

Ségrégation suivant la forme et la taille des grains pour des écoulements dans un tambour tournant

Reda Bouamra (a,b), Francis Pradel (a), Gilles Ferrer (a) & Roland Glowinski (b)

(a) IFP, Direction Mécanique Appliquée, 1 et 4 avenue du Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France

(b) Laboratoire Jacques-Louis Lions, 175 rue du Chevaleret, 75013 Paris, France

Résumé :

Afin de prendre en compte l'angularité des particules dans les écoulements granulaires, l'IFP a développé un outil numérique : GRAINS3DTM. Ce dernier repose sur la méthode des éléments discrets et un algorithme de détection de contact développé pour la réalité virtuelle (algorithme Gilbert-Johnson-Keerthi). A l'aide de ce code, nous proposons, dans cette communication, d'étudier et de quantifier l'influence de l'angularité sur les écoulements granulaires. Nous nous intéressons au phénomène de ségrégation pour des massifs granulaires morphologiquement homogènes qui contiennent des particules de taille différente et des mélanges binaires de formes. Les résultats obtenus sont confrontés à ceux de la littérature. Dans le cas de formes plus complexes, une analyse du comportement des particules en fonction de leur convexité est proposée.

Abstract :

In order to take into account the particles shapes in granular flows, the IFP has developed a numerical tool: GRAINS3DTM. This code is based on the discrete elements method and contact detection algorithms developed for the virtual reality (Gilbert-Johnson-Keerthi algorithm) for the contact detection. Using this tool, we propose, in this communication, the study and the quantification of the particle shape influence on the granular flows. We are interested in the phenomenon of segregation on rotating drum containing particles of different sizes and shapes. The results obtained are confronted to those of the literature. In the case of more complex shapes, an analysis of the behavior of the particles according to their convexity is proposed.

Mots-clefs :

DEM ; Ecoulement en tambour tournant ; formes convexes

1 Introduction

La remontée de déblais pendant les opérations de forage, l'intrusion de sable dans les puits de production, les mouvements de lits catalytiques au sein de réacteur de raffinage sont autant d'exemples de la présence des milieux granulaires dans les problématiques rencontrées dans l'industrie pétrolière. Pour étudier ces écoulements, l'approche explicite par la méthode des éléments discrets, développée par Cundall (1979), a fait ses preuves pour des particules sphériques, notamment dans le cas industriellement intéressant des tambours tournants et de ses applications au raffinage. Cependant, l'extension à des particules de forme quelconque, bien plus proche de la réalité, est bien moins répandue en raison de la difficulté à déterminer les points de contact entre particules. Cundall (1988) fut le premier à apporter une méthode de description des contacts dans des systèmes formés de tétraèdres. Viendront ensuite, les travaux de Favier *et al.* (1999) sur la prise en compte de particules de forme quelconque (vu comme des assemblages de sphère) dans les massifs granulaires. Sur la même période, l'IFP a développé un outil numérique : GRAINS3DTM (Petit *et al.* (2001)) qui repose sur la méthode des éléments discrets et permet de prendre directement en compte des formes convexes. Plus récemment, Nezami (2004) et Zhao (2006) ont proposé et implémenté une méthode de recherche de contact pour

des particules convexes. En parallèle, Moreau (1994) a élaboré la méthode *Non Smooth Contact Dynamics* s'appuyant fortement sur l'analyse convexe. La mise en œuvre de cette méthode permet la prise en compte exacte des conditions géométriques de non-interpénétration avec une résolution temporelle implicite, accélérant notablement les simulations (Saussine (2004), Jean *et al.* (2001)).

A l'aide du code GRAINS3D, incluant un algorithme de collision développé pour la réalité virtuelle (algorithme Gilbert-Johnson-Keerthi (Gilbert *et al.* (1998))), nous proposons d'étudier et de quantifier l'influence de l'angularité de particules qui interagissent entre elles par des contacts frottants. Les expérimentations numériques sont focalisées sur les écoulements dans un tambour tournant de base circulaire. Cette application a déjà fait l'objet de plusieurs études sur l'influence de la taille des grains dans le phénomène de ségrégation : Rapaport (2006) ou encore Taberlet (2004). A notre connaissance, l'influence de la forme des particules n'a jamais été étudiée dans ce type d'écoulement.

Dans cette communication, nous étudions dans un premier temps la ségrégation pour des massifs granulaires contenant deux tailles de particules. Nous fixons ensuite une taille unique de particule pour nous intéresser à un mélange binaire de formes. Enfin, nous exploitons ces simulations pour déterminer l'influence de l'angularité et de la taille sur l'évolution temporelle de la ségrégation.

2 Simulation par la méthode des éléments discrets

Cette approche se situe à un niveau microscopique dans lequel chaque particule est prise en compte individuellement comme dans Cundall (1979). Les trajectoires des particules sont obtenues par intégration des lois de la dynamique de Newton. Les collisions sont décrites par un modèle de type sphère molle.

L'ensemble du milieu granulaire est composé de particules (de forme convexe) et d'obstacles. Considérons une particule, i , de masse m_i , de matrice d'inertie \underline{I}_i , de vitesse angulaire $\underline{\omega}_i$ et de centre de gravité \underline{x}_i . Les forces appliquées à cette particule peuvent être soit volumiques (force de gravité : $\underline{F}_i^G = m_i g$), soit surfaciques $\underline{F}_{i,j}^S$ dues aux contacts avec une autre particule, j . Afin de décrire la trajectoire des particules, les deux équations du principe fondamental de la dynamique sont résolues :

$$m_i \ddot{\underline{x}}_i = \sum_{j \neq i} \chi_i(j) \underline{F}_{i,j}^S + \underline{F}_i^G, \quad \underline{I}_i \cdot \dot{\underline{\omega}}_i + (\underline{\omega}_i \wedge \underline{I}_i \cdot \underline{\omega}_i) = \sum_{j \neq i} \chi_i(j) \left((\underline{x}_{i,j} - \underline{x}_i) \wedge \underline{F}_{i,j}^S \right) \quad (1)$$

où, χ_i est une fonction indicatrice pour le contact et $\underline{x}_{i,j}$, la position du point de contact avec la particule voisine, j . Les équations du mouvement (1) sont résolues numériquement à l'aide d'un algorithme explicite de type *Leap-Frog* modifié (Petit *et al.* (2001) et Komiwes *et al.* (2006)).

Les forces de surface se décomposent en une composante normale, dans la direction d'interpénétration des particules, et d'une composante tangentielle, dans le plan tangent au contact. Le frottement qui perturbe la composante tangentielle est activé en fonction de la relation entre les deux composants de la force. Pour chaque grain, i , en contact avec un grain, j , ces forces sont définies uniquement par une pénalité élastique normale et par une force de rugosité associée au critère de Coulomb en composante tangentielle :

$$\underline{F}_{i,j}^S = k_n \delta_{i,j} - \min \left(\int_{t_c^-}^t k_t (\underline{v}_{i,j} \cdot \underline{t}_{i,j}) dt, \mu_c \left| \underline{F}_{i,j}^{el,n} \right| \right) \underline{t}_{i,j} \quad (2)$$

où : $\underline{t}_{i,j} = \frac{\underline{v}_{i,j} - (\underline{v}_{i,j} \cdot \underline{n}_{i,j}) \underline{n}_{i,j}}{|\underline{v}_{i,j} - (\underline{v}_{i,j} \cdot \underline{n}_{i,j}) \underline{n}_{i,j}|}$ et $\underline{n}_{i,j} = \frac{\underline{\delta}_{i,j}}{|\underline{\delta}_{i,j}|}$ sont respectivement la tangente et la normale au contact. $\underline{v}_{i,j} = \underline{v}_i - \underline{v}_j$ et $m_{i,j} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ représentent la vitesse et la masse relative. k_n, k_t sont ici la dureté normale et tangentielle (dite de rugosité) du contact, μ_c le coefficient de Coulomb. Les raideurs (en N/m) sont fixées à $k_n = k_s = 1000$. Le coefficient de frottement vaut $\mu_{cg} = 0.57$ pour les grains et $\mu_{cp} = 1.0$ pour les parois.

2.1 Détection des collisions pour des formes convexes

La détection des particules en contact se fait en trois étapes imbriquées permettant d'optimiser le coût calcul. Lors de la première, un algorithme de type *Linked-Cell* est utilisé. En s'appuyant sur une grille où sont placées les particules, un premier tri permet d'éliminer les contacts ayant une probabilité nulle d'existence. Sur les contacts potentiels restants, une détection de contacts peu coûteuse, en s'appuyant sur des sphères englobant les particules, est effectuée restreignant encore l'ensemble des contacts potentiels. Dans le cas de particules sphériques, la détection de collision s'arrête là car les contacts potentiels deviennent sûrs. Enfin pour les contacts potentiels impliquant des particules non-sphériques, il est nécessaire d'utiliser un algorithme coûteux déterminant la distance entre deux convexes. Cette distance ainsi qu'un point sur chacun des convexes la réalisant sont obtenus grâce à l'algorithme itératif Gilbert-Johnson-Keerthi (GJK) créé pour les besoins de la réalité virtuelle. Grains3D utilise celui implémenté par Van Den Bergen (1999) dans la librairie SOLID. Si effectivement les particules se touchent, un contact est alors défini entre elles par son point de contact (ou zone de contact), sa normale à la surface de contact et son interpénétration entre ces particules suivant la direction normale. L'algorithme ne donnant que des distances entre convexes, il est nécessaire pour l'interpénétration de décomposer chaque particule, P , en deux parties : son noyau, $N(P)$, et sa croûte, $C(P)$. La croûte est construite en déterminant la zone de l'espace située à une distance inférieure à une valeur r_{vdW} du noyau. Le recouvrement, $\underline{\delta}_{P_A, P_B}$, entre deux particules en contact, P_A et P_B , s'écrit à l'aide des points $A_1 \in N(P_A)$ et $B_1 \in N(P_B)$ (figure (2.1)) issus de l'algorithme GJK :

$$\underline{\delta}_{i,j} = \underline{\delta}_{P_A P_B} = (d(A_1, B_1) - r_{vdW}(P_A) - r_{vdW}(P_B)) \frac{\overrightarrow{A_1 B_1}}{|\overrightarrow{A_1 B_1}|} \quad (3)$$

Le point de contact entre P_A , référencé i , et P_B , référencé j , vaut : $\underline{x}_{i,j} = \frac{(B_1 + A_1)}{2}$.

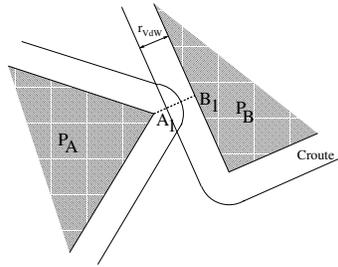


FIG. 1 – Détermination de la distance de contact par l'algorithme de GJK

3 Simulations numériques

Le banc d'essai numérique représente un tambour tournant dans lequel est placé un milieu granulaire. Le cylindre qui constitue le banc est de base circulaire avec un rayon de 5cm et une longueur de 7cm . La vitesse de rotation axiale est de 5 tours/seconde ce qui permet d'accélérer

la dynamique de ségrégation.

Deux types de mélange de particules sont étudiés. Un **mélange monodisperse**, où les particules ont la même taille et ont une forme soit sphérique ou polyédrique fixée. Les massifs sont composés de 3200 grains sphériques de rayon $12mm$, et 400 grains polyédriques inscrits dans une sphère de même rayon. Le second mélange est un **mélange bidisperse**, où les particules sont de taille et de forme différentes. Les mélanges contiennent une première espèce, \mathcal{E}_1 , composée de 3200 particules sphériques de rayon $24mm$ et une seconde espèce, \mathcal{E}_2 , composée de 400 particules polyédriques inscrites dans une sphère de rayon $12mm$. Les deux familles de mélange ont été disposées de manière aléatoire dans le cylindre.

Les simulations ont été effectuées en trois étapes. La première consiste en la sédimentation des particules dans le cylindre fixe. Pour chaque type de mélange, seules les particules sphériques sont disposées de manière aléatoire dans le cylindre. Une fois toutes les particules présentes, un certain temps est accordé à la sédimentation afin d'obtenir un massif relativement stable. La seconde étape consiste à remplacer les particules sphériques par des particules convexes pour obtenir toutes les familles de mélanges décrites plus haut. Enfin, la dernière étape consiste dans la mise en rotation du cylindre avec un pas de temps de $10^{-5}s$. Cette méthodologie a été adoptée pour éviter des phases de sédimentation trop longues et pour nous permettre de démarrer les simulations avec quasiment le même état initial (même disposition des particules dans le cylindre). Les simulations ont été effectuées sur des durées de 4 secondes (20 révolutions du cylindre) afin de laisser le temps au processus de se développer.

Des grains de forme polyédrique remplacent des grains sphériques pour mettre en évidence l'influence de l'angularité dans le processus de ségrégation. Afin de rendre ce remplacement possible à partir d'un massif granulaire déjà sédimenté, les formes ont été choisies parmi les solides de Platon : polyèdres réguliers convexes inscriptibles dans une sphère. En trois dimensions, il n'en existe que cinq : tétraèdre, cube, octaèdre, dodécaèdre, icosaèdre. Ces polyèdres peuvent être classés suivant une angularité α ou une sphéricité Φ définies par :

$$\alpha = (p - 2)(q - 2) < 4, \quad \Phi = \frac{S_{convexe}}{S_{sphere}} \quad (4)$$

où Φ est définie par le rapport entre la surface du convexe $S_{convexe}$ et S_{sphere} , la surface de la sphère circonscrite. p est le nombre de côtés des polygones constituant le polyèdre et q le nombre de faces entourant chaque sommet. Les valeurs de ces paramètres sont reportées dans le tableau (1).

Polyèdre	Sphère	Octaèdre	Cube	Tétraèdre
Sphéricité Φ	1	0,551	0,637	0,368
Angularité α	4	2	2	1

TAB. 1 – Angularité et Sphéricité

3.1 Résultats des simulations

Dans le but de quantifier le degré de ségrégation global, nous introduisons la dispersion radiale, σ_r , ainsi que la ségrégation moyenne entre les deux espèces, S_r (Rapaport (2006)), définies par :

$$\sigma_{r\mathcal{E}} = \sqrt{\langle r_{\mathcal{E}}^2 \rangle - \langle r_{\mathcal{E}} \rangle^2}, \quad S_r = \frac{\sigma_{r\mathcal{E}_1}^2 - \sigma_{r\mathcal{E}_2}^2}{\sigma_r^2} \quad (5)$$

où $\langle r_{\mathcal{E}} \rangle$ représente la position radiale moyenne des particules de l'espèce \mathcal{E} par rapport à l'axe du cylindre et σ_r la dispersion radiale de toutes les particules. Ces grandeurs sont représentées sur la figure (2). Le calcul des dispersions radiales $\sigma_{r_{\mathcal{E}_1}}$ nous permet d'avoir un premier classement selon la forme des grains en mono et bi disperse (figure 2 (b.1) et (b.2)). Ce classement est en accord avec les valeurs d'angularité données dans le tableau (1). Ainsi, la dispersion radiale de la sphère est plus marquée que celle des particules anguleuses, avec des valeurs similaires pour les octaèdres et les cubes et des valeurs nettement inférieures pour les tétraèdres. Ce comportement révèle le rôle prépondérant joué par l'angularité des particules dans le phénomène de ségrégation. Le degré de ségrégation S_r dans les mélanges bi disperses (figure 2 (a.1)) est plus

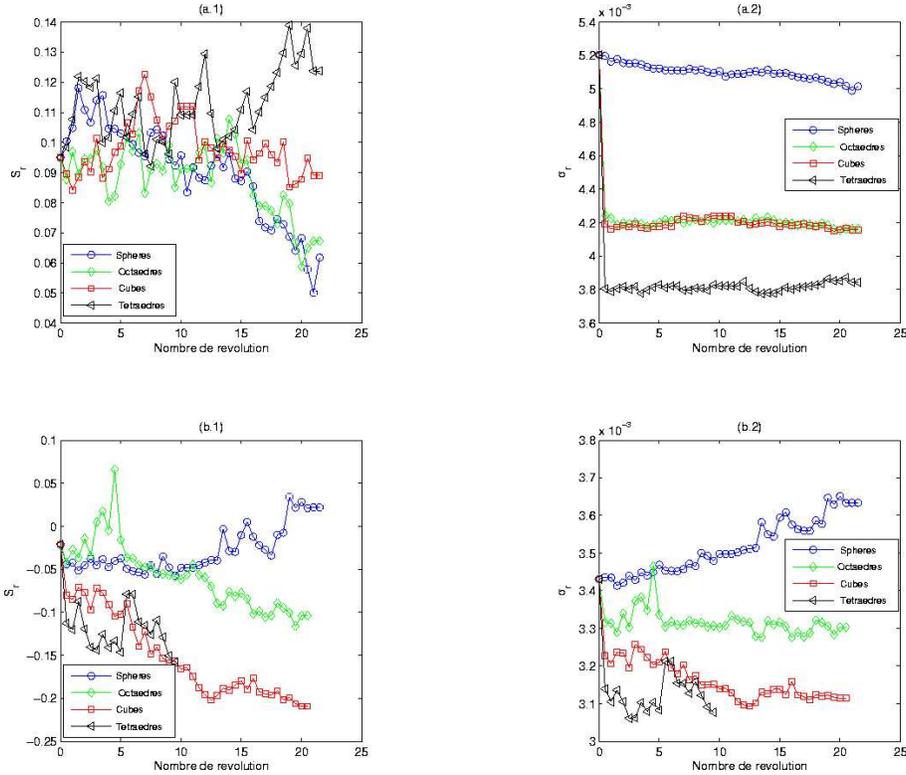


FIG. 2 – Ségrégations $\sigma_{r_{\mathcal{E}_1}}$ et dispersions S_r radiales pour les mélanges mono disperse (a.1, a.2) et bi disperse (b.1, b.2)

marqué pour les sphères lors des premières révolutions du cylindre mais s'atténue par la suite par rapport aux autres formes. Ce comportement est en accord avec les résultats de la littérature où la diminution de la ségrégation radiale en fonction du temps s'effectue au profit d'un second régime de ségrégation axiale (Rapaport (2006)). Sur les temps de simulation réalisés, cette transition de régime ne s'observe pas dans le cas de particules anguleuses. La ségrégation radiale est croissante en fonction de l'angularité de la particule. Ainsi, nous observons un comportement proche de celui de la sphère pour les octaèdres et radicalement différent pour les tétraèdres avec une croissance constante de S_r sans marque de transition.

Dans le cas mono disperse, nous observons une ségrégation radiale pour les particules les plus anguleuses qui ont tendance à se regrouper (figure 2 (b.1)). Ces observations nous permettent de retrouver le rôle bien connue de la taille dans les phénomènes de ségrégation radiale et de mettre en évidence l'influence de l'angularité par rapport à la taille.

4 Conclusion

Nous avons présenté, dans cette communication, une méthode de simulation des milieux granulaires basée sur la DEM et une détection des contacts avec l'algorithme GJK. Nous avons pu quantifier l'influence de la forme dans les écoulements en tambour tournant. L'influence de l'angularité des particules sur les transitions entre ségrégation radiale et axiale en mélange bi disperse a notamment été montrée. La ségrégation radiale a été observée pour tous les mélanges avec une absence de régime de transition vers une ségrégation axiale pour les particules anguleuses. Dans le cas mono disperse, nous avons observé que l'angularité seule suffit pour activer un régime ségrégationnel. La forme des particules semble donc avoir un rôle opposé à celui de la taille dans ces processus. Les conclusions tirées de ces premières simulations méritent d'être complétées par des simulations sur des temps plus longs avec un plus grand nombre de particules dans le but de faire apparaître clairement les deux régimes de ségrégation connus (radiale sur les temps courts et axiale sur les temps longs).

Références

- Cundall, P.A 1988 Formulation of a Three-dimensional distinct element model- Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks *J. Rock Mech. Min. Sci. and Geomech.* **25** 107-116
- Cundall, P.A., Starck, O.D.L. 1979 A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies *Geotechnique* **29** 47-65
- Favier, J.F., Abbaspour-Fard, M.H., Kremmer, M., Raji, A.O. 1999 Shape representation of axisymmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles. *Engineering Computations* **16** 467-480
- Gilbert, E.G., Johnson, D.W., Keerthi, S.S 1998 A fast procedure for computing the distance between complex objects in three-dimensional space. *IEEE J. of Robotics and Automation* **4** 193-203
- Jean, M., Acary, V., Monerie, Y. 2001 Non Smooth Contact dynamics approach of cohesive materials *Phil. Trans. Math. Phys. Eng. Sci., The Royal Society, London A* **8** 2497-2518
- Komiwes, V., Mege P., Meimon Y, Herrmann H. 2006 Simulation of granular flow in a fluid applied to sedimentation *Granular Matter* **8** 41-54
- Moreau, J-J 1994 Some numerical methods in multibody dynamics : application to granular materials *Eur.J.Mech. A Solids* **13** 93-114
- Nezami, E.G., Hashash, Y.M.A., Zhao, D., Ghaboussi, J. 2004 A fast contact detection algorithm for 3-D discrete element method *Computers and Geotechnics* **31** 575-587
- Petit, D., Pradel, F., Ferrer, G., Meimon, Y 2001 Shape effect of grain in a granular flow *in Powders and Grains* 425-428
- Rapaport, D.C 2006 Radial and axial segregation of granular matter in a rotating cylinder : A simulation study *Phys. Rev. E In Press*
- Saussine, G. 2004 Contribution à la modélisation de granulats tridimensionnels : application au ballast *Thèse de doctorat, Université des sciences et Techniques du Languedoc*
- Taberlet, N., Richard, P., Losert, W. 2004 Understanding the dynamics of segregation bands of simulated granular material in a rotating drum *Europhysics Letters* **68** 1953-1972
- Van Den Bergen, G. 1999 A fast and robust GJK implementation for collision detection of convex objects *Journal of Graphics Tools* **4** 7-25
- Zhao, D., Nezami, E.G., Hashas, Y.M.A., Ghaboussi, J. 2006 Three-dimensional discrete element simulation for granular materials *Int. J. for Computer-Aided Eng. and Software* **23** 749-770