta) \vec{v}^n + \theta \vec{v}^{n+1,k+1} \right)$
- si $\|\vec{v}^{n+1,k+1} - \vec{v}^{n+1,k}\| < \epsilon$, alors on a convergé : STOP
- sinon $k \leftarrow k + 1$
- on a obtenu la nouvelle cinématique à la fin du pas de temps :

$$\begin{cases} \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^{n+1,k+1} \\ \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n+1,k+1} \end{cases}$$
- en sortant du point fixe, on a obtenu le nouveau champ de porosité, le nouveau champ de vitesse barycentrique des particules et les nouvelles résultantes des forces exercées par le fluide sur les particules :

$$\begin{cases} \{\phi\}^{n+1} = \{\phi\}^{n+1,k} \\ \{\vec{u}_s\}^{n+1} = \{\vec{u}_s\}^{n+1,k} \\ \vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1} = \vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1,k} \end{cases}$$
- $n \leftarrow n + 1$

3.3.4.2 Cas d'un fluide incompressible

boucle en temps :

- détection du contact
- calcul des poids pour les interpolations : $(N(\vec{x}^{j,n}))_j$
- boucle de point fixe :
 - initialisation de la boucle de point fixe : $k = 0$: $\vec{v}^{n+1,k} = \vec{v}^n$
 - prédiction des positions des centres d'inertie des particules à la fin du pas de temps : $\vec{x}^{n+1,k} = \vec{x}^n + \Delta t ((1 - \theta) \vec{v}^n + \theta \vec{v}^{n+1,k})$
 - calcul de la porosité à la fin du pas de temps : $\{\phi\}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k})$
 - calcul de la vitesse barycentrique des particules à la fin du pas de temps : $\{\vec{u}_s\}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k}, \vec{v}^{n+1,k})$
 - calcul de la pression à la fin du pas de temps :
 - calcul des matrices élémentaires à partir :
 - du champ de "capacité thermique spécifique" $\phi^{n+1,k}$
 - du champ de "conductivité thermique" : $\kappa(\phi^{n+1,k})/\mu$
 - calcul des vecteurs des flux externe élémentaires, à partir de $\vec{u}^{n+1,k}$
 - assemblage du système linéaire
 - calcul de la pression à la fin du pas de temps, $\{p\}^{n+1,k}$, par inversion du système linéaire
 - calcul des résultantes des forces exercées par le fluide sur les particules à la fin du pas de temps : $\vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1,k} = f(\vec{x}^{n+1,k}, \{\phi\}^{n+1,k}, \{p\}^{n+1,k})$
 - calcul des nouvelles vitesses à la fin du pas de temps :
 - calcul des vitesses libres :

$$\vec{v}_{libre} = \vec{v}^n + \Delta t \mathbb{M}^{-1} \left[\theta \vec{F}_{ext}^{n+1,k} + (1 - \theta) \vec{F}_{ext}^n \right]$$

$$\vec{\omega}_{libre} = \vec{\omega}^n + \Delta t \mathbb{J}^{-1} \left[\vec{M}_{rot}^n + \theta \vec{M}_{ext}^{n+1} + (1 - \theta) \vec{M}_{ext}^n \right]$$
 - résolution du contact : calcul des impulsions \vec{p} et \vec{M}_p
 - calcul des vitesses à la fin du pas de temps :

$$\vec{v}^{n+1,k+1} = \vec{v}_{libre} + \mathbb{M}^{-1} \vec{p}$$

$$\vec{\omega}^{n+1,k+1} = \vec{\omega}_{libre} + \mathbb{J}^{-1} \vec{M}_p$$
 - calcul des positions des centres d'inertie des particules à la fin du pas de temps : $\vec{x}^{n+1,k+1} = \vec{x}^n + \Delta t ((1 - \theta) \vec{v}^n + \theta \vec{v}^{n+1,k+1})$
 - si $\|\vec{v}^{n+1,k+1} - \vec{v}^{n+1,k}\| < \epsilon$, alors on a convergé : STOP
 - sinon $k \leftarrow k + 1$
- on a obtenu la nouvelle cinématique à la fin du pas de temps :

$$\begin{cases} \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^{n+1,k+1} \\ \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n+1,k+1} \end{cases}$$
- en sortant du point fixe, on a obtenu le nouveau champ de porosité, le nouveau champ de vitesse barycentrique des particules et les nouvelles résultantes des forces exercées par le

fluide sur les particules :

$$\begin{cases} \{\phi\}^{n+1} = \{\phi\}^{n+1,k} \\ \{\vec{u}_s\}^{n+1} = \{\vec{u}_s\}^{n+1,k} \\ \vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1} = \vec{F}_{f \rightarrow s}^{n+1,k} \end{cases}$$

– $n \leftarrow n + 1$

3.3.4.3 Remarques sur l'écriture des algorithmes

Les algorithmes précédents sont écrits sous l'hypothèse suivante : le pas de temps est suffisamment petit pour que les déplacements des particules rendent les variations du repère de contact et des poids, utilisés pour réaliser les interpolations, négligeables, au cours du pas de temps. La détection du contact et le calcul des poids pour les interpolations (deux opérations coûteuses en termes de temps de calcul) sont alors réalisées une seule fois au début pas de temps.

On n'a néanmoins pas fait d'hypothèse sur la variation du champ de porosité au cours du pas de temps. Il est donc recalculé au cours de chaque itération de point fixe, ainsi que les matrices de capacité et de conductivité. En supposant que le pas de temps est suffisamment petit pour que les variations du champ de porosité au cours du pas de temps soient négligeables, on pourrait calculer ces matrices une seule fois par pas de temps et ainsi économiser le temps calcul consommé par l'étape d'assemblage.

A la fin de la boucle de point fixe, les champs de porosité et de vitesse de la phase solide sont donnés par les valeurs de l'itération de point fixe précédente. Ce choix est justifié par le fait que, par définition du critère d'arrêt, l'écart entre les valeurs obtenues à la fin de la boucle de point fixe et à l'itération précédente est négligeable. On pourrait choisir une méthode plus précise en calculant ces champs à partir de la cinématique à la fin du pas de temps. De même, on pourrait choisir de recalculer la pression à la fin du pas de temps à partir de ces champs et en déduire les résultantes des forces exercées par le fluide sur les particules à la fin du pas de temps.

3.3.5 Architecture du code

Dans l'architecture standard de LMGC90, la gestion de chaque type de corps et de chaque interaction possible entre deux corps fait l'objet d'un module spécifique. Afin de rendre le couplage possible, on a développé un nouveau module, ayant accès aux modules traitant respectivement les particules et le maillage fluide. La nouvelle configuration est présentée sur la FIG. 3.2.

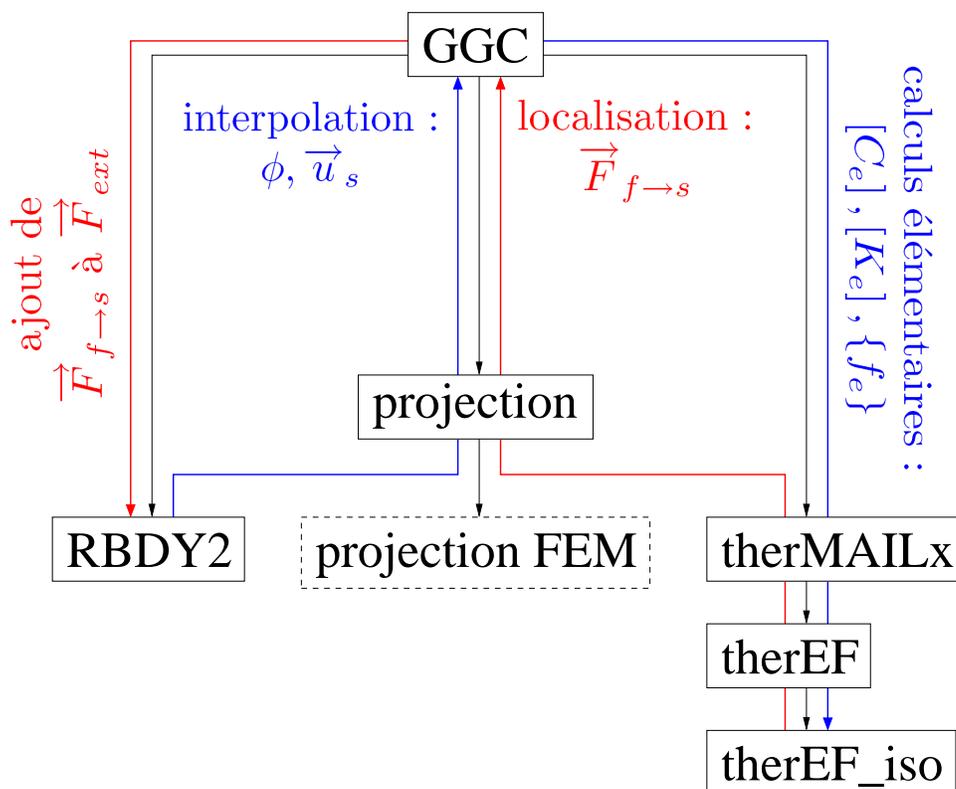


FIG. 3.2 – Portion de l'architecture de la plate-forme LMGC90 incluant le module GGC développé pour superviser le couplage gaz-grains. Les flèches noires représentent la visibilité entre modules, *i.e.* le module d'où part la flèche peut utiliser les fonctions du module pointé par la flèche. Les flèches bleues représentent les transferts de données entre les modules, correspondant aux étapes préliminaires au calcul du champ de pression à la fin du pas de temps. Les flèches rouges présentent les transferts de données entre les modules, correspondant aux étapes préliminaires au calcul de la force exercée par le fluide sur chaque particule.

3.3.5.1 Modules existants indépendamment du couplage

Le module RBDY2 gère les corps rigides, dans le cadre bidimensionnel. Il stocke la masse, l'inertie, la position et la vitesse de chaque corps, ainsi que les conditions aux limites associées à certains corps. Il fournit les fonctions permettant de calculer la nouvelle cinématique à la fin du pas de temps et aussi des procédures d'accès pour ajouter une force extérieure et récupérer la vitesse ou la position d'un corps.

Les modules therMAILx, therEF et therEF_iso sont dédiés aux calculs de thermique par éléments finis. Le premier gère l'assemblage et l'inversion du système linéaire à résoudre pour calculer le champ de température à la fin du pas de temps et fournit des procédures pour déposer un champ nodal aux points de Gauss. Les deux autres fournissent les fonctions permettant de réaliser les calculs élémentaires. Le module therEF permet de faire un "aiguillage", en fonction du type d'élément utilisé et le module therEF_iso réalise effectivement les calculs, dans le cas des éléments isoparamétriques. Les coordonnées des nœuds du maillage, la table de connectivité des éléments et les valeurs aux points de Gauss sont stockées dans un module générique, nommé MAILx, qui n'apparaît pas sur la FIG. 3.2, pour des raisons de simplicité. Dans le cadre du couplage, les champs de température deviennent des champs de pression. De nouvelles fonctions ont été développées permettant le calcul du gradient de température, *i.e.* du gradient de pression, par élément et par nœud, pour calculer la force exercée par le fluide sur chaque particule et le calcul d'un volume par élément et par nœud, pour calculer la porosité.

3.3.5.2 Modules développés pour réaliser le couplage

Le module GGC a été ajouté à l'architecture existante pour permettre le couplage. Il stocke les champs calculés lors de l'étape d'interpolation : les champs de porosité ϕ et de vitesse solide \vec{u}_s et lors de l'étape de localisation : la résultante de la force exercée par le fluide sur chaque particule $\vec{F}_{f \rightarrow s}$. Il a donc accès à certaines fonctions des modules RBDY2 et therMAILx, ainsi qu'à un autre nouveau module, nommé projection, qui fait l'interface avec la bibliothèque de fonctions fournie par D. Dureisseix (représentée par la boîte intitulée "projection FEM" sur la FIG. 3.2). Notez que seule une petite partie des possibilités de cette bibliothèque a été exploitée, puisqu'on ne considère que deux types d'éléments : les triangles à trois nœuds et les quadrangles à quatre nœuds. Le module GGC fournit des fonctions permettant de préparer le calcul mécanique (flèches rouges sur la FIG. 3.2). Il demande au module therMAILx de calculer les gradients de pression, par élément et par nœud, puis transmet la force exercée par le fluide sur chaque particule au module RBDY2, après avoir réalisé l'étape d'interpolation. De même, il procure des fonctions permettant de préparer le calcul du nouveau champ de pression (flèches bleues sur la FIG. 3.2). Il récupère les positions et les vitesses de chaque particule, par le module RBDY2, afin de calculer la porosité et le champ de vitesse solide lors de l'étape d'interpolation, puis demande au module therMAILx de déposer les champs de porosité et de conductivité thermique aux points de Gauss.

3.3.5.3 Mise en œuvre du couplage : module ChiPy

La plate-forme LMGC90 doit être vue comme une bibliothèque de fonctions, plutôt que comme un programme monolithique. En effet, contrairement à un logiciel commercial destiné à résoudre un type de problème particulier, LMGC90 est orienté vers la recherche et donc ouvert vers les couplages. Le pendant du programme principal du logiciel commercial est donc un script, écrit par l'utilisateur, qui appelle différentes fonctions de la bibliothèque fournie par LMGC90. Le langage de script utilisé pour ce travail est le Python [89], car il est déjà utilisé par d'autres codes de calcul, et permet ainsi des couplages, *e.g.* avec Code_Aster [20], le logiciel de simulation numérique en mécanique des structures développé par EDF. De plus il donne accès à des bibliothèques de fonctions orientées calcul numérique (*e.g.* NumPy [80]), et dispose d'outils permettant de générer un module Python à partir d'une bibliothèque de fonctions écrites dans un langage compilé (*e.g.* f2py, fourni par NumPy [80], pour le Fortran et SWIG [101] pour le C/C++). Le module Python regroupant l'ensemble des fonctions de la bibliothèque fournie par LMGC90 s'appelle ChiPy. Les modules RBDY2, therMAILx et GGC fournissent chacun, en plus des fonctions décrites ci-dessus (*cf.* 3.3.5.1 et 3.3.5.2), des fonctions permettant d'initialiser un nouveau pas de temps et de passer d'un pas à l'autre. De plus, le module GGC fournit des fonctions pour initialiser un itéré de point fixe, passer d'un itéré à l'autre et estimer la convergence de l'algorithme. Les boucles en temps et de point fixe sont donc gérées directement dans le script Python.

3.3.6 Discussion des méthodes

Trois méthodes de couplage gaz-grains ont été présentées, basées sur deux modèles différents pour le fluide. Dans le cas d'un gaz parfait, deux méthodes ont été dérivées, selon que l'on linéarise ou non l'équation d'évolution de la pression. Cette linéarisation fait intervenir la pression moyenne p_0 , qui devient un paramètre supplémentaire du modèle fixant l'échelle de temps. On pourrait donc prendre une valeur arbitraire, sans que cela ne joue sur la séquence des événements. Cependant, afin que le résultat d'une simulation représente la physique du problème, on doit choisir la valeur de p_0 vérifiant la loi des gaz parfaits, pour la température considérée. La méthode utilisant l'équation d'évolution de la pression semble alors plus séduisante, puisqu'elle ne fait pas intervenir de paramètre supplémentaire et utilise un échelle de temps fixée par la valeur instantanée de la pression. Néanmoins la non-linéarité de l'équation d'évolution de la pression sous-jacente demande de prendre plus de décisions arbitraires lors de la discrétisation temporelle. La méthode proposée en considérant un fluide incompressible a le double avantage de faire disparaître la dépendance de l'échelle de temps à la valeur de la pression et d'avoir une discrétisation temporelle naturelle. Pourtant, la disparition du temps de diffusion du gaz nécessite de contraindre la pression moyenne afin de garantir l'unicité du champ de pression, dans le cas où on considère une boîte fermée. On choisit finalement d'utiliser la méthode qui conserve la compressibilité du gaz et qui est basée sur une discrétisation temporelle la moins arbitraire possible : la méthode utilisant la linéarisation de l'équation d'évolution de la pression d'un gaz parfait. Ce faisant, on accepte de travailler sous l'hypothèse d'une pression dont

les fluctuations sont inférieures à la pression moyenne p_0 , elle-même fixée par la température constante considérée.

3.4 Test de sédimentation

La sédimentation de particules dans un gaz a été utilisée pour valider la méthode choisie (résolution de la linéarisation de loi d'évolution de la pression d'un gaz parfait) et étudier l'effet des paramètres. La sédimentation d'un milieu granulaire est un test difficile puisqu'il est le lieu de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Vinningland *et al.* [110] ont étudié cette instabilité expérimentalement, en analysant la sédimentation de billes de polystyrène dans de l'air (*cf.* FIG. 3.4). Ils l'ont aussi simulé numériquement à l'aide de la méthode développée par McNamara *et al.* [70, 7], en négligeant le frottement interparticulaire et avec les parois, la dissipation d'énergie étant prise en compte par le coefficient de restitution e_n .

On a simulé la sédimentation de particules circulaires frottantes à l'aide de la méthode de couplage gaz-grains choisie. La FIG. 3.3 montre un instantané de particules en train de sédimenter. Le système étudié est le même que dans les expériences de Vinningland *et al.* : une boîte de Hele-Shaw de dimensions $5,6 \times 8,6$ cm, contenant 160 000 particules de diamètre $d = 140 \mu\text{m}$ dont la masse volumique correspond à celle du verre ($\rho_s = 2500 \text{ kg.m}^{-3}$). Les parois de la boîte sont immobiles de sorte que les conditions aux limites pour le gaz sont définies par un gradient de pression nul sur tout le bord. Le fluide saturant la boîte est de l'air, en conditions normales *i.e.* à une température constante de 20°C . La pression moyenne est donc la pression atmosphérique ($p_0 = 10^5 \text{ Pa}$), la viscosité du fluide $\mu = 1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ et la masse volumique du fluide $\rho_f = 1,204 \text{ kg.m}^{-3}$. Le coefficient de frottement est 0,3 entre les particules et 0,5 avec les parois. On a utilisé la méthode NSCD et une loi de choc avec un coefficient de restitution normal $e_n = 0,05$ pour traiter la phase solide. Les particules sont disposées initialement dans une configuration rectangulaire (empilement local triangulaire) et remplissent la partie haute de la boîte. Ensuite, on les laisse tomber sous l'action de leur propre poids. La simulation a été réalisée avec un pas de temps $\Delta t = 5 \times 10^{-5} \text{ s}$ et des éléments quadrangles à quatre nœuds, carrés, de côté $h^e = 2,5d$. Elle a duré environ 60 jours en utilisant une version parallélisée du solveur granulaire (LMGC90) sur 8 processeurs cadencés à 2,3 GHz et a occupé 2,7 Go de mémoire vive.

Quand les particules commencent à tomber, les couches les plus basses accélèrent et se détachent du reste de l'échantillon. Ce processus se répète de proche en proche du bas vers le haut de l'échantillon, qui se divise alors en plusieurs couches horizontales séparées d'étroites bandes de fluide. Parallèlement, des structures en colonne, comme celles de la FIG. 3.3, apparaissent et se développent. Elles génèrent des bulles de gaz piégé dans l'échantillon granulaire et situées au-dessus des strates de particules déjà déposées au fond de la boîte. Les bulles remontent ainsi à mesure que le dépôt s'épaissit.

L'instabilité provient du fait que la force exercée par le fluide sur les particules décroît quand la porosité augmente. En effet, en combinant les équations (3.25), (3.14) et (3.53), et en utilisant

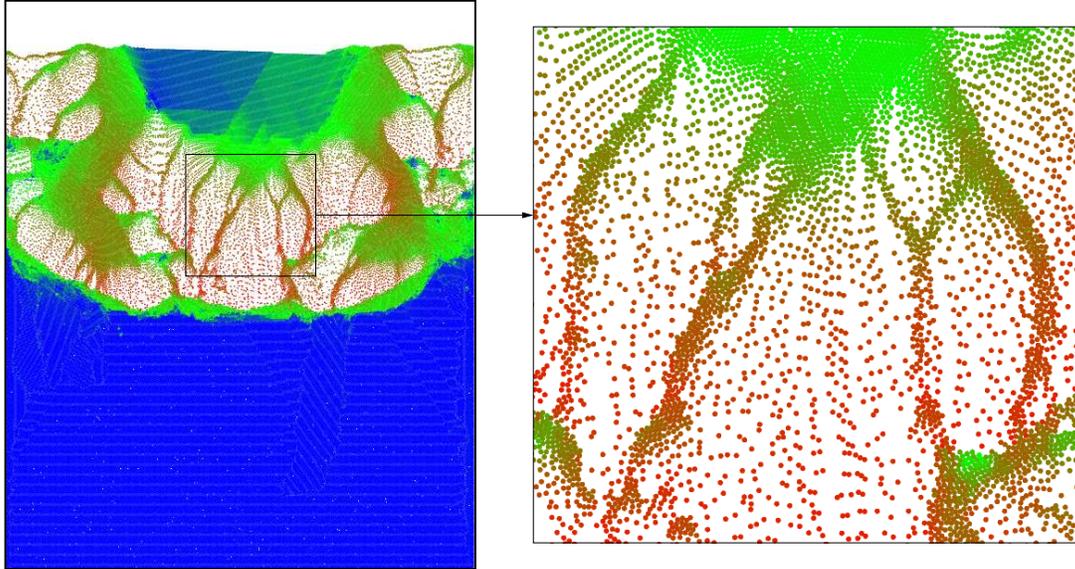


FIG. 3.3 – Un instantané d’une simulation de sédimentation (gauche) : 160 000 particules tombant dans l’air. Le code couleur indique la vitesse moyenne des particules : bleu pour celles au repos, rouge pour celles ayant atteint la plus grande vitesse et vert pour celles chutant à une vitesse intermédiaire. Un agrandissement de la partie encadrée (droite) montre les structures en colonne.

la perméabilité donnée par la loi de Kozeny-Carman (3.41), on obtient l’expression suivante de la force exercée par le fluide sur un élément de volume :

$$\vec{F}_{f \rightarrow s} = -\frac{180}{d^2} V \mu \frac{1 - \phi}{\phi^2} \vec{u}_{f/s}, \quad (3.157)$$

où V est le volume de l’élément considéré. Dans le régime stationnaire (après le transitoire), cette force est contrebalancée par le poids de l’élément mg . La vitesse de chute terminale est donc donnée par

$$u_v = \frac{d^2}{180} \frac{mg}{\mu V} \frac{\phi^2}{1 - \phi}. \quad (3.158)$$

En négligeant la masse du fluide devant la masse des particules et en remarquant que cette dernière peut s’écrire $\rho_s cV = \rho_s(1 - \phi)V$, on obtient une expression approchée plus simple de cette vitesse terminale :

$$u_v = \frac{d^2}{180} \frac{\rho_s g \phi^2}{\mu}. \quad (3.159)$$

Cette expression implique que u_v augmente avec la porosité. Le processus de séparation commence aux frontières entre l’échantillon granulaire et le fluide “pur” puisque la porosité y est légèrement plus élevée que dans le reste de l’échantillon. Il s’accélère ensuite, le départ d’une couche ayant généré une nouvelle frontière possédant les mêmes propriétés que la précédente. De la même façon, la porosité étant plus faible à l’extrémité des “doigts” les plus avancés, les particules situées à la frontière la plus basse de l’échantillon se séparent les unes des autres. Ce

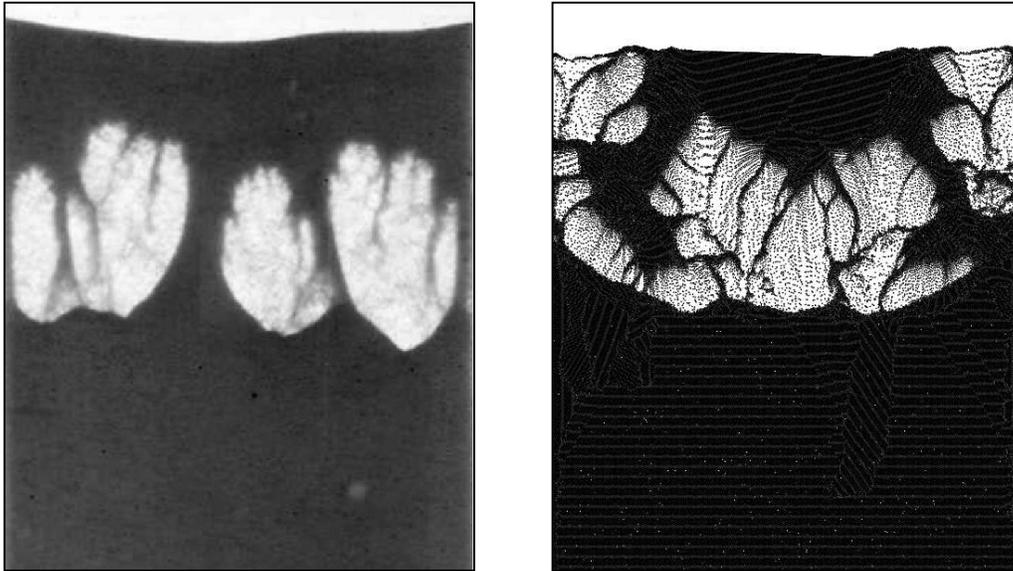


FIG. 3.4 – Instantanés de l’instabilité de Rayleigh-Taylor obtenus par l’expérience, d’après [110] (gauche) et la simulation numérique (droite).

phénomène est à l’origine de la digitation ou formation de structures en colonnes. On observe sur la FIG. 3.3 à la fois les colonnes et les couches qui se sont séparées entre les colonnes.

Les structures en colonnes sont visibles quand la taille des éléments h^e est petite devant la largeur de la boîte L , ou de façon équivalente quand h^e correspond à un faible nombre de diamètres de particule d . Afin d’étudier l’influence de h^e , on a simulé la sédimentation de 10 000 particules, avec les mêmes paramètres que pour l’échantillon de 160 000 particules, dans une boîte plus petite en gardant le même rapport d’aspect, pour quatre tailles d’éléments différentes $h^e = 1,25d ; 2,5d ; 5d$ et $10d$. La FIG. 3.5 montre trois instantanés pour chaque simulation. Dans tous les cas, on observe le phénomène de séparation de couches. Les colonnes sont absentes pour $h^e = 10d$. Elles apparaissent à partir de $h^e = 5d$ et deviennent plus marquées à mesure que le rapport h^e/d diminue.

La vitesse de sédimentation est la vitesse de chute de la couche la plus haute de l’échantillon granulaire. On a utilisé la hauteur H de la particule la plus haute pour suivre la trajectoire de cette couche. La FIG. 3.6 montre les variations de H en fonction du temps pour les quatre simulations avec l’échantillon de 10 000 particules. Dans tous les cas, après un transitoire initial, la hauteur diminue linéairement avec le temps pendant le dépôt des particules. La vitesse de sédimentation v_s est constante pendant cette phase et pratiquement indépendante de la taille des éléments h^e . Elle diminue jusqu’à s’annuler quand le gaz piégé dans la masse atteint la couche supérieure. Les différences entre les quatre simulations reflètent l’effet de taille finie. La courbe obtenue pour $h^e = 2,5d$ est assez proche de celle obtenue pour $h^e = 1,25d$. Cela signifie que l’effet de taille finie est négligeable pour $h^e \leq 2,5d$. D’un autre côté, la taille d’élément h^e doit être prise suffisamment grande pour que la porosité soit définie (*i.e.* l’élément doit fournir un volume élémentaire suffisant pour considérer un fluide équivalent régi par une loi de type Darcy

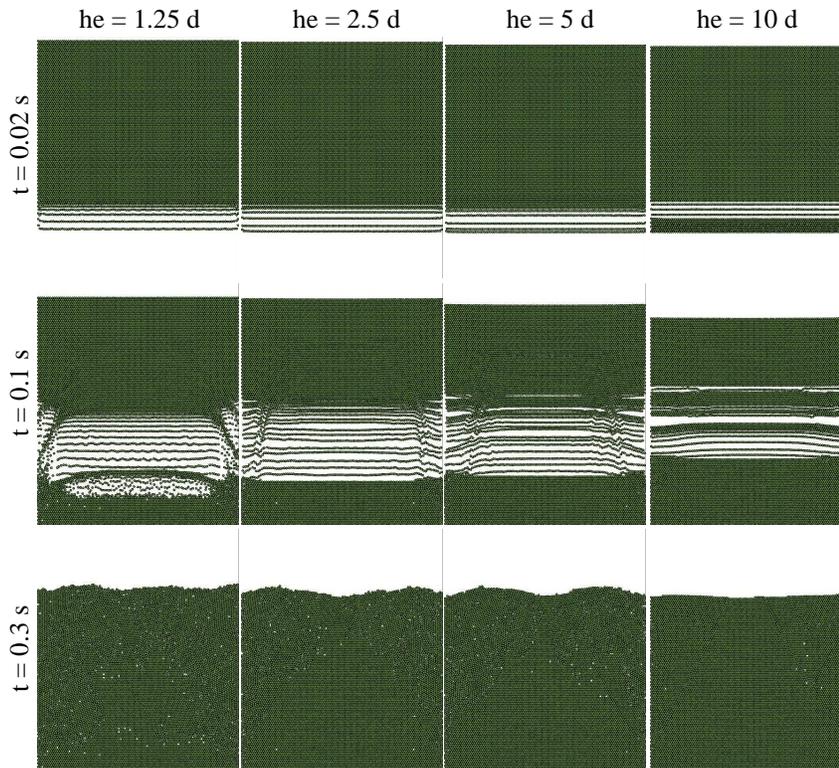


FIG. 3.5 – Des instantanés des particules en cours de sédimentation pour trois instants différents de l'évolution des quatre simulations, chacune réalisée avec une taille d'élément h^e différente.

cf. section 3.3.2.2). La taille de maille $h^e = 2,5d$ suggérée par Vinningland [109] semble donc être un choix raisonnable que la présente analyse confirme.

L'équation (3.159) fournit une valeur approchée de la vitesse de sédimentation de l'échantillon entier v_s , *i.e.* obtenue en prenant sa porosité moyenne ϕ . Le fait que v_s soit indépendant de la taille d'élément h^e signifie que la couche la plus haute n'est pas instable. A la différence de l'analyse numérique initiale de Vinningland *et al.*, basée sur la méthode de McNamara *et al.*, la présente analyse pourrait être conduite pour des échantillons polydisperses, des particules polyédriques et pour un domaine dont les frontières seraient de forme quelconque.

3.5 Conclusion

On a proposé trois nouvelles méthodes numériques pour simuler les écoulements gaz-grains, basées sur deux modélisations du fluide : gaz parfait ou fluide incompressible. Chacune couple un code aux éléments discrets, pour calculer la cinématique des particules, à un code aux éléments finis, pour résoudre l'équation d'évolution de la pression. Dans le cas d'un gaz parfait, cette dernière est non-linéaire. On peut dans ce cas dériver deux méthodes selon qu'elle est résolue directement ou linéarisée. L'évolution du champ de pression du gaz est calculée à

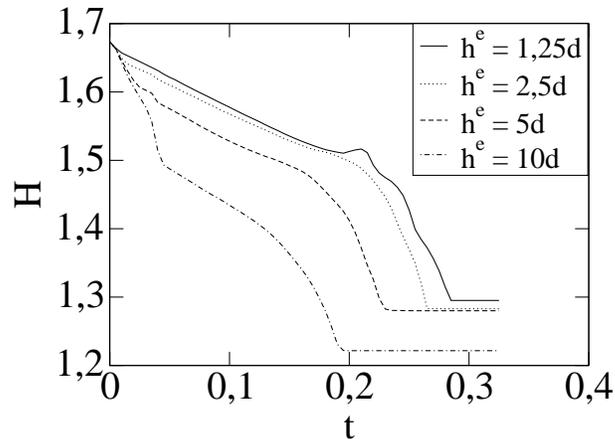


FIG. 3.6 – Evolution de la hauteur H (en cm) de la particule la plus haute en fonction du temps t (en s), pour les quatre simulations montrées sur la FIG. 3.5.

l'échelle mésoscopique, et le mouvement des particules à l'échelle microscopique. On a établi les équations du modèle, dans le cas d'un gaz parfait, par une approche originale, qui a permis l'extension aux cas d'échantillons polydispersés de la méthode initialement proposée par McNamara *et al.* [70, 7]. Cette nouvelle approche a aussi permis de dériver un modèle adapté aux cas de fluides incompressibles. L'utilisation d'une méthode aux éléments finis permet de traiter des domaines fluide de géométrie quelconque. Les méthodes développées font dialoguer deux échelles et deux discrétisations spatiales, et ont donc nécessité la définition rigoureuse d'opérateurs d'interpolation et de localisation. L'implémentation de ces méthodes au sein de la plate-forme LMGC90 a aussi été discutée.

Le choix d'une méthode modélisant la compressibilité du gaz et basée sur une discrétisation temporelle la moins arbitraire possible, a permis de dégager une seule méthode pour réaliser les études ultérieures. Elle a été validée sur un test de sédimentation bidimensionnel, mettant en jeu un grand nombre de particules, dans une boîte fermée. Ce test a aussi permis d'étudier l'influence de la taille des éléments sur la qualité de la simulation. Il a ainsi été établi que les effets de taille finie impactent la finesse de l'écoulement obtenu, bien que le résultat reste qualitativement correct. Il a toutefois été confirmé que la règle empirique, consistant à choisir une taille d'élément

$$h^e = 2,5d, \quad (3.160)$$

dans le cas d'éléments quadrangles à quatre nœuds carrés, est raisonnable. Cette taille est à la fois suffisamment petite, pour assurer la convergence en maillage, et suffisamment grande pour garantir la validité de la notion de fluide homogène équivalent. Il s'agit ici d'un résultat potentiellement significatif de cette étude : le volume élémentaire représentatif permettant de traduire par la loi de Darcy la rhéologie équivalente d'un écoulement de Stokes dans une matrice granulaire contient *a minima* 6 à 7 particules ($2,5 \times 2,5$). Ce résultat nécessiterait d'être confirmé dans le cas tridimensionnel et pour des géométries de particule autres que circulaires. Dans le chapitre suivant, on utilise cette méthode pour étendre l'analyse du chapitre précédent au cas saturé, *i.e.* en présence des gaz de fission.

Stabilité d'une méso-structure dans un gaz

Sommaire

4.1	Introduction	116
4.2	Première estimation de l'influence du gaz	116
4.3	Simulation couplant gaz et particules	117
4.4	Conclusion	120

4.1 Introduction

On a proposé dans le deuxième chapitre un problème modèle, reposant sur l'étude des écoulements dans une géométrie de silo, pour étudier la relocalisation. Cette approche a fourni une première réponse, sous la forme d'une estimation du taux de relocalisation, mais ne tient pas compte de la présence des gaz de fission. Une méthode de couplage fluide-grains a ensuite été développée dans le troisième chapitre. Ce chapitre propose donc d'étendre l'analyse précédente au cas de particules immergées dans un gaz.

On présente dans une première partie une méthode pour estimer l'influence de la présence du gaz, à partir d'une simulation réalisée dans le cas sans gaz. La seconde partie présente une comparaison avec un calcul, réalisé en utilisant la méthode numérique de couplage gaz-grains développée précédemment.

4.2 Première estimation de l'influence du gaz

On considère une colonne de grains, de hauteur suffisamment faible pour que l'effet Jansen n'intervienne pas. Dans le cadre d'une approximation par un milieu continu, on peut alors exprimer la masse M des grains au fond de la colonne :

$$M(z) = \rho_s c S z, \quad (4.1)$$

où ρ_s est la masse volumique des grains, c est la compacité, S est la section de la colonne et z sa hauteur. La pression p_s exercée par les grains sur le fond du silo s'écrit

$$p_s(z) = \frac{M(z)g}{S}, \quad (4.2)$$

où g est l'intensité de l'accélération de gravité. On a donc :

$$p_s(z) = \rho_s c g z. \quad (4.3)$$

Une estimation du gradient de la pression exercée par les grains sur le fond du silo est donc :

$$\frac{\Delta p_s}{\Delta z} = \frac{p_s(z) - p_s(0)}{z - 0} = \rho_s c g. \quad (4.4)$$

Cette dernière relation montre que la pression de confinement dépend linéairement de l'intensité de l'accélération de gravité. En interprétant ce gradient de pression comme la manifestation de la présence du fluide de gradient de pression $\Delta p_f / \Delta z$, on se rend compte que l'on peut simuler le cas saturé en modifiant l'intensité de l'accélération de gravité, par une décomposition additive (effet de la gravité auquel s'ajoute l'effet du gradient de pression dans le fluide) :

$$g^* = g + \frac{1}{\rho_s c} \frac{\Delta p_f}{\Delta z}. \quad (4.5)$$

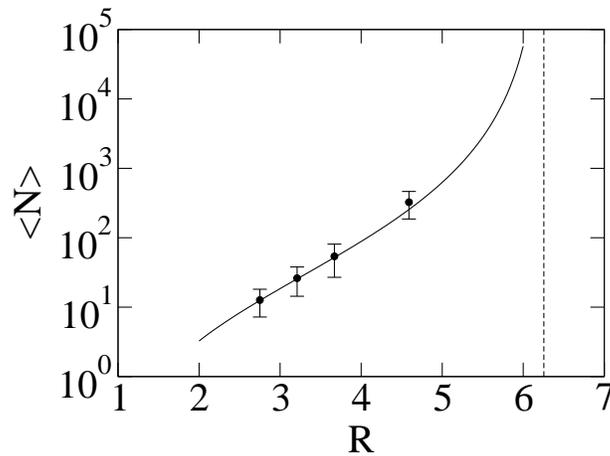


FIG. 4.1 – Evolution de la taille moyenne d’avalanche en fonction de l’ouverture normalisée, dans le cas de l’estimation de l’influence de la présence du gaz par un calcul sec.

La pression des gaz de fission est estimée à 80 bars en haut du crayon du combustible. Lors d’un APRP, la mise à l’équilibre avec la pression régnant dans le cœur du réacteur, la fait chuter à 1 bar à hauteur du ballonnement, si celui-ci est fissuré. Le ballonnement apparaît en général à mi-hauteur du crayon, soit à 2 m de la zone où la pression est mesurée. On peut donc s’attendre à un gradient de pression d’environ 40 bar.m^{-1} . Néanmoins, on ne connaît pas la répartition de la pression dans le crayon. La structure de l’empilement des fragments peut donc ne pas autoriser la percolation des fissures, mettant cette estimation en échec.

On choisit donc de travailler avec un gradient de pression arbitraire $\Delta p_f / \Delta z = 9\rho_s c g$, correspondant à une intensité de l’accélération de gravité $g^* = 10g$, dans le cadre de l’estimation précédente (cf. équation (4.5)). De nouvelles simulations d’écoulement dans une géométrie de silo, détaillées dans le deuxième chapitre, ont été effectuées, en utilisant l’intensité de l’accélération de gravité g^* , et en conservant les autres paramètres inchangés. La FIG. 4.1 présente l’évolution de la taille moyenne d’avalanche en fonction de l’ouverture normalisée obtenue. L’estimation proposée dans le deuxième chapitre (cf. équation (2.8)) est représentée, en gardant les mêmes valeurs des coefficients, par une ligne continue sur la FIG. 4.1. On constate que cette estimation approche convenablement les points obtenus ici. Cette concordance montre la pertinence de la *normalisation* utilisée dans le deuxième chapitre.

4.3 Simulation couplant gaz et particules

On a réalisé quelques simulations d’écoulement dans une géométrie de silo, en tenant effectivement compte de la présence du gaz par la méthode de couplage fluide-grains développée dans le troisième chapitre. On a conservé les mêmes paramètres pour le fluide que dans l’étape de validation de la méthode numérique, *i.e.* on continue à travailler avec de l’air. Afin de rester dans le domaine de validité de la méthode, la masse volumique des particules est la même que

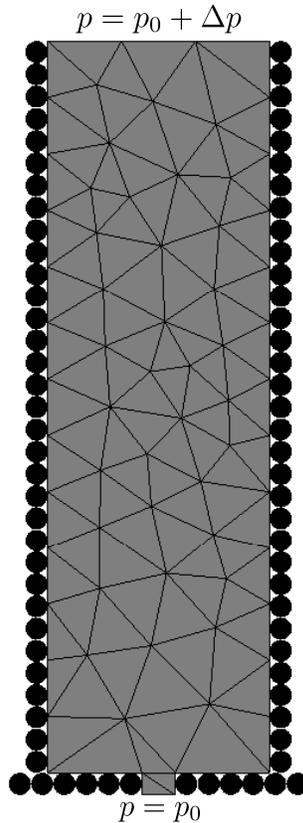


FIG. 4.2 – Maillage utilisé pour la résolution de l'équation d'évolution de la pression du gaz.

dans l'étape de validation, *i.e.* on continue à travailler avec des billes de verre. La distribution des rayons des particules utilisée dans le deuxième chapitre a été conservée, mais le diamètre maximum a été fixé à $d_{max} = 140\mu\text{m}$, pour les mêmes raisons que précédemment.

Le domaine occupé par le fluide est composé de l'intérieur du silo et de l'orifice. On a choisi de travailler avec un gradient de pression $\Delta p/\Delta z = 9\rho_s c g$. La différence de pression entre le haut et le bas du domaine fluide est donc donnée par

$$\Delta p = 9\rho_s c g H_f, \quad (4.6)$$

où H_f est la hauteur du domaine fluide. On a donc numériquement $\Delta p \approx 1000$ Pa. Les conditions aux limites pour la phase fluide sont un gradient de pression nul le long des parois du silo, et une pression imposée à $p = p_0$ et $p = p_0 + \Delta p$, respectivement en bas et en haut du domaine. On considère que Δp est négligeable devant p_0 , puisqu'il représente 1% de celui-ci. Les conditions aux limites choisies sont donc en accord avec l'hypothèse que les fluctuations de pression sont très petites devant la pression moyenne p_0 . On peut ainsi utiliser la méthode basée sur la linéarisation de l'équation d'évolution de la pression d'un gaz parfait. Le domaine fluide est discrétisé par un maillage en triangles à trois nœuds, généré à l'aide du mailleur Gmsh [36, 40]. Un exemple de maillage est présenté FIG. 4.2.

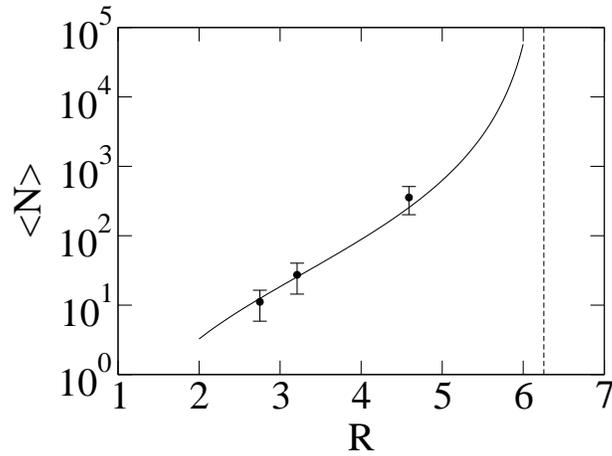


FIG. 4.3 – Evolution de la taille moyenne d’avalanche en fonction de l’ouverture normalisée, dans le cas des simulations réalisées en utilisant la méthode de couplage fluide-grains.

La FIG. 4.3 présente l’évolution de la taille moyenne d’avalanche en fonction de l’ouverture normalisée obtenue à partir des simulations utilisant la méthode de couplage fluide-grains. L’estimation proposée dans le deuxième chapitre (cf. équation (2.8)) est représentée, en gardant les mêmes valeurs des coefficients, par une ligne continue sur la FIG. 4.3. On constate que cette estimation approche encore bien les points obtenus.

Afin d’expliquer cette concordance *a priori* surprenante, on a cherché la corrélation entre la composante verticale des vitesses normalisées des particules à la sortie du silo v_{out} et l’ouverture normalisée R . On rappelle qu’elle est à l’origine de la loi de Beverloo sur le débit, expliquant la forme de la corrélation entre la taille moyenne d’avalanche $\langle N \rangle$ et R . La FIG. 4.4 présente la moyenne de v_{out} en fonction de R , pour les ouvertures considérées. On note qu’ici les vitesses sont normalisées par $\sqrt{\langle d \rangle g^*}$, puisque l’accélération de gravité g^* donne, par construction, l’intensité de la somme du poids des grains et des forces exercées par le fluide sur les grains. La ligne continue sur la FIG. 4.4 représente la fonction obtenue par (2.5) qui approche bien les points, que l’on rappelle ici :

$$v_{out} = C_v \sqrt{s(R - R_e)}. \quad (4.7)$$

La valeur de la constante $C_v \sqrt{s}$, dans ce cas est environ 1,45. Cette valeur est plus importante que dans le cas sec (rappel : $C_v \sqrt{s} \simeq 1,25$). Ce résultat montre que dans le cas saturé la loi de Beverloo reste valide et la distribution des durées de vie d’écoulement est sensiblement la même, mais que les particules sortent du silo avec une vitesse plus grande que dans le cas drainé.

On en conclut qu’il existe bien un effet moteur des gaz, mais il ne modifie pas la statistique d’avalanche, il accélère seulement la vitesse de relocalisation.

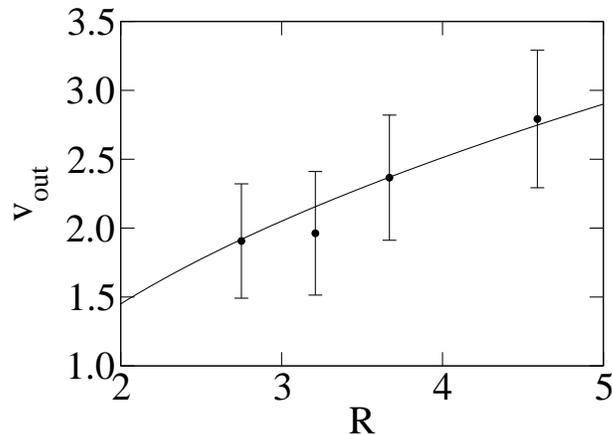


FIG. 4.4 – Moyenne de la composante verticale des vitesses normalisées des particules à la sortie du silo en fonction de l'ouverture normalisée. La ligne continue représente une fonction obtenue par (2.5) qui approche bien les points.

4.4 Conclusion

On a présenté deux méthodes pour prendre en compte la présence des gaz de fission dans l'étude de stabilité réalisée dans le deuxième chapitre. La première méthode se base sur une relation linéaire entre le gradient de pression exercé par les particules sur le fond du silo, et l'intensité de l'accélération de gravité. Elle consiste à modifier cette dernière pour représenter un gradient de pression fluide constant, renforçant la gravité. L'évolution de la taille moyenne d'avalanche, en fonction de l'ouverture normalisée, obtenue par cette méthode est bien approchée par l'estimation proposée dans le deuxième chapitre. Ce résultat découle de la pertinence de la normalisation utilisée dans ce chapitre.

La deuxième méthode consiste à utiliser la méthode de couplage fluide-grains développée dans le troisième chapitre pour prendre en compte effectivement la présence du gaz. Elle a été utilisée dans un cas comparable au cas précédent et a aussi fourni des résultats en accord avec l'estimation proposée dans le deuxième chapitre. Cette seconde étude permet une analyse plus fine de la cinétique de relocalisation. En particulier, une étude des vitesses à la sortie du silo a permis de montrer que la loi de Beverloo est encore vérifiée dans le cas saturé et que la distribution des durées de vie d'écoulement est inchangée, mais que les vitesses des particules à la sortie du silo sont plus élevées.

La conclusion pour l'application au problème de la relocalisation, est que l'estimation de la quantité de combustible relocalisée donnée dans le deuxième chapitre, reste valide dans le cas saturé. Elle renforce même sa validité. L'estimation proposée pour le taux de relocalisation en l'absence de gaz supposait que toute la quantité moyenne écoulee durant l'avalanche avait le temps de se relocaliser dans le ballon. Cette supposition ne tient pas compte de la durée réelle de la situation accidentelle et s'appuie donc sur une relocalisation *instantanée*. L'étude conduite ici montre qu'en présence des gaz de fission la vitesse de relocalisation est plus élevée et renforce

donc l'hypothèse d'instantanéité.

Conclusion générale

Sommaire

Bilan	124
Perspectives	125

Bilan

On a réalisé une étude numérique et physique du problème de relocalisation du combustible dans le cas d'un accident de type APRP, dans le cadre simplifié de la géométrie de silo. On a proposé une procédure permettant de redéclencher l'écoulement suite à des blocages et ainsi pu étudier un grand nombre de phases d'écoulement. Cette analyse a permis de décrire le débit d'écoulement comme une fonction de l'ouverture en accord avec la loi de Beverloo, aussi bien dans le régime de blocage que dans la transition vers l'écoulement continu. On a proposé une nouvelle explication de la forme de cette loi, adaptée à la gamme d'ouvertures étudiée, basée sur l'analyse des vitesses des particules à la sortie du silo. Les données collectées montrent que la densité de probabilité des tailles d'avalanche normalisées par la taille moyenne d'avalanche est une exponentielle indépendante de l'ouverture. La taille moyenne d'avalanche diverge à l'approche d'une ouverture critique. La combinaison de la loi de Beverloo et d'une divergence en loi de puissance pour les durées de vie d'écoulement a permis de proposer une fonction qui approche correctement les données obtenues. De plus, on a montré qu'un modèle statistique décrivant le passage des particules comme un processus sans mémoire fournit une fonction intrinsèque qui approche de près la statistique d'avalanche. Ces résultats issus de simulations numériques sont en accord avec les résultats expérimentaux de Zuriguel *et al.* [118]. On a proposé une modélisation simplifiée du ballonnement permettant de borner puis d'estimer la fraction de combustible relocalisable lors d'un accident, pour un taux de combustion donné. Le résultat concret de cette étude appliquée est en très bon accord avec les connaissances expérimentales dans le domaine de la relocalisation du combustible nucléaire en situation accidentelle de type APRP.

L'analyse précédente a été réalisée sans tenir compte de la présence des gaz de fission. On a donc proposé trois nouvelles méthodes numériques pour la simulation des écoulements gaz-grains, basées sur deux modélisations du fluide : gaz parfait ou fluide incompressible. Chacune couple une résolution par éléments discrets, pour la phase solide, à une résolution par éléments finis, pour la phase fluide. On a proposé une nouvelle dérivation de l'équation d'évolution de la pression, seule variable caractérisant le fluide, qui a permis d'étendre la méthode de McNamara *et al.* [70, 7] aux systèmes polydisperses et aux fluides incompressibles. Le choix d'une méthode aux éléments finis permet de plus de traiter des domaines de géométrie quelconque. La volonté d'utiliser une méthode modélisant la compressibilité du gaz et basée sur une discrétisation temporelle la moins arbitraire possible a permis de dégager une seule méthode pour les analyses ultérieures : la méthode utilisant une linéarisation de la loi d'évolution de la pression obtenue pour un gaz parfait. Elle a été validée sur un test de sédimentation bidimensionnel mettant en jeu un grand nombre de particules. Ce test a aussi permis d'étudier l'influence de la taille des éléments sur la qualité du résultat. On a ainsi observé que les effets de taille finie contrôlent la finesse de l'écoulement obtenu, bien que le résultat reste qualitativement correct. On a cependant pu établir que la règle consistant à choisir des éléments de taille égale à cinq rayons de particules, dans le cas d'éléments quadrangles à quatre nœuds carrés, constitue un choix raisonnable. Bien que ce résultat nécessite d'être confirmé pour les situations tridimensionnelles, on peut envisager qu'il constitue une bonne estimation de la taille du volume élémentaire re-

présentatif permettant de modéliser un écoulement de gaz parfait dans un réseau granulaire par une loi de Darcy.

L'analyse de stabilité réalisée sans fluide, a été reprise en tenant compte de la présence des gaz de fission. Pour ce faire, deux méthodes ont été envisagées. La première se base sur une relation linéaire entre le gradient de pression exercée par les particules sur le fond du silo et l'intensité de l'accélération de gravité. Elle consiste à modifier cette dernière pour représenter un gradient de pression fluide constant, renforçant la gravité. La deuxième méthode consiste à utiliser directement la méthode de couplage gaz-grains proposée précédemment. L'évolution de la taille moyenne d'avalanche, en fonction de l'ouverture normalisée, obtenue est bien approchée par l'estimation proposée précédemment, dans les deux cas. Dans le cadre de l'utilisation de la méthode à accélération de gravité équivalente, ce résultat découle de la pertinence de la normalisation. Dans le cadre de la méthode directe de couplage gaz-grains, une étude des vitesses des particules à la sortie du silo a permis de montrer que la loi de Beverloo est encore vérifiée dans le cas avec fluide et que la distribution des durées de vie d'écoulement reste inchangée, alors que les vitesses à la sortie du silo sont plus élevées. Ce résultat montre que l'estimation du taux de combustible relocalisable reste valide en présence des gaz de fission. L'estimation obtenue dans le cas sans gaz ne tenait pas compte de la durée réelle de l'accident et s'appuyait donc sur une hypothèse d'instantanéité. Le fait que la présence des gaz de fission augmente les vitesses d'écoulement des particules renforce cette hypothèse et augmente donc la pertinence de l'estimation. L'effet moteur des gaz ne joue pas sur la statistique d'écoulement mais sur la vitesse de relocalisation. La conclusion appliquée de cette étude indique que le taux de relocalisation durant un accident de type APRP n'évolue plus au-delà d'un taux de combustion de 20000 MWj/tU et qu'il se situe aux alentours de 50%.

Perspectives

Une perspective à cours terme est de renforcer l'analyse de stabilité dans le cadre de la géométrie de silo, en réalisant de nouvelles simulations. Étendre l'intervalle des ouvertures étudiées permettrait de confirmer les tendances observées. Reprendre les simulations déjà réalisées sur des durées plus longues pourrait permettre de confirmer l'existence de l'ouverture critique.

Une perspective à moyen terme est d'étendre les développements réalisés dans le cadre de l'analyse de stabilité et des méthodes de couplage gaz-grains, successivement aux polygones, au cas tridimensionnel et enfin aux polyèdres. Les méthodes développées ont été conçues dans le but d'être suffisamment génériques pour ne dépendre ni de la géométrie des particules, ni du nombre de dimensions spatiales. L'implémentation de ces extensions sera facilitée par l'évolution de l'architecture de la plate-forme LMGC90 vers plus de généralité, actuellement en cours. En ce qui concerne la méthode de couplage gaz-grains, des problèmes de modélisation s'ajoutent aux problèmes techniques. On peut utiliser une modification de la loi de Kozeny-Carman pour l'étendre aux polyèdres, en introduisant l'écart à la sphéricité [28], mais il est plus difficile de proposer une méthode pour calculer les moments des forces exercées par le fluide

sur les particules.

Enfin, une perspective à plus long terme consiste à reprendre l'étude de stabilité avec un échantillon de fragments réalistes. Le point clé réside dans la morphologie du milieu granulaire généré par fragmentation des pastilles de combustible. Il s'agit d'un milieu à compacité très grande. L'extraction d'une bibliothèque de fragments à partir de radiographies de crayons réels peut constituer une première étape. Mais elle ne fournira qu'une information tronquée. On a aussi besoin des conditions initiales en termes de forces de contact. Ce type d'information ne peut être obtenue que par le biais de la simulation numérique. Le développement de méthodes et d'outils numériques permettant de modéliser la transition d'un milieu continu vers un milieu discret devient alors nécessaire. L'objectif est d'être en mesure de faire évoluer un milieu continu maillé (approche éléments finis classique) vers un milieu fracturé (approche éléments finis avec discontinuités géométriques) puis vers un milieu discret (approche éléments discrets avec grains déformables).

Pour modéliser la fissuration, deux approches sont classiquement distinguées : les approches globales et les approches locales. Parmi les approches globales, on peut citer la mécanique de la rupture, qui permet d'aborder le problème d'une façon analytique, mais qui repose sur un certain nombre d'hypothèses parfois peu compatibles avec un problème concret [63]. Les méthodes locales permettent de traiter la propagation de la fissure directement au travers de la discrétisation spatiale. On peut ainsi enrichir la discrétisation des éléments finis pour rendre compte de la fissure, soit directement dans l'élément : méthode X-FEM (*Extended Finite Element Method*) [93], soit à l'interface entre les mailles, alors considérées comme des corps indépendants, en introduisant des modèles de zone cohésive (CZM) : méthode des éléments finis volumique cohésifs. Dans ce dernier cas la fissure se propage entre les faces d'un maillage, endommageant progressivement les liens de cohésion [84]. Récemment une méthode appartenant à cette classe a été développée par Topin *et al.*, la méthode LEM (*Lattice Element Method*), qui propose de discrétiser la matière par un nuage de points, reliés entre eux par des éléments unidimensionnels endommageables [104]. Elle est conçue pour simuler des états de fracturation complexes (test de Nooru-Mohamed) [103], son atout principal résidant dans sa rapidité. Elle présente cependant des difficultés pour remonter, à partir des grandeurs vectorielles manipulées à l'échelle locale, les grandeurs tensorielles nécessaires à l'écriture d'une loi de comportement macroscopique.

Les difficultés posées par l'application des méthodes globales à ce problème (*e.g.* la nécessité d'un critère d'amorçage) et, *a contrario*, la pertinence des approches locales dans le cas une physique complexe aux plus petites échelles [1], font de ces dernières des méthodes performantes pour la modélisation "continu-discret". En particulier, des travaux antérieurs menés conjointement par l'IRSN et le LMGC, ont montré que la méthode volumique-cohésive était extrêmement prometteuse dans le cas de l'étude fine de la fissuration des matériaux constituant les crayons combustibles [84]. Un avantage supplémentaire de la méthode volumique-cohésive, dans le cadre de ce problème, vient de ce que sa mise en œuvre repose sur un formalisme identique à celui des éléments discrets. Il suffit alors d'être capable de considérer un fragment connexe du matériau fissuré comme une structure discrète, pour obtenir la mésostructure souhaitée. En marge de ce travail de thèse, un premier pas a été réalisé dans cette direction dont les

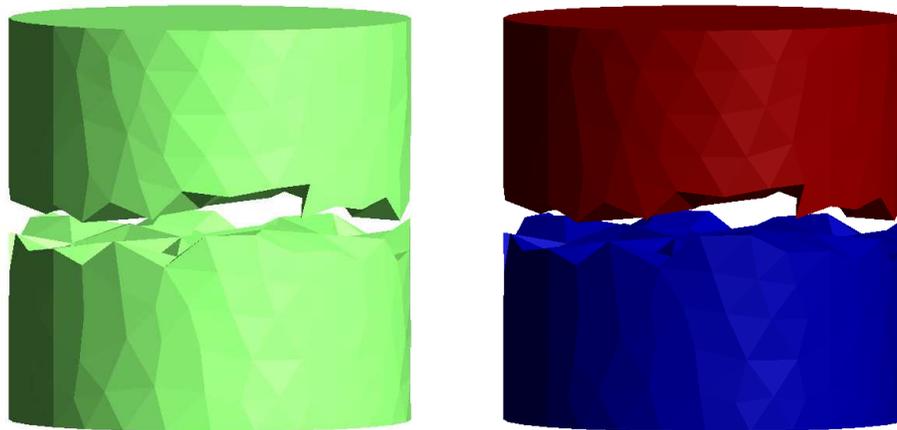


FIG. 4.5 – Exemple d’utilisation de l’ébauche de l’outil de reconnaissance de fragments. On part d’un cylindre, représentant une pastille de combustible, coupé en deux, par la suppression des éléments situés dans le plan médian (gauche). L’algorithme a été capable de différencier les fragments restants (droite).

grands traits sont rapidement évoqués.

L’ébauche d’un outil permettant la reconnaissance de fragments d’un corps maillé fissuré a été réalisée. Cet outil été conçu dans l’optique de post-traiter un calcul de type LEM. Dans le cadre de cette méthode, la matière est condensée aux nœuds du réseau, mais on conserve la notion de volume pour sa représentation graphique, en générant une triangulation dont ils sont les sommets. En supprimant les volumes portant des liens cassés, on parvient à représenter graphiquement les fissures comme l’absence de matière. Les fragments issus d’un calcul LEM peuvent donc être vus comme les composantes connexes d’un graphe ; typiquement, les sommets sont les tétraèdres et les arêtes sont les faces triangulaires. L’ébauche développée repose donc sur un algorithme d’inondation de composantes connexes et a été réalisée à l’aide de la bibliothèque CGAL (*Computational Geometry Algorithms Library*) [17], fournissant les structures de données et les fonctions nécessaires au parcours des différents éléments d’une triangulation (nœuds, faces triangulaires ou tétraèdres) [12]. Un exemple d’utilisation de cet outil est présenté sur la FIG. 4.5 (images réalisées à l’aide du module de post-traitement de Gmsh [36, 40]).

Ce problème recouvre un certain nombre de points durs scientifiques indiqués ci-dessous.

- Les caractéristiques intrinsèques du matériau (non linéarité, présence de pores pressurisés, etc.), ainsi que les phénomènes physiques en jeu (champs de température, rayonnement, etc.) nécessitent des lois de comportement non linéaires dont les paramètres doivent être identifiés afin d’obtenir un comportement réaliste. Concernant le traitement du comportement multi-physique, on pourra s’appuyer sur l’approche variationnelle développée par L. Stainier et disponible dans la bibliothèque MatLib [97] ainsi que les modèles poroélastoplastiques pour le combustible obtenus par Vincent *et al.* [108]. La mécanique fortement non linéaire multi-physique pose en elle-même des problèmes de temps de calcul.

- Les spécificités de la structure (3D, multicontact, etc.) nécessitent une stratégie de modélisation numérique adaptée. En particulier, la transition milieu fracturé-milieu discret requiert des modèles de dilatance associés à un traitement non régularisé ni pénalisé du contact frottant entre blocs afin de substituer à des grains de morphologie complexe des corps polyédriques de comportement similaire.
- La présence d’une multitude de fissures de tailles très petites devant la taille de la structure et dont on cherche à modéliser l’apparition et la propagation, nécessite des discrétisations spatiales et temporelles fines. Pour cette partie on pourra se référer aux développements théoriques issus de la collaboration LMGC-IRSN présentée précédemment [85]. La finesse de la discrétisation temporelle nécessaire peut rendre prohibitive l’utilisation des schémas implicites habituellement utilisés dans la méthode NSCD. Ceci est dû au temps de calcul consommé par le traitement spécifique de la non-linéarité de la loi de comportement (boucle de Newton-Raphson). On pourra alors se tourner vers des schémas explicites, dans l’esprit des travaux de Carpenter *et al.* [16].
- La génération d’ondes (compression, cisaillement, Rayleigh) lors de la fissuration, et leur propagation en milieu fissuré et discret avec une forte hétérogénéité de maillage est un problème délicat. Il s’agit notamment de maîtriser l’effet de l’hétérogénéité de la discrétisation spatiale sur ces ondes de manière à quantifier la qualité du résultat de la simulation.
- La transition “continu-discret” nécessite la définition de critères pertinents permettant de déterminer : (1) l’occurrence d’une fissuration saturée pour un corps maillé, et (2) les modalités de passage à une description simplifiée.

Bibliographie

- [1] V. ACARY et Y. MONERIE : Nonsmooth fracture dynamics using a cohesive zone approach. Research Report Nr. 6032, INRIA, 2006.
- [2] I. AGNOLIN et J.-N. ROUX : Internal states of model isotropic granular packings. iii. elastic properties. *Physical Review E*, 76:061304, 2007.
- [3] M. P. ALLEN et D. J. TILDESLEY : *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1987.
- [4] E. ANDERSON, Z. BAI, C. BISHOP, S. BLACKFORD, J. DEMMEL, J. DONGARRA, J. du CROZ, A. GREENBAUM, S. HAMMARLING, A. MCKENNEY et D. SORENSEN : *LAPACK User's Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.
- [5] K. ANDERSON, S. SUNDARESAN et R. JACKSON : Instabilities and the formation of bubbles in fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, 303:327–336, 1995.
- [6] T. B. ANDERSON et R. JACKSON : Fluid mechanical description of fluidized beds. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6:527–539, 1967.
- [7] D.-V. ANGHEL, M. STRAUSS, S. MCNAMARA, E. G. FLEKKOY et K. J. MALOY : Erratum : Grains and gas flow : Molecular dynamics with hydrodynamic interactions [phys. rev. e 61, 4054 (2000)]. *Physical Review E*, 74:029906, 2006.
- [8] J.-L. AURIAULT, T. STRZELECKI et S. HE : Porous deformable media saturated by a very compressible fluid : quasi-statics. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 9:373–392, 1990.
- [9] E. AZÉMA, F. RADJAÏ, R. PEYROUX et G. SAUSSINE : Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Physical Review E*, 76:011301, 2007.
- [10] R. BEETSTRA, M. A. van der HOEF et J. A. M. KUIPERS : Drag force of intermediate reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres. *AIChE Journal*, 53:489–501, 2007.

- [11] W. A. BEVERLOO, H. A. LENIGER et J. van de VELDE : The flow of granular solids through orifices. *Chemical Engineering Science*, 15:260–269, 1961.
- [12] J.-D. BOISSONNAT, O. DEVILLERS, S. PION, M. TEILLAUD et M. YVINEC : Triangulations in cgal. *Computational Geometry*, 22:5–19, 2002.
- [13] G. A. BOKKERS, M. van SINT ANNALAND et J. A. M. KUIPERS : Mixing and segregation in a bidisperse gas-solid fluidised bed : a numerical and experimental study. *Powder Technology*, 140:176–186, 2004.
- [14] D. BONAMY, L. LAURENT, P. CLAUDIN, J.-P. BOUCHAUD et F. DAVIAUD : Electrical conductance of a 2d packing of metallic beads under thermal perturbation. *Europhysics Letters*, 51:614–620, 2000.
- [15] P. C. CARMAN : Fluid through granular beds. *Chemical Engineering Research and Design*, 15:150–166, 1937.
- [16] N. CARPENTER, R. TAYLOR et M. KATONA : Lagrange constraints for transient finite element surface contact. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32:103–128, 1991.
- [17] CGAL : Web site : <http://www.cgal.org>.
- [18] S. CHEN et G. D. DOOLEN : Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluids Mechanics*, 30:329–364, 1998.
- [19] P. W. CLEARY et J. J. MONAGHAN : Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148:227–264, 1999.
- [20] CODE_ASTER : Web site : <http://www.code-aster.org>.
- [21] O. COINDREAU : Synthèse bibliographique sur les caractéristiques géométriques d'un cœur dégradé. Rapport technique DPAM-SEMCA-2009-124, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, 2009.
- [22] P. A. CUNDALL et O. D. L. STRACK : A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65, 1979.
- [23] A. DAERR et S. DOUADY : Two types of avalanche behaviour in granular media. *Nature*, 399:241–243, 1999.
- [24] H. DARCY : *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Victor Dalmont, 1856.
- [25] J. DING et D. GIDASPOW : A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, 36:523–538, 1990.
- [26] A. DRESCHER et de Josselin de JONG G. : Photoelastic verification of a mechanical model for the flow of a granular material. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 20:337–340, 1972.
- [27] F. DUBOIS et M. JEAN : Une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d'interaction. In M. POTIER-FERRY, M. BONNET et A. BIGNONNET, éditeurs : *6ème Colloque National en Calcul des Structures*, volume 1, pages 111–118, Giens, 2003.

- [28] F. A. L. DULLIEN : *Porous media : fluid transport and pore structure*. Academic Press, New York, 1979.
- [29] D. DUREISSEIX et H. BAVESTRELLO : Information transfer between incompatible finite element meshes : Application to coupled thermo-viscoelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:6523–6541, 2006.
- [30] S. ERGUN : Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, 48:88–94, 1952.
- [31] G. H. FANCHER, J. A. LEWIS et K. B. BARNES : Physical tests and properties of oil and gas sands. *In 1st World Petroleum Congress*, Londres, 1933.
- [32] E. G. FLEKKOY, S. MCNAMARA, K. J. MALOY et D. GENDRON : Structure formation and instability in a tube of sand. *Physical Review Letters*, 87:134302, 2001.
- [33] C. A. J. FLETCHER : *Computational Techniques for Fluid Dynamics.*, volume I : Fundamental and General Techniques. Springer, 1988.
- [34] C. A. J. FLETCHER : *Computational Techniques for Fluid Dynamics.*, volume II : Specific Techniques for Different Flow Categories. Springer, 1988.
- [35] GDR-MIDI : On dense granular flows. *European Physical Journal E*, 14:341–365, 2004.
- [36] C. GEUZAINÉ et J.-F. REMACLE : Gmsh : a 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79:1309–1331, 2009.
- [37] D. GIDASPOW : *Multiphase flow and fluidization : continuum and kinetic theory descriptions*. Elsevier, 1994.
- [38] R. A. GINGOLD et J. J. MONAGHAN : Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181:375–389, 1977.
- [39] R. GLOWINSKI, T. W. PAN, T. I. HELSA et D. D. JOSEPH : A distributed lagrange multiplier fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25:755–794, 1999.
- [40] GMSH : Web site : <http://www.geuz.org/gmsh/>.
- [41] M. J. V. GOLDSCHMIDT, J. A. M. KUIPERS et W. P. M. van SWAAIJ : Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow : effect of coefficient of restitution on bed dynamics. *Chemical Engineering Science*, 56:571–578, 2001.
- [42] C. GRANDJEAN : Communication personnelle. Détails techniques concernant l'APRP, 2009.
- [43] E. GUYON, J.-P. HULIN et L. PETIT : *Hydrodynamique physique*. EDP Sciences/CNRS Editions, 2001.
- [44] P.-Y. HICHER et J.-F. SHAO, éditeurs. *Elastoplasticité des sols et des roches*. Hermès Science publications, 2002.

- [45] R. J. HILL, D. L. KOCH et A. J. C. LADD : Moderate-reynolds-number flows in ordered and random arrays of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 448:243–278, 2001.
- [46] H. HINRICHSSEN et D. E. WOLF, éditeurs. *The Physics of Granular Media*, chapitre Contact dynamics study of 2D granular media : Critical states and relevant internal variables, pages 165–186. Wiley-VCH, 2004.
- [47] B. P. B. HOOMANS, J. A. M. KUIPERS, W. J. BRIELS et W. P. M. van SWAAIJ : Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed : A hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 51:99–118, 1996.
- [48] R. JACKSON : Locally averaged equations of motion for a mixture of identical spherical particles and a newtonian fluid. *Chemical Engineering Science*, 52:2457–2469, 1997.
- [49] H. M. JAEGER, C.-H. LIU et S. R. NAGEL : Relaxation at the angle of repose. *Physical Review Letters*, 62:40–43, 1989.
- [50] J. JANELA, A. LEFEBVRE et B. MAURY : A penalty method for the simulation of fluid - rigid body interaction. In *ESAIM : Proceedings*, volume 14, pages 115–123, 2005.
- [51] H. A. JANSSEN : Versuche über getreidedruck in silozellen. *Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure*, 39:1045–1049, 1895.
- [52] M. JEAN : The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177:235–257, 1999.
- [53] M. JEAN, V. ACARY et Y. MONERIE : Non-smooth contact dynamics approach of cohesive materials. *Philosophical Transactions of The Royal Society A*, 359:2497–2518, 2001.
- [54] M. JEAN et J.-J. MOREAU : Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, pages 31–48, Lausanne, Switzerland, 1992. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- [55] J. T. JENKINS et S. B. SAVAGE : A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 130:187–202, 1983.
- [56] V. KOMIWES, P. MEGE, Y. MEIMON et H. HERRMANN : Simulation of granular flow in a fluid applied to sedimentation. *Granular Matter*, 8:41–54, 2006.
- [57] N. P. KRUYT et L. ROTHENBURG : Micromechanical bounds for the effective elastic moduli of granular materials. *International Journal of Solids and Structures*, 39:311–324, 2002.
- [58] J. A. M. KUIPERS, K. J. van DUIN, F. P. H. van BECKUM et W. P. M. van SWAAIJ : A numerical model of gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 47:1913–1924, 1992.
- [59] J. A. M. KUIPERS et W. P. M. van SWAAIJ : Computational fluid dynamics applied to chemical reaction engineering. *Advances in Chemical Engineering*, 24:227–328, 1998.
- [60] A. J. C. LADD et R. VERBERG : Lattice-boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*, 104:1191–1251, 2001.
- [61] LAPACK : Web site : <http://www.netlib.org/lapack/>.

- [62] T. LE PENNEC, K. J. MALOY, A. HANSEN, M. AMMI, D. BIDEAU et X.-I. WU : Ticking hour glasses : Experimental analysis of intermittent flow. *Physical Review E*, 53:2257–2264, 1996.
- [63] J. LEMAITRE et J.-L. CHABOCHE : *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, 1988.
- [64] LMGC90 : Web site : <http://www.lmgc.univ-montp2.fr/~dubois/LMGC90/>.
- [65] L. B. LUCY : Numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82:1013–1024, 1977.
- [66] C. K. K. LUN, S. B. SAVAGE, D. J. JEFFREY et N. CHEPURNIY : Kinetic theories for granular flow : inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics*, 140:223–256, 1984.
- [67] C. MANKOC, A. JANDA, R. ARÉVALO, J. PASTOR, I. ZURIGUEL, A. GARCIMARTIN et D. MAZA : The flow rate of granular materials through an orifice. *Granular Matter*, 9:407–414, 2007.
- [68] M. MANSOURI, J.-Y. DELENNE, M. S. EL YOUSOUFI et A. SERIDI : A 3d dem-lbm approach for the assessment of the quick condition for sands. *Comptes Rendus Mécanique*, 337:1631–0721, 2009.
- [69] D. MAUGIS : *Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids*. Springer, 2000.
- [70] S. MCNAMARA, E. G. FLEKKOY et K. J. MALOY : Grains and gas flow : Molecular dynamics with hydrodynamic interactions. *Physical review E*, 61:4054–4059, 2000.
- [71] R. D. MINDLIN : Compliance of elastic bodies in contact. *Journal of Applied Mechanics*, 16:259–268, 1949.
- [72] R. MITTAL et G. IACCARINO : Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37:239–261, 2005.
- [73] J. J. MONAGHAN : Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [74] Y. MONERIE : Communication personnelle. Elaboration de l'article pour les journées des thèses IRSN 2007, 2007.
- [75] Y. MONERIE, P.-G. VINCENT et P. SUQUET : Céramiques nucléaires. In *Comptes rendus du colloque National Mécamat – Approches multi-échelles en mécanique des matériaux* –, Aussois, 2006.
- [76] J.-J. MOREAU : Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials. *European Journal of Mechanics A/Solids*, supp.:93–114, 1994.
- [77] J. P. MORRIS, P. J. FOX et Y. ZHU : Modeling low reynolds number incompressible flows using sph. *Journal of Computational Physics*, 136:214–226, 1997.
- [78] C. NAVIER : Mémoire sur les lois du mouvement des fluide. *Mémoires de l'Académie des Sciences de l'Institut de France*, 6:389–440, 1823.
- [79] F. NICOT, F. DARVE, RNVO Group : Natural HAZARDS et Vulnerability of STRUCTURES : A multi-scale approach to granular materials. *Mechanics of Materials*, 37:980–1006, 2005.

- [80] NUMPY : Web site : <http://numpy.scipy.org>.
- [81] Corey S. O’HERN, Stephen A. LANGER, Andrea J. LIU et Sidney R. NAGEL : Random packings of frictionless particles. *Physical Review Letters*, 88:075507, 2002.
- [82] S. OUAGUENOUNI et J.-N. ROUX : Compaction of well-coordinated lubricated granular pilings. *Europhysics Letters*, 32:449–453, 1995.
- [83] G. OVARLEZ et E. CLÉMENT : Elastic medium confined in a column versus the janssen experiment. *European Physical Journal E*, 16:421–438, 2005.
- [84] F. PERALES : *Fissuration des matériaux à gradient de propriétés. Application au zircaloy hydruré*. Thèse de doctorat, Université Montpellier II, 2005.
- [85] F. PERALES, Y. MONERIE, F. DUBOIS et L. STAINIER : Simulation numérique de la rupture des matériaux hétérogènes. In R. OHAYON, J.-P. GRELLIER et A. RASSINEUX, éditeurs : *7ème Colloque National en Calcul des Structures*, volume 2, pages 463–468, Giens, 2005.
- [86] C. S. PESKIN : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11:479–517, 2002.
- [87] F. PFEIFFER, M. FOERG et H. ULBRICH : Numerical aspects of non-smooth multibody dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:6891–6908, 2006.
- [88] A. V. POTAPOV, M. L. HUNT et C. S. CAMPBELL : Liquid-solid flows using smoothed particle hydrodynamics and the discrete element method. *Powder Technology*, 116:204–213, 2001.
- [89] PYTHON : Web site : <http://www.python.org>.
- [90] F. RADJAI, M. JEAN, J.-J. MOREAU et S. ROUX : Force distributions in dense two-dimensional granular systems. *Physical Review Letters*, 77:274–277, 1996.
- [91] F. RADJAI et V. RICHEFEU : Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mechanics of Materials*, 41:715–728, 2009.
- [92] F. RADJAI, S. ROUS et J.-J. MOREAU : Contact forces in a granular packing. *CHAOS*, 9:544–550, 1999.
- [93] J. RÉTHORÉ : *Méthode des éléments finis étendus en espace et en temps : application à la propagation dynamique des fissures*. Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2005.
- [94] O. REYNOLDS : On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. with experimental illustrations. *Philosophical Magazine Series 5*, 20:469–481, 1885.
- [95] J. F. RICHARDSON et W. N. ZAKI : The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow. *Chemical Engineering Science*, 3:65–73, 1954.
- [96] J.-N. ROUX : Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Physical Review E*, 61:6802–6836, 2000.
- [97] L. STAINIER, F. DUBOIS et R. PEYROUX : Matlib, une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation. In M. POTIER-FERRY, M. BONNET et A. BIGNONNET, éditeurs : *6ème Colloque National en Calcul des Structures*, volume 3, pages 25–32, Giens, 2003.

- [98] L. STARON, J.-P. VILOTTE et F. RADJAI : Preavalanche instabilities in a granular pile. *Physical Review Letters*, 89:204302, 2002.
- [99] G. STOKES : On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 8:287–319, 1845.
- [100] S. SUCCI : *The lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press, 2001.
- [101] SWIG : Web site : <http://www.swig.org>.
- [102] K. TO, P.-Y. LAI et H. K. PAK : Jamming of granular flow in a two-dimensional hopper. *Physical Review Letters*, 86:71–74, 2001.
- [103] V. TOPIN : *Matériaux granulaires cimentés : modélisation et application à l'albumen de blé*. Thèse de doctorat, Université Montpellier II, 2008.
- [104] V. TOPIN, J.-Y. DELENNE, F. RADJAI, L. BRENDEL et F. MABILLE : Strength and failure of cemented granular matter. *European Physical Journal E*, 23:413–429, 2007.
- [105] Y. TSUJI, T. KAWAGUCHI et T. TANAKA : Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, 77:79–87, 1993.
- [106] Y. P. TSUO et D. GIDASPOW : Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, 36:885–896, 1990.
- [107] M. UHLMANN : An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209:448–476, 2005.
- [108] P.-G. VINCENT, Y. MONERIE et P. SUQUET : Ductile damage of porous materials with two populations of voids. *Comptes Rendus Mécanique*, 336:245–259, 2008.
- [109] J. L. VINNINGLAND : *Granular Rayleigh-Taylor instability : a numerical and experimental study*. Thèse de doctorat, University of Oslo, 2007.
- [110] J. L. VINNINGLAND, O. JOHNSEN, E. G. FLEKKOY, R. TOUSSAINT et K. J. MALOY : Experiments and simulations of a gravitational granular flow instability. *Physical Review E*, 76:051306, 2007.
- [111] J. L. VINNINGLAND, O. JOHNSEN, E. G. FLEKKOY, R. TOUSSAINT et K. J. MALOY : Granular rayleigh-taylor instability. In *POWDERS AND GRAINS 2009 : PROCEEDINGS OF THE 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON MICROMECHANICS OF GRANULAR MEDIA*, volume 1145, pages 1067–1070, Golden (Colorado), 2009. AIP.
- [112] C. VOIVRET, F. RADJAI, J.-Y. DELENNE et M. S. EL YOUSOUFI : Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, 76:021301–12, 2007.
- [113] C. VOIVRET, F. RADJAI, J.-Y. DELENNE et M. S. EL YOUSOUFI : Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Physical Review Letters*, 102:178001–4, 2009.
- [114] A. WACHS : A dem-dlm/fd method for direct numerical simulation of particulate flows : Sedimentation of polygonal isometric particles in a newtonian fluid with collisions. *Computers & Fluids*, 38:1608–1628, 2009.

- [115] C. Y. WEN et Y. H. YU : Mechanics of fluidization. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, 62:100–111, 1966.
- [116] B. H. XU et A. B. YU : Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, 52:2785–2809, 1997.
- [117] A. A. ZICK et G. M. HOMS Y : Stokes-flow through periodic arrays of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 115:13–26, 1982.
- [118] I. ZURIGUEL, A. GARCIMARTIN, D. MAZA, L. A. PUGNALONI et J. M. PASTOR : Jamming during the discharge of granular matter from a silo. *Physical Review E*, 71:051303, 2005.
- [119] I. ZURIGUEL, L. A. PUGNALONI, A. GARCIMARTIN et D. MAZA : Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition. *Physical Review E*, 68:030301, 2003.

Titre : Ecoulement confiné d'un matériau granulaire en interaction avec un gaz, application à la relocalisation du combustible nucléaire.

Résumé : Ce travail de thèse est consacré à l'étude des écoulements biphasiques grains-gaz dans un régime de blocage (*jamming*). Ce régime — caractérisé par un écoulement interrompu en temps fini et fréquemment rencontré dans la nature ou les applications industrielles — présente un caractère stochastique. Sa compréhension nécessite la mesure de son débit, de ses fluctuations et de la probabilité d'arrêt liée à la géométrie de confinement, à la microstructure granulaire et au gaz interstitiel. Une approche numérique discrète couplant la méthode de la dynamique des contacts non-régulière (*Non Smooth Contact Dynamics*) pour la dynamique des particules et une méthode mésoscopique de type homogène équivalente pour le gaz est développée. La statistique d'écoulement obtenue est en bon accord avec des résultats expérimentaux de la littérature : le débit vérifie une loi de puissance croissante en fonction de l'ouverture avec un débit moyen affecté par la présence du gaz. Ces résultats statistiques quantitatifs sont appliqués à l'estimation du taux de relocalisation du combustible nucléaire fragmenté et confiné dans son tube-gaine présentant un ballonnement local suite à une situation accidentelle de type Perte de Réfrigérant Primaire.

Mots clefs : matériaux granulaires, blocage, éléments discrets, couplage fluide-grains, éléments finis, relocalisation.

Title : Confined dense particle-gas flow, application to nuclear fuel relocation.

Summary : In this work, we investigate particle-gas two-phase flows in the jamming regime where the flow stops in finite time. In this regime, which occurs quite often in nature and industrial applications, the flow is stochastic and needs therefore to be characterized by the jamming probability as well as the flow rate and its fluctuations that depend on the confining geometry, granular microstructure and gas properties. We developed a numerical approach based on the coupling of the Non Smooth Contact Dynamics for the solid phase and a mesoscopic method for the gas phase. We find that the flow rate as a function of the opening is well fit by a power law in agreement with reported experimental data. The presence of a gas affects only the mean flow rate, the flow statistics being sensibly the same as in the absence of the gas. We apply our quantitative statistical results in order to estimate the relocation rate of fragmented nuclear fuel inside its cladding tube as a result of a local balloon caused by an accident (loss-of-coolant accident).

Keywords : granular materials, jamming, discrete element method, simulation of particulate flows, finite element method, relocation.