République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Ibn Khaldoun de Tiaret Faculté des Sciences Appliquées Département de Génie Mécanique



## MÉMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'obtention du Diplôme de Master

Domaine : Sciences et Technologie Filière : Génie Mécanique Parcours : Master Spécialité : Énergétique

### Thème

## Modélisation de la conduction thermique pure dans un milieu granulaire par la méthode des éléments discrets

Préparé par :

### M. STAMBOULI Rafik

#### M. SAHLI Abdel Karim

Soutenu publiquement le : 03 / 10 / 2020, devant le jury composé de :

M.SAD.CHEMLOUL .N	Maître de Conférences "A" (Univ. Ibn Khaldoun)	Président
M. MEKROUSSI .S	Maître de Conférences "A" (Univ. Ibn Khaldoun)	Examinateur
M. BELMILOUD .M.A	Maître assistant "B" (Univ. Ibn Khaldoun)	Examinateur
M. ABOUSHIGHIBA .H	Maître de Conférences "B" (Univ. Ibn Khaldoun)	Encadreur
M. BENARIBA .A	Maître assistant "B" (Univ. Ibn Khaldoun)	Co- Encadreur

### Remerciement

Nous remercions tout d'abord le Dieu tout puissant de nous avoir guidés sur le chemin sur lequel nous nous trouvons aujourd'hui, et de nous avoir accordé le courage, la détermination et la volonté de mener à bien nos études, ainsi que ce projet.

Nous tenons à remercier aussi notre encadreur Dr.Aboshighiba Hicham et notre co-encadreur Dr.Benariba Boubakeur pour nous avoir suivi et aidé durant la réalisation de ce travail.

Nous remercions aussi l'ensemble du staff pédagogique et administratif du département du génie mécanique.

Enfin, un grand merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'accomplissement de ce travail.

### Dédicaces

Je dédie ce travail :

À mes précieux parents qui se sont toujours sacrifiés pour ma réussite, m'ont soutenu, m'ont épaulé, m'ont fait part de leur entière confiance et ont toujours eu foi en ma personne, en plus de m'avoir doté d'une éducation digne, leur amour a fait de moi ce que je suis aujourd'hui.

À toute ma famille, mes grands-parents, mes tantes, mes oncles et mes amis.

À mon binôme Karim et tous les efforts qu'il a suscités durant ce projet.

STAMBOULI RAFIK

## Dédicaces

Je dédie ce travail à Jack Donovan, Patrick Mcnamara et Paul Waggener.

SAHLI ABDELKRIM

#### TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENTS	ii
DEDICACES	iii
TABLE DES MATIERES	V
LISTE DES FIGURES	vii
LISTE DES TABLEAUX	viii
NOMENCLATURE	ix
TABLE DES ABRÉVIATIONS	xi
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I : LES MILIEUX GRANULAIRES Erreur !	Signet non défini.
I.1. Généralités sur les milieux granulaires	2
I.2. Historique	2
I.3. Description d'un mélange granulaire	3
I.4. Conduction thermique	4
I.4.1. Loi de Fourier	5
I.4.2. La conductivité thermique	5
I.5. Transfert de chaleur	5
I.5.1. Transfert de chaleur dans les systèmes à particules	6
I.5.2. Transferts thermiques dans un milieu granulaires	6
I.6. Le nombre de Biot	7
CHAPITRE II : LA METHODE DES ELEMENTS DISCRETS	9
II.1. Introduction	9
II.2. La MED	9
II.3. Bref historique de la MED	11
II.4. Différences entre la MED et les méthodes continus	

II.5. Classification des méthodes discrètes	12
II.5.1. La méthode de la mécanique quantique	13
II.5.2. Méthodes atomiques	15
II.5.3. Méthodes mésoscopique discrètes	17
II.6. Le principe de la MED	19
II.6.1. Détection des contacts	19
II.6.2. Discrétisation spatiale	20
II.6.3. Discrétisation temporelle	21
II.6.4. Calcul de la force inter-articulaire	22
II.6.5. Force de contact normale	22
II.6.6. Force d'amortissement normale	23
II.6.7. Force de contact tangentielle	23
II.6.8. Force d'amortissement tangentielle	24
II.6.9. Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$	24
II.6.9. Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$ II.6.10. Calcul du pas de temps critique	24
II.6.9. Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$ II.6.10. Calcul du pas de temps critique II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED	24 25 26
II.6.9. Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$ II.6.10. Calcul du pas de temps critique II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED	24 25 26 29
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>t</sub></li> <li>II.6.10. Calcul du pas de temps critique</li> <li>II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED</li> <li>CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED</li> <li>III.1. Introduction</li> </ul>	24 25 26 29 29
II.6.9. Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$ II.6.10. Calcul du pas de temps critique II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED III.1. Introduction III.2. Les paramètres géométriques	24 25 26 29 29 29
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>t</sub></li></ul>	24 25 26 29 29 29 29 29 29 21
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>t</sub></li> <li>II.6.10. Calcul du pas de temps critique</li> <li>II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED</li> <li>CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED</li> <li>III.1. Introduction</li> <li>III.2. Les paramètres géométriques</li> <li>III.3. Le modèle numérique par la méthode des éléments finis</li> <li>III.3.1. Le maillage</li> </ul>	24 25 26 29 29 29 29 31 31
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>t</sub></li> <li>II.6.10. Calcul du pas de temps critique</li> <li>II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED</li> <li>CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED</li> <li>III.1. Introduction</li> <li>III.2. Les paramètres géométriques</li> <li>III.3. Le modèle numérique par la méthode des éléments finis</li> <li>III.3.1. Le maillage</li> <li>III.4. Les résultats du modèle éléments finis</li> </ul>	24 25 26 29 29 29 29 31 31 34
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>r</sub></li></ul>	24 25 26 29 29 29 29 29 31 31 31 34 35
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>t</sub></li></ul>	24 25 26 29 29 29 29 29 29 31 31 31 31 34 35 38
<ul> <li>II.6.9. Détermination des raideurs de contact k<sub>n</sub> et k<sub>r</sub></li></ul>	24 25 26 29 29 29 29 29 31 31 31 31 34 35 38 42

#### LISTE DES FIGURES

Figure I-1 : Une classification physique des milieux divisés en fonction du diamètre des
particules : colloïdes (ex. : boue), poudres (ex. : farine), milieux granulaires
Figure I-2 : Rosace d'Apollonius
Figure II-1 : Échelles de longueur caractéristiques et échelles de temps
Figure II-2 : Exemples de paires de potentiels
Figure II-3 : Modélisation MDM d'un continuum
<b>Figure II-4 :</b> Méthodes de détection des voisins : (a) par un repérage dans une grille fixe,
(b) par la technique du halo
Figure II-5 : Loi de contact
Figure II-6 : Interpénétration entre deux particules
Figure II-7 : Interpénétration entre plusieurs particules
Figure III-1 : Modèle réaliste
Figure III-2 : Modèle approximatif
Figure III-3 : Le maillage des deux particules en contact, zone de contact 5mm
Figure III-4 : Le maillage des deux particules en contact, zone de contact 3mm
Figure III-5 : Le maillage des deux particules en contact zone de contact 1mm
Figure III-6 : Le maillage des deux particules en contact zone de contact 0.001mm 33
Figure III-7 : Rayon de contact extrêmement grand par rapport aux rayons des deux
sphères (5mm)
Figure III-8 : Rayon de contact grand par rapport aux rayons des deux sphères (3mm) 34
Figure III-9 : Rayon de contact petit par rapport aux rayons des deux sphères (1mm) 35
Figure III-10 : Rayon de contact extrêmement petit par rapport aux rayons des deux
sphères (0.001mm)
Figure III-11 : Contact et échange thermique entre plusieurs particules
Figure III-12 : Résultat obtenu par Eléments Finis, zone de contact (RC=0.1mm)
Figure III-13 : Résultat obtenu par MED, zone de contact ( <i>RC</i> =0.1mm)

#### LISTE DES TABLEAUX

Tableau III-1 : Paramètres de la simulation.	31
Tableau III-2 : Comparaison des résultats obtenus par la MED et MEF	39

#### NOMENCLATURE

$a_i, a_j$	Les rayons des particules en contact	[mm]
Bi	Nombre de Biot	
C <sub>p</sub>	La chaleur spécifique	[J/kg·°C]
C <sub>n</sub>	Le coefficient d'amortissement	
D	Diamètre	
E <sub>ij</sub>	Le module de Young effectif	
F <sup>ext</sup>	Vecteur des efforts externes	
G	Le module de cisaillement	[N/mm <sup>2</sup> ]
H <sub>c</sub>	La conductance de contact	
J	Le moment d'inertie	$[Kg.m^2]$
k <sub>t</sub>	La raideur tangentielle	[N/m]
$k_n$	La raideur normale	[N/m]
М	La matrice de masse généralisée du système	
$m_p$	Le vecteur de masse de la particule	
m	La masse réduite	[Kg]
n	Le nombre de particules du système	
R	Le rayon de la particule	[mm]
$R^{\alpha}$	Vecteur des efforts interne	
$r^p$	Le vecteur de position de la particule	
$r_n$	La force normale	[N]
$T_i, T_j$	Les températures des particules	[°C]
t	Le temps	[s]
u	Le vecteur des coordonnées généralisées	
<i>u</i> <sub>n</sub>	La distance normale	[m]

Le vecteur des vitesses généralisées	
Le vecteur des accélérations généralisées	
La vitesse relative	[m/s]
La vitesse tangentielle	[m/s]
Les volumes des particules	[m <sup>3</sup> ]
La position des particules	
Masse volumique	[kg/m <sup>3</sup> ]
Viscosité cinématique	[m <sup>2</sup> /s]
La conductivité thermique	[W/m ·°C]
La quantité de chaleur	[J]
Un champ externe	
Le laplacien	
La constante de Plank	
La fonction d'onde	
La profondeur du puits de potentiel	[m]
La distance finie	[m]
Le coefficient de Poisson	
Viscosité dynamique	[Pa.s]
	Le vecteur des vitesses généralisées Le vecteur des accélérations généralisées La vitesse relative La vitesse tangentielle Les volumes des particules La position des particules Masse volumique Viscosité cinématique La conductivité thermique La quantité de chaleur Un champ externe Le laplacien La constante de Plank La fonction d'onde La profondeur du puits de potentiel La distance finie Le coefficient de Poisson Viscosité dynamique

## TABLE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

MED	Méthode des Elément Discrets	
CFD	Computational Fluid Dynamics	Dynamique des fluides computationnelle
MEF	Méthode des Elément Finis	
MD	Méthodes Discrètes	
NSCD	Non Smooth Contact Dynamics	Dynamique de contact non lisse
CD	Contact Dynamics	Dynamique des contacts
SCD	Smooth Contact Dynamics	Dynamique de contact lisse
GEM	Granular Element Method	Méthode des éléments granulaires
MMQ	Méthode de la Mécanique Quantique	
MA	Méthode Atomique	
MDM	Méthode Discrète Mésoscopique	
MCQ	Monte Carlo Quantique	
CQ	Chimie Quantique	
TFD	Théorie Fonctionnelle de la <b>D</b> ensité	
ADL	l'Approximation de la Densité Locale	
MM	Mécanique Moléculaire	

## INTRODUCTION GENERALE

#### INTRODUCTION GENERALE

Les milieux granulaires désignent les assemblées de grains indépendants, ils sont présents partout : poudres, impression 3D métaux, géo-mécanique, agriculture, médicaments...

La difficulté dans leur modélisation réside dans le nombre important des particules et les interactions entre elles. Depuis le développement de la méthode des éléments discrets par Cundall comme solution au problème de modélisation ; cette méthode est devenue le choix préféré pour ce type de phénomène.

L'objectif de ce travail est d'introduire cette méthode pour le traitement de la conduction thermique pure dans ce genre de milieu. Cette étude va à cheval avec une autre effectuée dans la spécialité Construction dans un contexte de cinématique sans rapport de chaleur. L'idée c'est de réunir les deux études pour traiter le transfert de chaleur dans un milieu granulaire en « écoulement ».

Pour cela l'étude est organisée en trois chapitres. Le premier présent une recherche bibliographique sur les milieux granulaire et les concepts de base de transfert thermique.

Ensuite, dans le chapitre II la méthode des éléments discrets (MED) qui est une méthode numérique sans maillage est introduite en commençant par son principe, l'historique de son développement et son application au problème faisant intervenir le transfert de chaleur.

Le dernier chapitre, c'est-à-dire le troisième, est consacré à l'application de la MED à un problème résolue par une autre méthode numérique qui est la méthode des éléments finis.

Ce mémoire est terminé par une conclusion générale dédiée aux conclusions où nous en tirons les plus importantes et nous proposons les perspectives à suivre pour un travail futur.

1

## CHAPITRE I LES MILIEUX GRANULAIRES

#### I.1. Généralités sur les milieux granulaires

La matière granulaire est un assemblage de particules solides discrètes dispersées dans un fluide interstitiel. Les flux de matériaux granulaires ont de nombreuses applications dans des industries telles que le transport du charbon, du minerai, des plastiques, des céréales, des concentrés minéraux, du sable, des poudres, des produits alimentaires ou des produits pharmaceutiques. Les collisions interactives entre les particules, qui entraînent des mouvements aléatoires des particules, sont le mécanisme dominant qui influence le comportement de l'écoulement. En raison de l'analogie entre le mouvement aléatoire des particules dans un écoulement granulaire et le mouvement des molécules dans un gaz, la théorie cinétique du gaz dense [1].

On appelle généralement milieu granulaire une collection de particules solides macroscopiques, typiquement de taille supérieure à 100 µm [2].



**Figure II-1 :** Une classification physique des milieux divisés en fonction du diamètre des particules : colloïdes (ex. : boue), poudres (ex. : farine), milieux granulaires.

#### I.2. Historique

Des penseurs exceptionnels ont contribué aux connaissances en physique de l'environnement granulaire. Dès l'Antiquité, Apollonius de Perge (262-190 av. JC) en Grèce Étant donné les noms familiers d'ellipse, de parabole et d'hyperbole, l'accent est mis sur le problème de remplissage. L'une de ses idées s'appelait "Le dixième problème d'Apollonius", ce qui l'a incité à développer une méthode pour trouver un cercle tangent aux trois autres cercles. Il y en a généralement 8. En utilisant ce principe de cercles tangents, il imagine déjà un remplissage 2D très dense, illustré sur la (figure I.2) par une

rosace qui porte son nom. Même alors, le concept intuitif de densité de poils granulaires a été suggéré : afin d'obtenir un milieu granulaire avec une densité très élevée, une grande différenciation de la taille des grains doit être introduite. Géométriquement, un tel empilement est facilement concevable. Cependant, en pratique, un milieu granulaire présentant une polydispersité élevée des particules pose des problèmes de ségrégation. En d'autres termes, il est difficile d'obtenir des mélanges homogènes. Ces problèmes sont aujourd'hui illustrés dans la mise au point de bétons à hautes performances où des particules de différentes tailles sont mélangées afin d'obtenir des densités élevées.



Figure II-2 : Rosace d'Apollonius.

Le modèle numérique DEM (Discret Element Method ou Méthode des Eléments Discrets en français) décrivant le comportement des grains. Michel Faraday (1791-1867) et ses recherches sur l'instabilité de la dynamique des fluides se sont intéressés au rôle de l'air dans la vibration périodique des milieux granulaires. William Rankine (1820-1872) a étudié l'effet du frottement dans les milieux granulaires à partir des travaux de Coulomb. Il introduit les concepts d'état passif et d'état actif. Vient ensuite Janssen, très intéressé par la saturation de pression dans le grenier. De plus, Reynolds s'intéresse au phénomène de gonflement observé lors du cisaillement du milieu granulaire [3].

#### I.3. Description d'un mélange granulaire

L'expression "mélange granulaire" désigne un milieu composé d'un nombre fini de familles particules de différents diamètres. Par milieu granulaire, on entend une large

gamme de matériaux extrêmement divers : produits alimentaires, produits chimiques, matériaux de construction (béton, sols, etc.), etc. les zones étudiées, les paramètres pertinents du milieu granulaire sont différents : la présence ou l'absence d'eau, la géométrie des particules, la granularité du milieu, les propriétés (comme le frottement) des grains, le milieu ordonné ou aléatoire, etc.

Quel que soit le domaine d'étude, un milieu granulaire est caractérisé par :

- Sa porosité (ou son complément à l'unité qu'est la compacité) correspondant au pourcentage volumique de vide que contient le milieu ;
- Les nombres de coordination correspondent à la moyenne sur l'ensemble du milieu du nombre de contact par particule. Pour des mélanges granulaires, un nombre de coordination moyenne est également déterminé pour chaque famille granulaire, ils sont alors appelés les nombres de coordination partiels;
- La distribution des contacts des différents types de contact pour des mélanges granulaires uniquement : un milieu composé de différentes familles de particules présente divers types de contact : contacts entre particules d'une même famille ou de deux familles différentes [4].

#### I.4. Conduction thermique

La conduction est le transfert d'énergie des particules les plus énergétiques d'une substance vers les particules adjacentes moins énergétiques à la suite d'interactions entre les particules. La conduction peut avoir lieu dans les solides, les liquides ou les gaz. Dans les gaz et les liquides, la conduction est due aux collisions et à la diffusion des molécules lors de leur mouvement aléatoire. Dans les solides, elle est due à la combinaison de vibrations des molécules dans un réseau et le transport d'énergie par des électrons. Le taux de conduction de la chaleur à travers un milieu dépend de la géométrie du milieu, de son épaisseur et de la matière du milieu, ainsi que de la différence de température à travers le milieu [5].

#### I.4.1. Loi de Fourier

Pour la conduction thermique, l'équation de taux est connue sous le nom de loi de Fourier, qui est exprimée pour un solide homogène et isotrope (c'est-à-dire un matériau sur lequel la conductivité thermique est indépendante de la direction) comme :

$$\vec{q}(\vec{r},t) = -\lambda \vec{\nabla} T(\vec{r},t) \tag{I.1}$$

Où  $\overrightarrow{V}T(\overrightarrow{r},t)$  est le vecteur de gradient de température normal à la surface (°C/m), le vecteur de flux de chaleur  $\overrightarrow{q}(\overrightarrow{r},t)$  représente le flux de chaleur par unité de temps et unité de surface de la surface isotherme dans le sens de la diminution de la température (W/m<sup>2</sup>), et  $\lambda$  est la conductivité thermique du matériau qui est une quantité scalaire positive (W/m · °C) [6].

#### I.4.2. La conductivité thermique

La conductivité thermique ( $\lambda$ ) est le quotient de la densité du flux thermique par le gradient de température. Cela correspond à la quantité d'énergie passant entre deux surfaces d'une unité de surface séparées par une unité de longueur et est exprimée en en (W/m.°C) [7].

#### I.5. Transfert de chaleur

Le transfert de chaleur est le transport d'énergie entre des matériaux en raison d'une différence de température. Il existe trois modes de transfert de chaleur, à savoir la conduction, la convection et le rayonnement. La conduction est le mode de transfert de chaleur dans lequel l'échange d'énergie a lieu dans des solides ou des fluides au repos (c'est-à-dire sans mouvement de convection résultant du déplacement de la partie macroscopique du milieu) de la région de haute température à la région de basse température. Les molécules présentes dans les liquides et les gaz ont une liberté de mouvement, et en passant d'une région chaude à une région froide, elles transportent de l'énergie avec elles. Le transfert de chaleur d'une région à une autre, dû à un tel mouvement macroscopique dans un liquide ou un gaz, ajouté au transfert d'énergie par conduction dans le fluide, est appelé transfert de chaleur par convection. Tous les corps émettent un rayonnement thermique à toutes les températures. C'est le seul mode qui ne nécessite pas de milieu matériel pour que le transfert de chaleur ait lieu. La température est une quantité

scalaire qui décrit l'énergie interne spécifique de la substance. La répartition de la température dans un corps est déterminée en fonction de la position et du temps, puis le flux thermique dans le corps est calculé à partir des lois relatives au flux thermique et au gradient de température [8].

#### I.5.1. Transfert de chaleur dans les systèmes à particules

De nombreux processus industriels impliquent des matériaux particulaires qui subissent un transfert de chaleur. La connaissance des propriétés thermiques du système est donc essentielle à la bonne conception et au bon fonctionnement de ces procédés. En général, trois phénomènes connexes, la conduction, le rayonnement et la convection, tiennent compte du transport de chaleur dans tout milieu. La contribution de la conduction est généralement la plus importante dans les matériaux particulaires. Cette contribution dépend de la conductivité du matériau solide, des caractéristiques des contacts inter particulaires (la conductance de contact) et de la structure de l'emballage des particules. La contribution du rayonnement dépend de la température et devient significative à des températures élevées (> 1000 K). La convection et la conduction à travers les pores peuvent être négligées lorsque la conductivité thermique du fluide remplissant les espaces vides est faible et pour des températures basses à modérées [9].

#### I.5.2. Transferts thermiques dans un milieu granulaires

Le transfert de chaleur par conduction est représenté par la relation de Fourier. Ce sont les flux de chaleur à l'intérieur de chaque particule, et ces flux de chaleur se produiront une fois qu'un gradient de température est établi dans le solide. Le deuxième mode de transfert de chaleur dans notre modèle est le contact physique entre les particules. Ce phénomène peut être quantifié par la conductance de contact entre particules, qui est fortement influencée par les propriétés de l'élément de contact et les propriétés thermo physiques.

Le flux thermique transféré entre deux particules i et j est modélisé par conductance de contact :

$$Q_{ij} = H_c \times \left(T_j - T_i\right) \tag{I.2}$$

Où  $Q_{ij}$  est la quantité de chaleur de la particule i reçu par la particule *j*,  $H_c$  la conductance de contact,  $T_i$  et  $T_j$  les températures respectivement des particules *i* et *j*.

Les données sur la conductance de contact sont rares et fortement liées à la nature et les propriétés thermo-physiques des éléments en contact.

L'évolution de la température de la particule i, en considérant qu'elle est en contact avec N particules voisines est donnée par l'expression suivante (où  $\rho$ .  $C_P$ . V est la capacité thermique de la particule).

$$\rho. C_P. V. \frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^{N} H_C \left( T_j - T_i \right)$$
(I.3)

#### I.6. Le nombre de Biot

Le nombre de Biot est un nombre qui exprime la balance entre la résistance au transfert thermique entre les particules et celui à travers la particule elle-même.

Si la résistance entre les particules est trop importante comparée à celle à l'intérieur de la particule (ce qui est exprimé par un nombre de Biot très petit) le champ de température devient vite uniforme au sein de la particule.

L'équation (I.3) suppose que la température de chaque particule est uniforme. Il est donc nécessaire de vérifier si la résistance du flux transmis dans chaque particule est significativement inférieure à la résistance des deux particules en contact:

$$B_i = \frac{H_C}{\lambda.\,\pi.\,R} \ll 1 \tag{I.4}$$

Où *Bi* est le nombre de Biot,  $\lambda$  et *R* sont respectivement la conductivité thermique et le rayon de la particule [10].

# CHAPITRE II LA METHODE DES ELEMENTS DISCRETS

#### **CHAPITRE II : LA METHODE DES ELEMENTS DISCRETS**

#### **II.1. Introduction**

Pour avoir une solution approchée, la modélisation numérique d'un milieu hétérogène peut être réalisée par des approches numériques diverses. Ce chapitre présente les principes de la méthode des éléments discrets qui est plus adaptée aux problèmes de discontinuité, mais peut aussi traiter des milieux continus comme les structures présentant des hétérogénéités.

#### II.2. La MED

La méthode des éléments discrets initiée par P. Cundall et O. Strack [11] est l'un des outils les plus puissants. La MED peut simuler le mouvement des particules et l'interaction entre les particules. Il prend en compte non seulement les effets géométriques et matériels évidents, tels que la forme des particules, la non-linéarité du matériau, la viscosité, le frottement, etc., mais il considère également divers effets. Le champ physique du milieu environnant, voire la réaction chimique [12].

La modélisation de matériaux granulaires discrets a récemment été largement acceptée comme outil de recherche pour étudier le comportement mécanique des matériaux granulaires [9].

Les problèmes les plus fascinants et les plus intéressants en mécanique sont généralement les plus difficiles à résoudre. Avec les capacités informatiques actuelles, des problèmes discrets peuvent être résolus même si un grand nombre de composants sont impliqués. Les méthodes numériques utilisées pour résoudre de tels problèmes seront appelées méthodes discrètes (MD).

Dans la plupart des cas, le problème doit être subdivisé à l'infini en composantes infinitésimales, ce qui entraîne des équations de gouvernance locales (généralement différentielles) impliquant des composantes infinies. Ces problèmes sont appelés problèmes «continus». Dans un problème continu, on suppose que le matériau étudié est continu et remplit complètement l'espace qu'il occupe.

9

La puissance de l'ordinateur étant limitée, les problèmes continus ne peuvent être résolus avec précision que par des techniques mathématiques, et les techniques mathématiques sont généralement limitées à des situations très simples [13].

Considérée comme une alternative aux méthodes continues (différences, volumes et éléments finies), la Méthode des Eléments Discrets (MED), également appelée Méthode des Eléments Distincts, est apparue dans les années 70 et est de nos jours en plein essor. La MED offre la possibilité de modéliser numériquement des effets cinématiques et dynamiques induits par un grand nombre de particules en interaction.

Aujourd'hui, la MED est indéniablement considérée comme l'une des méthodes numériques les plus efficaces dans la modélisation de nombreuses applications en ingénierie, telles que :

- les écoulements granulaires,
- la mécanique des poudres,
- la mécanique des roches,
- etc...

Plus récemment, la MED a été associée à d'autres méthodes numériques telles que les méthodes des volumes et éléments finies dans le cadre d'approches couplées afin de tirer bénéfice des avantages de chaque méthode. La MED a permis ainsi de franchir un nouveau cap dans la compréhension de phénomènes complexes à des échelles très fines, contrairement aux méthodes continues, qui se compliquent surtout en présence de discontinuités.

Principalement, deux types de modélisation discrète apparaissent dans la littérature, selon que l'on prenne en compte les interactions entre particules avec des lois régulières ou non.

Le premier type de modélisation discrète est base sur l'approche "Non Smooth Contact Dynamics" (NSCD), utilisant la mécanique non régulière avec une prise en compte des interactions entre particules sans interpénétration. Dans ce type de loi, aucune flexibilité au contact inter-particulaire n'est autorisée. Parmi les méthodes de résolutions pour ce type de loi, on peut citer l'approche "Contact Dynamics" (CD), développée par Jean et Moreau [14], qui est capable de traiter un grand nombre de contacts avec un schéma d'intégration implicite. Le deuxième type de modélisation est base sur l'approche "Smooth Contact Dynamics" (SCD) qui se distingue de la première (NSCD) par la possibilité d'une interpénétration entre les particules en contact. Parmi les méthodes discrètes basées sur la SCD, on peut citer la "Discret Element Method" (DEM) proposée par Cundall [15], qui suppose que l'interaction entre particules est régie par des modèles de type ressort et amortisseur. Dans le cadre des approches régulières, il y a également la "Granular Element Method" (GEM) développée par Kishino [16]. Les interactions aux contacts sont modélisées de la même manière que dans la DEM avec l'avantage de s'affranchir d'un amortissement virtuel pour stabiliser le système. Cette approche utilise un schéma de résolution itératif.

#### II.3. Bref historique de la MED

Les matériaux granulaires sont constitués de particules qui se déplacent indépendamment l'une et l'autre et qui interagissent aux points de contact. Cette nature discrète rend le comportement mécanique de ces types de matériaux très complexe et, à ce jour, la définition d'une loi de comportement capable de représenter tous les aspects de leur comportement reste un problème ouvert.

Depuis une vingtaine d'années une méthode numérique a été développée pour modéliser le comportement de ce type de milieux. Cette méthode appelée la Méthode des Eléments Discrets (MED) traite un matériau granulaire comme un assemblage de particules en interaction au niveau des contacts qui peuvent être rompus ou formés à chaque pas de temps. La plupart des développements et des applications de la méthode des éléments discrets sont issus des travaux pionniers de Cundall (1971,1974, 1979), destinés à la modélisation bidimensionnelle, d'une part de milieux rocheux fracturés et, d'autre part, de milieux granulaires formés de cylindres. On notera aussi la méthode numérique originale développée par J.-J. Moreau (1.979,1988) et M. Jean et al. (1993).

La MED a permis au cours de ces dernières années de mettre en évidence et de mieux comprendre les phénomènes locaux (géométriques, cinématiques, statiques) qui sont à la base des phénomènes observés à l'échelle d'un échantillon. Elle a, en particulier, permis de mieux appréhender l'évolution de la structure interne du milieu au cours de la sollicitation, et a pu être utilisée comme aide au développement de modèles de comportement pour les sols granulaires (Bathurst et al., 1,988) [17].

#### II.4. Différences entre la MED et les méthodes continus

La méthode des éléments discrets (DEM), originellement utilisée pour étudier les matériaux granulaires, permet d'aborder des problèmes pour lesquels les modèles basés sur la mécanique des milieux continus sont peu adaptés. Cependant, plusieurs études ont été menées pour modéliser des matériaux continus avec la MED. En revanche, l'une des difficultés réside dans le choix de lois d'interactions pour retrouver un comportement macroscopique satisfaisant. Parmi les méthodes numériques récemment développées, nombreuses sont celles qui concernent des échelles microscopiques, voire nanoscopiques. Cependant, à cette échelle, l'hypothèse de continuité de la matière n'est plus valable, et, il est alors nécessaire de prendre en compte dans le comportement d'un matériau, son comportement local. Les modèles de dynamique moléculaire permettent de prendre en compte la discontinuité de la matière à l'échelle nanoscopique, mais le passage de cette échelle à l'échelle de la mécanique qui permet de simuler le comportement d'une pièce ou d'un procédé n'est pas possible avec les moyens de calcul actuels. Une des solutions consiste donc à bâtir un modèle mésoscopique qui prend en compte un grand nombre de discontinuités, mais à une échelle permettant de simuler ensuite un volume compatible avec une étude mécanique. Les modèles par éléments discrets, historiquement développés pour modéliser les matériaux granulaires. s'inscrivent dans cette optique. Depuis quelques années, plusieurs études ont été menées an d'utiliser la méthode des éléments discrets pour la simulation de matériaux continus [18].

#### II.5. Classification des méthodes discrètes

Selon l'échelle d'analyse, le MD le plus utilisé en simulation numérique peut être divisé en trois catégories: la méthode de la mécanique quantique (ab initio) (MMQ), la méthode atomique (MA) et la MD mésoscopique (MDM) (Figure II-1).



Figure II-1 : Échelles de longueur caractéristiques et échelles de temps

pour les méthodes numériques.

#### II.5.1. La méthode de la mécanique quantique

Les MMQ sont utilisés pour la simulation de matériaux à l'échelle atomique (~  $10^{-9}$ m), dans laquelle les électrons sont les acteurs (Figure II-1). Les molécules sont traitées comme des collections de noyaux et d'électrons dont l'interaction est directement dictée par leur état MQ, sans aucune référence aux "liaisons chimiques". Toutes ces méthodes découlent finalement de l'équation de Schrödinger mise en lumière pour la première fois en 1925. La forme entièrement dépendante du temps de cette équation pour une seule particule p (par exemple un électron) est exprimée par :

$$\left[-\frac{\hbar}{2m^{p}}\left(\nabla^{2}+\Phi(r^{p},t)\right)\right]\Psi(r^{p},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(r^{p},t)}{\partial t}$$
(II.1)

Où mp et rp sont, respectivement, le vecteur de masse et de position de la particule d'intérêt, t désigne le temps,  $\Phi$  est un champ externe (par exemple le potentiel électrostatique),  $\nabla 2$  est le Laplacien,  $\hbar$  est la constante de Plank divisée par  $2\pi$ , i est la racine carrée de -1 et  $\Psi$  est la fonction d'onde qui caractérise le mouvement de la particule. En fait, la fonction d'onde  $\Psi$  peut être correctement obtenue pour toutes les particules d'un système, qui, pour les matériaux cristallins, est en fait réduit à la cellule unitaire primitive en raison de la symétrie de translation. Cependant, l'équation (II.1) nécessite que cette fonction soit exprimée pour les particules individuelles. Pour contourner ce problème, la technique la plus couramment utilisée consiste à écrire la fonction d'onde globale comme un produit de la fonction d'onde d'une seule particule(le déterminant de Slater), puis de reformuler l'équation de Schrödinger sous-jacente en fonction de ces fonctions. La résolution de cette équation donne les mouvements des particules, qui à leur tour donnent la structure moléculaire et l'énergie parmi d'autres observables, ainsi que des informations sur les liaisons. Le défi du développement des MMQ est qu'une telle équation ne peut être résolue exactement que pour quelques problèmes, par exemple un système à un électron (l'atome d'hydrogène), et que des approximations doivent être faites. L'approximation communément utilisée est le "Hartree-Fock" qui consiste à remplacer la "correcte" description des mouvements des particules (électrons) par une image dans laquelle les particules se comportent essentiellement comme des corps indépendants. Plusieurs autres approximations peuvent être trouvées dans la littérature. Ces approximations constituent la principale différence entre les MMQ. Des exemples de ces méthodes sont la méthode de Monte Carlo quantique (MCQ) [FOU 01] et la chimie quantique (CQ) [SZA 89]. Ces méthodes nous permettent de traiter les électrons de manière explicite et précise, ce qui les rend très précises mais trop exigeantes sur le plan informatique pour traiter plus de quelques dizaines d'électrons. Les autres MMQ sont la théorie fonctionnelle de la densité(TFD) et l'approximation de la densité locale (ADL) [HOH 64, PAY 92]. Dans ces approches, l'équation primaire de Schrödinger est exprimée en termes de densité de particules plutôt qu'en fonctions d'onde. Bien qu'elles soient moins précises que le MCQ ou le CQ, ces méthodes peuvent être facilement appliquées à des systèmes contenant plusieurs centaines d'atomes pour les propriétés statiques. Les simulations dynamiques avec TFD et ADL sont généralement limitées à des échelles de temps de quelques picosecondes.

Dans l'ensemble, les méthodes de MQ sont généralement très précises puisqu'elles offrent la possibilité d'effectuer des simulations sans qu'il soit nécessaire de procéder à des réglages préalables. Cependant, elles sont extrêmement coûteuses et ne peuvent être appliquées que sur de très petits domaines de quelques nanomètres. En effet, elles traitent des électrons dans un système et, même si certains des électrons sont ignorés (comme dans les approches semi-empiriques), un grand nombre de particules doivent encore être prises en compte [13].

#### II.5.2. Méthodes atomiques

Les MA sont utilisées pour la simulation de matériaux à l'échelle microscopique (~  $10^{-6}$ m), où les atomes sont les acteurs. Ces méthodes ignorent les mouvements électroniques et calculent l'énergie d'un système en fonction des positions des atomes uniquement. Cette façon de calculer l'énergie tire sa légitimité de l'approximation de Born-Oppenheimer, qui postule que les électrons s'ajustent aux nouvelles positions atomiques beaucoup plus rapidement que les noyaux atomiques. Les lois d'interaction entre les particules (atomes) peuvent être décrites par des potentiels interatomiques empiriques qui encapsulent les effets de la liaison (médiée par les électrons) entre elles. Ces potentiels peuvent dépendre de la distance entre les particules, des angles entre les plans, etc. L'équation (II. 2) donne la forme générale de ces potentiels :

$$\Phi(r1, r2, ..., rN) = \Sigma p\Phi1(rp) + \Sigma p \Sigma q, q > p\Phi2(rp, rq)$$
$$+\Sigma p \Sigma q, q > p \Sigma m, m > q\Phi3(rp, rq, rm)$$
$$+ \cdots$$
(II.2)

où rp est le vecteur de position d'une particule (atome) p, N est le nombre total de particules,  $\Phi l$  est la partie à une particule de  $\Phi$  (en raison du champ externe ou des conditions limites) et  $\Phi 2$  et  $\Phi 3$  sont, respectivement, les parties à deux et trois particules de  $\Phi$  en raison de l'interaction entre les particules. Les potentiels interatomiques peuvent inclure plusieurs paramètres qui peuvent être obtenus par étalonnage à l'aide de données expérimentales ou par des calculs de MQ. Lorsque seules les parties de  $\Phi 2$  sont présentes, la partie associée de  $\Phi$  est appelée le potentiel de pair, par exemple le potentiel de sphère dure et le potentiel de Lennard-Jones. Le potentiel de la sphère dure (figure II-2-a) est la partie la plus simple (sans aucune interaction cohésive) et est généralement utilisé dans l'étude théorique de certains problèmes idéalisés.

$$\Phi(l^{pq}) = \begin{cases} \infty \text{ for } l^{pq} \le l_0 \\ 0 \text{ for } l^{pq} > l_0 \end{cases}$$
(II. 3)

Où  $l_{pq} = ||_rq - r_p_||$ est la distance entre deux particules p et q et l0 est la distance de coupure. Le potentiel de Lennard-Jones (figure II-2-b) est plus complexe et plus réaliste pour modéliser certaines interactions physiques, telles que l'interaction de van der Waals dans les gaz inertes et les systèmes moléculaires :

$$\Phi(l^{pq}) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{l^{pq}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{l^{pq}}\right)^6 \right] \varepsilon \left[ \left(\frac{l_m}{l^{pq}}\right)^{12} - 2\left(\frac{l_m}{l^{pq}}\right)^6 \right]$$
(II. 4)

Où  $\varepsilon$  est la profondeur du puits de potentiel (la région entourant le minimum de potentiel),  $\sigma$  est la distance finie à laquelle le potentiel inter particulaire est nul et  $l_m$  est la distance à laquelle le potentiel atteint son minimum. Plusieurs articles fournissant les paramètres de Lennard-Jones pour certains systèmes moléculaires peuvent être trouvés dans la littérature [ASH 76, HAL 75]. La paire de potentiels interatomiques est actuellement la plus utilisée en raison de sa simplicité et de sa capacité relativement bonne à modéliser plusieurs systèmes moléculaires. Cependant, dans certains problèmes complexes, des potentiels multi corps plus sophistiqués (y compris  $\Phi 3$  et des termes plus élevés) sont nécessaires pour reproduire correctement les mécanismes d'interaction impliqués. En connaissant le potentiel interatomique  $\Phi$ , on peut obtenir les charges agissant sur les particules (atomes). Ensuite, la deuxième loi de Newton peut être appliquée pour trouver les mouvements de ces particules. C'est l'idée clé des MA. Des exemples de ces méthodes sont la mécanique moléculaire (statique) (MM) [HEH 03], la dynamique moléculaire (DM) [ALD 57, ALD 59] et MC [MET 49], qui sont largement utilisées dans la simulation moléculaire. Bien qu'ils soient moins précis que les MMQ, les MA sont relativement peu coûteux (par rapport aux MMQ) et peuvent fournir des informations sur des processus atomiques impliquant des systèmes considérablement importants pouvant atteindre 109 atomes [ABR 02]. Néanmoins, la simulation dynamique avec les méthodes MA est généralement limitée à des échelles de temps de quelques nanosecondes, ce qui peut être paralysant pour la simulation de problèmes mécaniques réalistes [13].



(**b**) Le potentiel de Lennard-Jones.

Figure II-2 : Exemples de paires de potentiels.

#### II.5.3. Méthodes discrètes mésoscopique

Pour surmonter les limites de temps des MMQ et des MA, une autre génération de MD a été développée : les MDM. Les méthodes MDM peuvent être utilisées pour la simulation de matériaux à l'échelle mésoscopique ( $\sim 10^{-4}$  m), où les défauts du réseau tels que les dislocations, la propagation des fissures et d'autres éléments microstructuraux sont les acteurs. À cette échelle, le système est trop petit pour être considéré comme un continuum et trop grand pour être simulé efficacement à l'aide de QMG ou de MA. Plus précisément, l'échelle mésoscopique peut être définie comme une

échelle intermédiaire à laquelle les phénomènes microscopiques (par exemple les mouvements des particules) peuvent être supposés en équilibre mécanique, mais ne peuvent être décrits par la mécanique du continuum.

Les MDM peuvent être considérés comme une généralisation des MA, où des lois d'interaction plus complexes sont utilisées. Ces lois d'interaction sont généralement dérivées par calibrage ou à partir de théories phénoménologiques qui englobent les effets des interactions entre les atomes. Dans les MDM, les degrés de liberté atomiques ne sont pas explicitement traités et seules les particules de grande taille sont modélisées. À l'origine, cette classe de méthodes a été développée pour modéliser les mouvements au sein des matériaux granulaires en mécanique des roches [CUN 71]. Des travaux ultérieurs ont étendu cette classe pour étudier les dommages dans diverses géométries telles que le béton [HEN 04b] et les roches [BOB 09]. Plus récemment, des tentatives d'appliquer cette classe de méthode à des matériaux continus (continua), tels que la céramique [TAN 09] et les verres [AND 13, JEB 13b, JEB 13a, AND 12b], ont vu le jour. Dans ces tentatives, le continu est également modélisé par un agglomérat d'éléments discrets (particules ou nœuds) qui interagissent via des liens cohésifs bilatéraux pour assurer la cohésion du matériau. Différents liens de cohésion sont testés en fonction des propriétés physiques du matériau étudié [13].



(a) État assouplissant.

(b) État de chargement.

Figure II-3 : Modélisation MDM d'un continuum.

#### II.6. Le principe de la MED

La MED permet l'étude de collections de grains en interaction. Elle consiste à décrire le numérique (particules mouvement des particules composant le système, c'est-à-dire de calculer la variation de la quantité de mouvement et du moment angulaire des particules à partir de la loi fondamentale de la dynamique (deuxième loi de Newton). Pour faire évoluer différents éléments du modèle, parois) dans le temps et dans l'espace, il est nécessaire de définir une démarche ou algorithme.

#### II.6.1. Détection des contacts

Cette étape est la plus coûteuse de la MED. Elle dépend de plusieurs facteurs, tels que le nombre de particules et la géométrie, etc...

Classiquement, la recherche des voisins pour chaque particule  $\Omega i$  se fait pour tous les antagonistes  $\Omega j$  avec j > i.

On doit effectuer  $\frac{n(n-1)}{2}$  vérifications, ce qui est très rapidement coûteux dès que n devient élevé, où n est nombre de grains dans l'échantillon.

Le temps de calcul avec une telle méthode croît comme  $O(n^2)$ , ce qui rend donc nécessaire la mise en œuvre d'un algorithme de détection de contact optimise.

#### > Etapes d'algorithme de résolution par la MED

- 1. Données;
- 2. Conditions initiales et aux limites ;
- 3. Nombre et géométrie des particules ;
- 4. Conditions initiales et aux limites ;
- 5. Tant que: (t  $\leq$  Temps de calcul) faire :
  - a. Détection de contact ;
  - b. Calcul des efforts d'interactions ;
  - c. Loi de Newton: calcul des accélérations ;
  - d. Schéma d'intégration: vitesses et positions des particules ;
  - e. Nouvelle configuration ;
  - f. Post-traitement;
  - g.  $t = t + \Delta t$ ;
- 6. Fin tant que.

Plusieurs méthodes existent dans la littérature pour réduire le coût numérique de la détection des contacts.

Parmi ces techniques, il y a celle proposée dans [19], qui consiste à quadriller l'espace d'étude. Chaque particule localisée dans une case peut être en contact avec une particule voisine située dans la même case ou dans l'une des 8 cases adjacentes (**Erreur ! Source du renvoi introuvable.** (a)).

Une autre technique, appelée "halo" (**Erreur ! Source du renvoi introuvable.** (b)), consiste à maintenir pour chaque particule la liste de ses plus proches voisins. Chaque particule est entourée d'un halo circulaire ou carre, dont elle est le centre, où seules les particules localisées dans ce halo sont prises en compte dans la détection des contacts.



Figure II-4 : Méthodes de détection des voisins : (a) par un repérage dans une grille fixe, (b) par la technique du halo.

#### II.6.2. Discrétisation spatiale

La simulation numérique des milieux discrets (systèmes multi-contacts) consiste en la résolution de l'équation dynamique du système :

$$M\ddot{u} = F^{ext}(u, \dot{u}, t) + R^{\alpha}$$
(II.5)

Où :

*u* : Représente le vecteur des coordonnées généralisées (les déplacements et les rotations) ;

 $\dot{u}$ : Représente le vecteur des vitesses généralisées (de translation et angulaire) ;

 $\ddot{u}$ : Représente le vecteur des accélérations généralisées (de translation et angulaire);

- *M* : Représente la matrice de masse généralisée du système (matrice diagonale) avec  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ;
- *n* : Désigne le nombre de particules du système ;
- $F^{ext}$ : Vecteur des efforts externes ;
- $R^{\alpha}$ : Vecteur des efforts interne.

La résolution consiste à déterminer les accélérations généralisées lorsque le système est soumis aux efforts extérieurs et intérieurs, en fonction des coordonnées généralisées et de leurs premières dérivées. Le cycle de calcul est un algorithme de type pas à pas qui requiert la répétition d'un schéma de résolution.

#### II.6.3. Discrétisation temporelle

L'équation de la dynamique précédente est discrétisée en temps via un schéma d'intégration temporelle (par exemple la méthode de Newmark). A chaque cycle de calcul, on évalue les liens de contact qui se forment et disparaissent entre particules au cours de la simulation. Les interactions entre particules sont déterminées par le biais d'une loi de contact, qui est non-régulière dans le cas « Non Smooth » et régulière dans le cas « Smooth ». Une fois les forces et moments résultants sur chaque particule ont été calculés, on résout l'équation du mouvement pour déterminer et mettre à jour les nouvelles positions et vitesses des particules.

Les schémas d'intégration en temps peuvent être classés en deux catégories :

- Explicite
- Implicite

En général, les schémas explicites sont moins coûteux que les schémas implicites, qui nécessitent un calcul itératif à chaque pas de temps. Néanmoins, les schémas implicites se distinguent par leur stabilité.

Dans le cadre de ce travail, nous avons fait le choix d'intégrer l'équation du mouvement avec un schéma explicite. Les nouvelles températures des particules au temps t+ $\Delta t$ , sont calculées à partir des anciennes valeurs seulement au temps t.

#### II.6.4. Calcul de la force inter-articulaire

Le mécanisme général d'un milieu granulaire, soumis à des sollicitations mécaniques, dépend fortement du réseau de contact formé entre les particules. C'est pour cette raison que le choix d'une loi d'interaction est une étape très importante lors de la simulation par la MED.

Plusieurs lois d'interaction peuvent être considérées. La plus simple d'entre elles, est la loi de contact élastique. L'effort de contact est contrôlé par deux paramètres élastiques qui sont les raideurs normale  $k_n$  et tangentielle  $k_n$ , qui dépendent à leur tour des propriétés mécaniques associées (module de Young E et coefficient de Poisson v).

#### **II.6.5.** Force de contact normale

Dans le cas d'une modélisation explicite, le contact entre deux particules est établi s'il y a interpénétration, telle que la distance normale  $u_n < \beta$ , avec  $\beta(\beta < 0)$  un paramètre proche de zéro qui permet de piloter le rapprochement des centres des particules en contact :

La force normale  $r_n$  s'écrit en fonction de la raideur normale  $k_n$  et la distance normale un à travers la relation suivante :

$$r_n = k_n u_n \tag{II.6}$$



Figure II-5 : Loi de contact.

La raideur normale  $k_n$  est considérée constante depuis la création jusqu'à la suppression du contact et peut être calculée de différentes manières. Nous présenterons brièvement plus loin quelques méthodes utilisées pour la détermination de  $k_n$ .

#### II.6.6. Force d'amortissement normale

Lorsque deux particules entrent en interaction, l'énergie est dissipée via la force de frottement due au glissement de l'une sur l'autre. Cette dissipation reste insuffisante pour atteindre un état d'équilibre en un nombre de pas raisonnable. Une quantité inélastique est donc prise en compte dans le modèle de contact, qui est proportionnelle au paramètre d'amortissement visqueux  $c_n$  et fonction de la dérivée du déplacement normal  $\dot{u}_n$ .

Le coefficient d'amortissement  $c_n$  permet d'induire un effet inélastique négligeable et de stabiliser le schéma d'intégration numérique.

La force visqueuse est définie par :

$$r_n^{\nu} = -c_n \dot{u}_n \tag{II.7}$$

Cette force est opposée au déplacement relatif et proportionnelle à la vitesse relative  $\dot{u}_n$ . L'implémentation d'une force visqueuse peut amener à un état adhésif lorsque la force de répulsion est faible par rapport à la force visqueuse. L'adhésion peut être supprimée en ramenant à zéro la force négative calculée en prenant en compte la force visqueuse.

#### II.6.7. Force de contact tangentielle

Le calcul de la force tangentielle  $r_t$  est calculé de façon incrémentale à partir de la première détection de contact en sommant des incréments de force  $\Delta r_t$ :

$$\Delta r_t = -k_t \Delta u_t \tag{II.8}$$

La réaction tangentielle  $\Delta r_t^i$ , au pas de temps i, prend en compte la réaction tangentielle  $\Delta r_t^{i-1}$  au pas de temps précédent *i*-1. Elle est donnée par la relation suivante :

$$\Delta r_t^i = \Delta r_t^{i-1,act} + \Delta r_t \tag{II.9}$$

Où  $\Delta r_t^{i-1,act}$  n'est autre que l'actualisation de la réaction tangentielle  $\Delta r_t^{i-1}$  qui prend en compte le mouvement du contact. Cette quantité est calculée aux deux étapes et prend en compte le changement de la direction normale.

#### **II.6.8.** Force d'amortissement tangentielle

Comme dans le cas du contact normal, un terme inélastique (visqueux) est introduit dans le modèle d'interaction tangentiel. Celui-ci est proportionnel au coefficient d'amortissement  $c_t$  et dépend de la vitesse tangentielle  $\dot{u}_t$ .Cette force s'oppose au déplacement tangentiel relatif. Le terme inélastique est défini par la force visqueuse suivante :

$$r_t^v = -c_t \dot{u}_t \tag{II.10}$$

#### **II.6.9.** Détermination des raideurs de contact $k_n$ et $k_t$

Ils existent plusieurs modèles pour le calcul de la raideur de contact et sont classés en deux familles :

La première famille est celle des  $U_n$  premiers modèles non-linéaires telles que le modèle d'Hertz-Mindlin. Pour ce modèle, Les raideurs normale et tangentielle sont déterminées à partir des relations suivantes :

$$k_n = \frac{4G\sqrt{R}}{3(1-\nu)}\sqrt{u_n} \tag{II.11}$$

$$k_{t} = \frac{2\left(3RG^{2}\left(1-\nu\right)^{\frac{1}{3}}\right)}{\left(2-\nu\right)}\left|r_{n}\right|^{\frac{1}{3}}$$
(II.12)

Où :

*R* : Représente le rayon moyen des particules en contact ;

G et v: Sont respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson.

Les raideurs normale et tangentielle varient au cours de la simulation.

La deuxième famille concerne les modèles linéaires dont la raideur normale est déterminée à partir de la relation suivante :

$$k_n = 2E_{ij} \frac{a_i a_j}{a_i + a_j} \tag{II.13}$$

Où  $a_i$  et  $a_j$  sont les rayons des particules en contact et  $E_{ij}$  est le module de Young effectif calcule en fonction des modules de Young des particules  $E_i$  et  $E_j$ :

$$E_{ij} = 2\frac{E_i E_j}{E_i + E_j} \tag{II.14}$$

La raideur tangentielle  $k_t$  est déduite à partir de la raideur normale  $k_n$  et le coefficient du poisson  $\nu$  du milieu discret. Le rapport  $\frac{k_t}{k_n} \approx 0.8$  pour  $\nu = 0.3$ . Ceci est valable pour la plupart des matériaux.

#### II.6.10. Calcul du pas de temps critique

En se plaçant dans le cas d'un schéma d'intégration explicite, la condition de stabilité est garantie pour un pas de temps critique  $\Delta t_{crit}$ , afin d'assurer la convergence. Il s'agit d'un pas de temps qui peut reproduire la propagation d'ondes correctement. Un pas de temps critique est alors calculé pour chaque paire de contact :

$$\Delta t_{crit}^{c} = \min\left(\sqrt{\frac{m}{k_{n}}}, \sqrt{\frac{J}{k_{t} * a_{i,j}^{2}}}\right)$$
(II.15)

Où :

m: La masse réduite ;

- J: Le moment d'inertie ;
- et  $a_{i,j} = \min(a_i, a_j)$ .

Le pas de temps critique pour tout le système est donné par :

$$\Delta t_{crit} = C_t^S . \min_{c \in \mathcal{L}} \Delta t_{crit}^c$$
(II.16)

Où :

- $\zeta$ : Désigne l'ensemble des contacts du milieu granulaire simule ;
- $C_t^s$ : Un coefficient de sécurité pour garantir la convergence, il est pris en compte et vaut en général 0.1. Ce coefficient offre l'opportunité de ne calculer qu'une seule fois le pas de temps critique.

En effet, il peut y avoir une évolution du système vers un état moins stable, engendrée par l'apparition ou la disparition des contacts. Mais cette évolution reste dans le domaine de stabilité dans la mesure où le pas du temps critique est suffisamment faible.

#### II.7. Modélisation de la conduction thermique par la MED

Dans le contexte de la méthode des éléments discrets l'interaction entre les particules est modélisée par une interpénétration sans déformation. Les paramètres géométriques de la zone de contact (distance entre particules, rayon et superficie de la zone de contact...) sont exposés dans l'annexe A.



Figure II-6 : Interpénétration entre deux particules.

On définit la conductance entre les deux particules comme la quantité de chaleur transportée à travers la zone de contact sous l'influence d'une unité de différence température en une période d'une unité de temps (1s).



Figure II-7 : Interpénétration entre plusieurs particules [20].

Puisque la quantité de chaleur est une grandeur scalaire (qui peut être positive ou négative) si la  $i^{eme}$  particule est en contact avec  $N_p$  particules ; la quantité de chaleur totale par unité de temps  $\dot{Q}_i^T$  sera la somme algébrique des quantités de chaleurs échangées par chacune des particules voisines.

Ce concept est exposé plus en détail dans le chapitre suivant.

# CHAPITRE III APPLICATION

#### CHAPITRE III : APPLICATION DE LA MED

#### **III.1.** Introduction

Dans ce chapitre nous allons traiter un problème de conduction thermique pure (sans convection ni rayonnement) dans un milieu granulaire par la MED. Nous allons commencer par valider l'hypothèse de la température constante dans le grain par une simulation en 2D sur un modèle typique de contact entre deux particules sphériques, avec la méthode des éléments finis. L'outil utilisé est la suite Ansys (Ansys Mechanical, Design Modeler, ICEM-CFD).

Une fois l'hypothèse est validée le modèle granulaire est appliqué sur le même problème. Le programme de résolution est écrit sur le logiciel Matlab vu le nombre réduit de particules envisagé pour l'étude d'un côté, et la simplicité de l'utilisation des outils de visualisation offerts par Matlab d'un autre.

#### III.2. Les paramètres géométriques

Quand deux grains ou un grain et une paroi entre en contact ils se déforment élastiquement et s'aplatissent à la zone de contact. La zone de contact plate est idéalement de forme circulaire. Un modèle simple mais assez fidèle qui traduit ce contact est celui développé par Hertz. Le modèle suppose une interpénétration des deux solides dans la zone de contact circulaire et ignore toute déformation hors cette zone. Nous avons vu dans le chapitre précédant que c'est l'idée de base derrière la méthode des éléments discrets.



Figure III-1 : Modèle réaliste.



Figure III-2 : Modèle approximatif.

La taille des grains, le rayon de contact, le pas du temps et les propriétés du matériau constituant les grains sont les paramètres les plus importants pour la simulation.

Nous allons adopter les paramètres publiés dans des articles de références à savoir : [21], [22], [23] qui sont très proches entre eux.

Paramètre	Valeur
Rayon des grains (mm)	6
Rayon de contact (mm)	0.001-5
Densité $\rho$ (kg/m3)	7900
Conductivité thermique W/(m K)	60.5
Chaleur spécifique (J/(kg K)	434
Température T1 (°C)	100
Température T2 (°C)	25
Pas du temps $\Delta t$ (s)	0.0001
Temps total t (s)	10

 Tableau III-1 : Paramètres de la simulation.

#### III.3. Le modèle numérique par la méthode des éléments finis

Le modèle numérique adopté est un modèle 2D de deux particules de géométries identiques étant initialemnt à deux températures différentes et en contact sur une longueur (en 3D sera une surface circulaire) qu'on va varier. La périférie libre des deux particules est supposée parfaitement isolée.

#### III.3.1. Le maillage

Le maillage type structuré du cas de deux particules en contact avec des zones de contact de tailles variées. La qualité « Skewness » moyenne pour tous les cas rèste au maximum 0.2 ce qui est très petit par rapport à 1. Un soin spécial est donné autour de la zone de contact où les maillage sont raffinés.

#### Cas de la zone de contact extrémement large 5mm:

Le maillage type structuré du cas « zone de contact **extrémement** large» est composé de 4096 nœuds et 1300 éléments avec une qualité « Skewness » moyenne de 0.12.



Figure III-3 : Le maillage des deux particules en contact, zone de contact 5mm.

#### Cas de la zone de contact large 3mm:

Le maillage type structuré du cas « zone de contact large» est composé de 4655 nœuds et 1485 éléments avec une qualité « Skewness » moyenne de 0.13.



Figure III-4 : Le maillage des deux particules en contact, zone de contact 3mm.

#### Cas de la zone de contact petite 1mm:

Le maillage type structuré du cas « zone de contact large» est composé de 5604 nœuds et 1792 éléments avec une qualité « Skewness » moyenne de 0.15.



Figure III-5 : Le maillage des deux particules en contact zone de contact 1mm.

#### Cas de la zone de contact êxtremement petite 0.001mm:

Le maillage type structuré du cas « zone de contact large» est composé de 8753 nœuds et 2809 éléments avec une qualité « Skewness » moyenne de 0,2.



Figure III-6 : Le maillage des deux particules en contact zone de contact 0.001mm.

#### III.4. Les résultats du modèle éléments finis

Seulement la répartition (l'homogénéité) de la température nous intéresse. C'est pour cela aucune valeur n'est indiquée sur les 4 figures suivantes.



Figure III-7 : Rayon de contact extrêmement grand par rapport aux rayons des deux sphères (5mm).



Figure III-8 : Rayon de contact grand par rapport aux rayons des deux sphères (3mm).



Figure III-9 : Rayon de contact petit par rapport aux rayons des deux sphères (1mm).



Figure III-10 : Rayon de contact extrêmement petit par rapport aux rayons des deux sphères (0.001mm).

Il est clair que plus on augmente la taille de la zone de contact plus la répartition de la température devient non-uniforme.

#### III.5. Le modèle numérique par la méthode des éléments discrets

Sous l'effet d'une charge externe ou sous l'effet du poids des particules ellesmêmes (cas d'un empilement vertical), les particules s'écrasent sur leurs voisines et se déforment. L'écrasement se fait sur une surface plane de géométrie circulaire. Dans le contexte de la méthode des éléments discrets ce scénario est simplifié en une interpénétration sans déformation. On définit la conductance entre les deux particules comme la quantité de chaleur transportée à travers la zone de contact sous l'influence d'une unité de différence température en une période d'une unité de temps (1s). Dans le cas du contact entre deux particules sphériques i et j de même nature (même matériau) elle est donnée par :

$$H_{ij} = 2 k r_{c,ij} \tag{III.1}$$

Avec :

 $H_{ij}$ : La conductance entre les particules *i* et *j*;

k : La conductivité thermique ;

 $r_{c,ii}$ : Le rayon de la zone (circulaire) de contact entre les particules i et j.

La quantité de chaleur transférée de la particule j à la particule i à travers la zone de contact en une seconde est :

$$\dot{Q}_{ij} = H_{ij} \left( T_j - T_i \right) \tag{III.2}$$

Avec :

 $T_i$ : La température de la particule i ;

 $T_i$ : La température de la particule j.

Puisque la quantité de chaleur est une grandeur scalaire (qui peut être positive ou négative) si la  $i^{eme}$  particule est en contact avec  $N_p$  particules ; la quantité de chaleur totale par unité de temps  $\dot{Q}_i^T$  sera :

$$\dot{Q}_{i}^{T} = \sum_{j=1}^{N_{p}} \dot{Q}_{ij} = \sum_{j=1}^{N_{p}} H_{ij} \left( T_{j} - T_{i} \right)$$
(III.3)



Figure III-11 : Contact et échange thermique entre plusieurs particules.

Et la relation avec la température sera donnée par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{c_p m_p} \dot{Q}_i^T = \frac{1}{c_p m_p} \sum_{j=1}^{N_p} \dot{Q}_{ij}$$
(III.4)

Avec :

 $\boldsymbol{c}_{\boldsymbol{p}}\,$  : La chaleur spécifique de la particule ;

 $m_p$ : La masse de la particule ;

$$\frac{dT_i}{dt}$$
: La dérivée temporelle de la température.

La dérivée temporelle peut être approximée par différence finies comme suit :

$$\frac{dT_i}{dt} \approx \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t}$$
(III.5)

Et l'équation différentielle peut être approximée comme :

$$\frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t} \approx \frac{1}{c_p m_p} \sum_{j=1}^{N_p} \dot{Q}_{ij}^k$$
(III.6)

Donc, on peut calculer explicitement la température de la particule i au nouvel instant  $t^{k+1}$ en fonction des valeurs de la température de la même particule et ses voisines à l'instant précédant  $t^k$ :

$$T_i^{k+1} \approx T_i^k + \frac{\Delta t}{c_p m_p} \sum_{j=1}^{N_p} \dot{Q}_{ij}^k$$
(III.7)

#### III.6. Résultats de la MED deux particules

Le résultat obtenu par la MED sera confronté à celui du modèle Eléments Finis ayant une petite zone de contact ( $R_c=0.1mm$ ).



Figure III-12 : Résultat obtenu par Eléments Finis, zone de contact ( $R_c$ =0.1mm).

D'après la **Figure III-12** la température moyenne de la particule à gauche est d'environ 53°C alors que celle à droite est de 71°C.



Figure III-13 : Résultat obtenu par MED, zone de contact ( $R_c$ =0.1mm).

Le calcul par MED donne les températures suivantes :

$$T_1 = 55^{\circ}C$$
 et  $T_2 = 70^{\circ}C$ 

Ce qui correspond à des erreurs relatives :

$$E_1 = 3.7\%$$
 et  $E_2 = 1.4\%$ 

Chose qu'on peut résumer sur le tableau suivant :

Tableau III-2 : Comparaison des résultats obtenus par la MED et MEF.

Températures Eléments Finis (MEF) (°C)	Températures MED (°C)	Erreurs relatives (%)
53	55	3.7
71	70	1.4

En conclusion de ce chapitre ; nous avons élaboré un programme personnel pour le calcul de l'évolution de la température (régime transitoire) entre deux grains et l'avons validé par le même modèle simulé par la méthode des éléments finis. Bien que le modèle paraisse simple il peut être facilement généralisé pour traiter un nombre plus important de particules. Malheureusement l'aspect cinématique des grains devait être développé en parallèle dans une autre étude qui n'est pas encore achevée.

## CONCLUSION GENERALE

#### CONCLUSIONS

En conclusion, l'objectif de ce mémoire étant d'exposer d'abord le principe de la méthode et la mettre en œuvre puis la comparer avec la méthode des volumes finis, on a confirmé que la MED est la méthode la plus adaptée pour traiter le transfert thermique dans les milieux granulaire surtout en termes de performances : vitesse de calcul et mémoire de stockage.

Le modèle étudié dans le dernier chapitre est relativement simple mais peut être facilement étendu pour traiter plus de grains. Malheureusement, le coté cinématique du modèle n'a pas été prêt pour l'intégrer à notre étude.

En perspective on propose évidemment d'intégrer le modèle que nous avons développé dans un modèle cinétique dans un sens mécanique. Autrement dit, appliquer cette méthode prometteuse à un cas dynamique où le milieu granulaire est en mouvement.

Une autre perspective intéressante, c'est d'étudier l'influence de l'écoulement du lubrifiant dans un palier hydrostatique hybride sur le refroidissement du roulement à billes.

## ANNEXES

#### ANNEXE A

#### Superficie de la zone d'intersection :

La zone d'intersection (CD sur la figure ci-dessous) est circulaire son rayon (ED ou EC) est déterminé par les étapes suivante :



Figure A-1 : Interpénétration entre deux particules sphériques.

On note la AB :  

$$L = AB = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (A.1)$$

$$\begin{cases}
DE^2 = R_1^2 - AE^2 \\
DE^2 = R_2^2 - BE^2
\end{cases}$$

$$BE = L - AE$$

$$R_1^2 - AE^2 = R_2^2 - BE^2$$

$$R_1^2 - AE^2 = R_2^2 - BE^2$$

$$R_{1}^{2} - AE^{2} = R_{2}^{2} - (L - AE)^{2}$$

$$R_{1}^{2} - AE^{2} = R_{2}^{2} - (L^{2} - 2LAE + AE^{2})$$

$$R_{1}^{2} - AE^{2} = R_{2}^{2} - L^{2} + 2LAE - AE^{2}$$

$$R_{1}^{2} = R_{2}^{2} - L^{2} + 2LAE$$

$$AE = \frac{R_{1}^{2} - R_{2}^{2} + L^{2}}{2L}$$

$$DE = \sqrt{R_{1}^{2} - \left(\frac{R_{1}^{2} - R_{2}^{2} + L^{2}}{2L}\right)^{2}}$$

La superficie est donc donnée par :

$$a = \pi r^{2} = \pi DE^{2} = \pi \left( R_{1}^{2} - \left( \frac{R_{1}^{2} - R_{2}^{2} + L^{2}}{2L} \right)^{2} \right)$$

#### REFERENCES

- S.-S. Hsiau et Y.-M. Shieh, «Fluctuations and self-diffusion of sheared granular material flows », *Journal of Rheology*, vol. 43, n° 5, p. 1049-1066, sept. 1999, doi: 10.1122/1.551027.
- [2] B. Andreotti, Y. Forterre, et O. Pouliquen, *Granular Media: Between Fluid and Solid*. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
- [3] S. Nadler, « Comportement d'un milieu granulaire soumis à des vibrations horizontales: Etudes numériques et expérimentales », p. 283.
- [4] C. Claquin, « Étude du comportement de l'interface milieu granulaire et inclusion par une approche multi-échelle », Doctorat, L'institut National des Sciences Appliquées, Lyon, 2003.
- [5] Y. a. Cengel, *Heat Transfer A Practical Approach*, 2nd edition. United States: McGraw-Hill Education Europe, 2002.
- [6] B. J. M. Al-Minshawy, « Heat conduction from two spheres », Master of science in mathematics, King fahd university of petroleum & minerals, Dharan, Saudi arabia, 2010.
- [7] H. Fares, « Etude et simulation numérique de la convection naturelle dans des cavités fermées », Master académique en génie mécanique Option énergétique, Université Mouloud Mammeri, Faculté de génie de la construction Département de génie mécanique, Tizi-Ouzou, 2011.
- [8] Y. Yener and S. Kakac, Heat Conduction, 4th edition, Taylor & Francis Group, LLC, New York, (2008).
- [9] W. L. Vargas-Escobar, « Discrete Modeling of Heat Conduction in Granular Media », p. 179.
- [10] V. D. Nguyen, C. Cogne, J. Fortin, M. Guessasma, E. Bellenger, et C. Marie, « Etude des transferts thermiques en milieux granulaires », p. 7.
- [11] Cundall, P. A.; Strack, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. Geotechnique, Vol 29, No 1, 1979, p. 47–65.
- [12] Kantor, A. L.; Long, L. N.; Micci, M. M. Molecular dynamics simulation of dissotiantion kinetics. In: AIAA Aersospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2000– 0213, 2000.

- [13] M. Jebahi, « Discrete Element Method to Model 3D Continuous Materials », p. 198.
- [14] Moreau, Jean Jacques. "Contact et Frottement En Dynamique Des Systèmes de Corps Rigides." Revue Européenne Des Éléments Finis 9, No. 1–3, January 2000.
- [15] Cundall, P. A., and O. D. L. Strack. "A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies." *Géotechnique* 29, No. 1, March 1979.
- [16] Y.Kishino, "Disc Model Analysis of Granular Media." Micromechanics of Granular Volume 20, 1988, Pages 143-152.
- [17] A. Mahboubi, A. Ghaouti, et B. Cambou, « La simulation numérique discrète du comportement des matériaux granulaires », *Rev. Fr. Geotech.*, N<sup>o</sup> 76, p. 45-61, 1996.
- [18] M. Gado, « Modèle par éléments discrets multi physique du comportement des matériaux métalliques sous sollicitations thermo mécaniques extrêmes », p. 154.
- [19] Cundall, P A. «Formulation of three dimensional distinct element mode part 1. A scheme to detect and represent contacts in a system com posed of many polyhedral blocks», p. 107-16, 1988.
- [20] Haddad, H., M. Guessasma, and J. Fortin. "Heat Transfer by Conduction Using DEM-FEM Coupling Method." *Computational Materials Science* 81, January 2014.
- [21] Vargas, Watson L., and J. J. McCarthy. "Heat Conduction in Granular Materials." *AIChE Journal* 47, No. 5, May 2001.
- [22] Gui, Nan, and Jianren Fan. "Numerical Study of Heat Conduction of Granular Particles in Rotating Wavy Drums." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 84, May 2015.
- [23] Shi, Deliang, Watson L. Vargas, and J.J. McCarthy. "Heat Transfer in Rotary Kilns with Interstitial Gases." *Chemical Engineering Science* 63, No. 18, September 2008.

#### Résumé

Dans ce travail, nous avons présenté le principe de la méthode des éléments discrets (MED) et sa mise en œuvre, puis nous l'avons comparé avec la méthode des éléments finis. L'outil utilisé est la suite Ansys (Ansys Mechanical, Design Modeler, ICEM-CFD) pour les éléments finis. Quant à la MED, le programme de résolution est écrit sur le logiciel Matlab vu le nombre réduit de logiciels dédiés à cette méthode.

L'étude a confirmé que la MED est la méthode la plus adaptée pour traiter le transfert de chaleur dans les milieux granulaires, notamment en termes de performances: vitesse de calcul et mémoire de stockage.

#### Abstract

In this work, we presented the principle of the discrete element method (MED) and its implementation, then we compared it with the finite element method. The tool used is the Ansys suite (Ansys Mechanical, Design Modeler, and ICEM-CFD) for finite elements. As for the MED, the resolution program is written on the Matlab software given the reduced number of software dedicated to this method.

The study confirmed that MED is the most suitable method for treating heat transfer in granular media, especially in terms of performance: computing speed and storage memory.

#### ملخص

في هذا العمل قدمنا مبدأ طريقة العناصر المنفصلة (MED) وتنفيذه، ثم قارناها بطريقة العناصر المحدودة. الأداة المستخدمة هي مجموعة (Ansys Mechanical, Design Modeler, ICEM-CFD) للعناصر المحدودة. بالنسبة إلى MED، تتم كتابة برنامج الدقة على برنامج Matlab نظرًا للعدد المنخفض من البرامج المخصصة لهذه الطريقة.

أكدت الدراسة أن MED هي الطريقة الأنسب لمعالجة انتقال الحرارة في الوسائط الحبيبية، خاصة من حيث الأداء: سرعة الحوسبة وذاكرة التخزين.