

Propriétés effectives de milieux granulaires : une approche chainant la méthode des éléments discrets et la transformée de Fourier rapide

T. CALVET, J-M. VANSON, R. MASSON

CEA, DEN, Département d'Étude des Combustibles, 13108 Saint-Paul-Lez Durance, France
(jean-mathieu.vanson@cea.fr)

Résumé :

Nous présentons ici une méthode de changement d'échelle pour l'évaluation des propriétés effectives de milieux granulaires. Connaissant les caractéristiques des grains constituant le milieu, des éléments de volume représentatifs sont générés à l'aide de la méthode des éléments discrets puis "voxélisés" de façon à estimer les propriétés effectives du milieu à l'aide d'une méthode par transformée de Fourier rapide. Leurs propriétés physiques étant mal définies, les voxels "flous" associés à des interfaces solide-gaz ou aux contacts solide-solide, domaines inhérents à un milieu granulaire, sont clairement identifiés lors de cette étape. L'affectation de propriétés extrêmes à ces voxels flous, permet d'établir des bornes basses et hautes de la propriété effective simulée. Appliquée à un milieu granulaire constitué de fragments de dioxyde d'Uranium plongés dans de l'Hélium, cette méthodologie est utilisée pour estimer la conductivité thermique effective du milieu à différentes températures en comparaison à des données expérimentales. Les bornes hautes et basses s'écartent significativement avec le contraste de conductivité, ce qui montre le rôle significatif des interfaces sur les propriétés effectives calculées. Par ailleurs, les données expérimentales sont très proches de la borne basse, ce qui laisse penser que les interfaces entre fragments sont très résistantes thermiquement dans le cas particulier étudié.

Milieux granulaires ; Conductivité thermique ; DEM ; FFT

1 Introduction

La modélisation des propriétés équivalentes d'un milieu à l'échelle macroscopique constitue un enjeu important pour de nombreuses applications faisant intervenir des milieux géométriquement hétérogènes tels que les milieux granulaires. Si on s'intéresse au problème de conduction, les bornes de Wiener ou de Maxwell-Eucken ([1] et [2]) fournissent un premier encadrement des propriétés thermiques du milieu granulaire mais ces bornes restent en pratique trop éloignées des résultats expérimentaux. Des modèles s'appuyant sur une représentation unidimensionnelle du flux de chaleur ont également été proposés, voir par exemple [3], mais certains paramètres de ces modèles sont en général recalés sur des données expérimentales.

Dans le cas d'une conduction uniquement dans la phase solide, la méthode des éléments discrets (DEM) a été mise en œuvre pour simuler la conductivité effective de milieux granulaires (voir par exemple [4]). Pour tenir compte de la conductivité du gaz entourant les particules solides, des méthodes numériques

combinant la dynamique des éléments discrets et la méthode des éléments finis ont plus récemment été proposées (voir par exemple [5]). Ces méthodes permettent de représenter l'effet des paramètres micro-structuraux (taille et forme des particules notamment) sur la propriété effective. Néanmoins, la modélisation des transferts thermiques dans les interfaces entre les phases solides et gazeuses reste souvent arbitraire.

L'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT) au lieu des éléments finis présente d'indéniables avantages qui seront exposés plus loin. La microstructure du milieu granulaire étudié peut être générée directement par tomographie comme cela a été fait dans [6]. Ici, nous proposons de combiner la DEM pour générer le milieu granulaire tandis que la FFT est utilisée pour en simuler les propriétés effectives. Par ailleurs, les zones d'interface solide-gaz dont les propriétés physiques restent indéterminées font l'objet d'un traitement particulier permettant de quantifier l'effet de notre méconnaissance de leurs propriétés sur la conductivité effective. Cette méthodologie est présentée dans la section 2 de ce papier puis elle est appliquée en section 3 à la détermination du comportement effectif d'un milieu granulaire constitué de particules de dioxyde d'Uranium plongées dans de l'hélium, situation pour laquelle une comparaison à des résultats expérimentaux est effectuée.

2 Méthodologie générale

2.1 Simulation d'un milieu granulaire par la méthode des éléments discrets

La méthode des éléments discrets est largement utilisée pour simuler le comportement granulaire de la matière dans de nombreux domaines. Elle permet de simuler efficacement le ré-arrangement granulaire en tenant compte de la forme, de la taille des fragments ainsi que de leurs interactions. Le comportement rigide des particules est calculé à partir de la détection de leur contacts mutuels et du calcul des forces de contacts. Le réseau de forces est résolu ici par la méthode implicite de dynamique des contacts [15] à l'aide du logiciel LMGC90 [8]. À chaque pas de temps, la méthode se décompose en trois étapes. La première consiste à détecter les contacts entre particules. La deuxième consiste à calculer les forces au niveau des contacts précédemment détectés et la troisième se charge de mettre à jour la position des particules à partir du bilan des forces. Les interactions entre particules sont régies par l'application des conditions de Signorini et par une loi de frottement sec de Coulomb (Fig. 1).

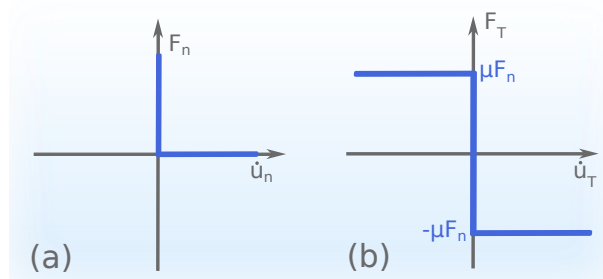


FIGURE 1 – Loi de contact : Conditions de Signorini (a) et loi de Coulomb (b) reliant respectivement la force normale à la vitesse normale et la force tangentielle à la vitesse tangentielle. μ correspond au coefficient de frottement.

L'empilement est généré à partir d'une distribution granulométrique (définie dans la section 3.2), chaque particule ayant une forme polyédrique régulière convexe à huit faces. Dans un premier temps les polyèdres sont déposés dans une boîte parallélépipédique par un algorithme de minimisation de l'énergie potentielle (gravité). L'empilement est ensuite relaxé sous le seul effet de la gravité avec des conditions aux limites périodiques dans les directions X et Y et retenues par un plan fixe en $Z = 0$. Le contact entre les fragments suit une loi de Coulomb avec un coefficient de frottement de 0.2. Une fois le système de force relaxé et la position des fragments stabilisée, le domaine est coupé en Z pour éviter les effets de bords tandis qu'il est conservé complet dans les deux directions périodiques (X, Y).

2.2 Simulation des propriétés thermiques effectives du milieu granulaire par transformée de Fourier rapide

La puissance thermique dissipée par unité de volume est définie en chaque point de l'élément de volume $x \in V$ par :

$$w(x, e) = \frac{1}{2} e \lambda(x) e \quad (1)$$

expression dans laquelle e est l'opposé du gradient thermique (vecteur intensité). La conductivité effective du VER est déterminée par la quantité effective suivante [7] :

$$\overline{W}(\bar{e}) = \min_{e \in K} \frac{1}{|V|} \int_V w(x, e) dx \quad (2)$$

où K désigne un ensemble de champs d'intensité cohérents avec l'intensité moyenne \bar{e} . Pour résoudre le problème défini par la relation (1), la transformée de Fourier rapide (FFT) proposée initialement par [9] est appliquée. Par comparaison à la méthode des éléments finis, la méthode FFT est capable de traiter un grand nombre de degrés de liberté et peut être accélérée par des techniques de parallélisation (ici, OpenMP est utilisée pour la parallélisation des calculs). Par ailleurs, la méthode FFT présente l'avantage de ne pas nécessiter de mailler le VER considéré, sa discrétisation consistant en une grille 3D, chacun des sous-volumes de la grille étant appelé un voxel (dl est la taille de ce voxel). L'algorithme de discrétisation de chaque polyèdre généré avec la DEM est détaillé ci-dessous (Algorithme 1).

Comme l'illustre la figure suivante (2), si la plupart de ces voxels possèdent une conductivité thermique clairement définie car entièrement situés dans la phase solide ou la phase gazeuse, certains sont localisés à l'interface entre les deux phases. Ils ne possèdent donc pas une conductivité thermique clairement définie. Ces voxels qualifiés de "flous" sont identifiés lors de la constitution de la grille et sont caractérisés par une fraction volumique de phase solide. Comme la conductivité thermique du solide est supérieure à celle de la phase gazeuse, si on attribue à ces voxels flous les propriétés effectives du solide, le VER considéré sera plus conducteur. On obtient donc une borne supérieure de la propriété effective cherchée tandis qu'une borne inférieure est obtenue si on affecte à ces voxels flous la propriété thermique de la phase gazeuse. Ce résultat est une extension directe au problème de conduction d'un résultat antérieur obtenu par [10] dans le cadre de l'élasticité linéaire (théorème de renforcement).

Des estimations peuvent également être établies en affectant aux voxels flous une propriété moyenne donnée par une des deux bornes de Wiener [1]. Nous parlerons par la suite d'estimations basse ou haute puisque cela revient à affecter au voxel considéré une valeur haute (modèle parallèle) ou basse (modèle série) de conductivité.

Data: Sorties de la DEM : positions de tous les polyèdres et des sommets de leurs arêtes
 Initialisation : voxelisation du polyèdre (grille 3D (N_x, N_y, N_z)), paramètre de discrétisation (dl)
 ;
for boucle sur les polyèdres (p) **do**
 | **for** boucle sur les faces (f) du polyèdre ' p ' **do**
 | | Détection des voxels "flous" situés sur la face ' f ';
 | | **for** boucle sur les voxels flous (v) de la face ' f ' **do**
 | | | Calcul de la fraction volumique de solide dans le voxel ' v ';
 | | **end**
 | | Détection des voxels entourés par des voxels flous (assignation conductivité du solide);
 | **end**
end
if Borne inférieure **then**
 | Conductivité thermique des voxels flous = conductivité du gaz
else
 | Conductivité thermique des voxels flous = conductivité du solide
end
end

Algorithm 1: Algorithme de voxelisation

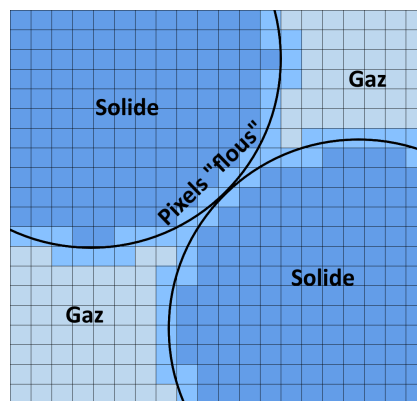


FIGURE 2 – Pixelisation d'une microstructure 2D composée de deux particules sphériques (contours noir). Les pixels gris et bleus désignent les phases solides et gazeuses respectivement. Les pixels en bleu clair correspondent aux pixels "flous" dont la conductivité effective est indéterminée.

3 Comparaison à des résultats expérimentaux

L'approche proposée est ici appliquée à la prédiction de la conductivité thermique de lits de particules de dioxyde d'Uranium plongées dans de l'Hélium, situation pour laquelle on dispose de résultats expérimentaux (voir [11]).

3.1 Propriétés matériaux adoptées

La conductivité thermique de l'Uranium est représentée ici en fonction de la température (T) et de la porosité (p) par la loi de Lucuta [12] :

$$\lambda_{UO_2}(p, T) = \frac{1-p}{1+\frac{1}{2}p} \left[\frac{1}{A+BT} + CT^{-2}e^{\frac{D}{T}} \right], \quad (3)$$

avec $A = 0.0375 K.m.W^{-1}$, $B = 2.165 \times 10^{-4} m.W^{-1}$, $C = 4.715 \times 10^9 W.m^{-1}.K$, $D = -16361 K$. Pour les données expérimentales considérées ici la porosité s'élève à 2% ($p = 0.02$). La phase gazeuse considérée ici est de l'Hélium. Sa dépendance à la température est décrite par l'expression polynomiale suivante (voir [13]) :

$$\lambda_{He}(T) = E + FT - GT^2 + HT^3 \quad (4)$$

avec $E = 4.76 \times 10^{-2} W.m^{-1}.K^{-1}$, $F = 3.62 \times 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-2}$, $G = 6.18 \times 10^{-8} W.m^{-1}.K^{-3}$, $H = 7.18 \times 10^{-12} W.m^{-1}.K^{-4}$.

3.2 Résultats

Cinq milieux granulaires ont été générés avec la DEM à partir des mêmes données d'entrée pour analyser l'effet du tirage sur les résultats. La fraction volumique de gaz ($\approx 40.5\%$) ainsi que la distribution de tailles des polyèdres s'appuient sur les données expérimentales fournies par Boegli [11]. Chaque milieu granulaire généré contient 5000 particules avec des tailles variant de 20 à un peu plus de 120 μm et un paramètre de discrétisation $dl = 10 \mu m$. La moyenne des distributions de taille des fragments pour les différents milieux granulaires générés avec la DEM est reportée sur la figure (3), les barres d'erreurs représentant l'écart type entre tirages.

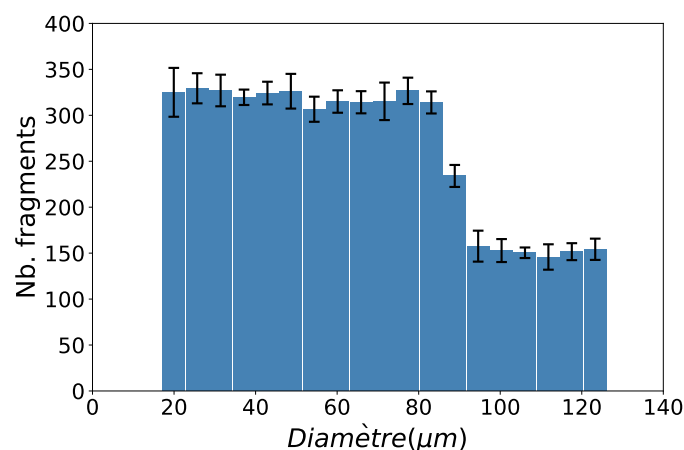


FIGURE 3 – Distribution de taille des polyèdres considérés. Le diamètre est calculé à partir du volume de la sphère de même volume que les polyèdres.

Nous avons reporté sur la figure (4) gauche, l'évolution de la conductivité effective en fonction de la température. Les données expérimentales sont extraites de [11]. A 500K, nous avons également reporté les données expérimentales fournies dans [14], ce qui permet d'apprécier les incertitudes (modérées) liées à la mesure. Toutes ces mesures ont été effectuées sous haute pression d'Hélium afin de s'affranchir des effets de type Knudsen (voir [14]). Les bornes de Maxwell conduisent à un encadrement trop large dans cette situation, notamment à température ambiante (écart relatif légèrement inférieur à 10), température qui correspond au contraste le plus élevé entre les conductivité du solide et du gaz (voir figure (4) droite). C'est pourquoi la borne supérieure de Maxwell n'est pas représentée sur les figures (4). La démarche proposée montre clairement l'effet des interfaces solide - gaz sur la conductivité thermique effective : à température ambiante, l'écart entre la borne basse et l'estimation haute atteint près de 25%. La borne inférieure et l'estimation basse encadrent les valeurs expérimentales. Au final, c'est la borne inférieure qui est la plus proche des valeurs expérimentales.

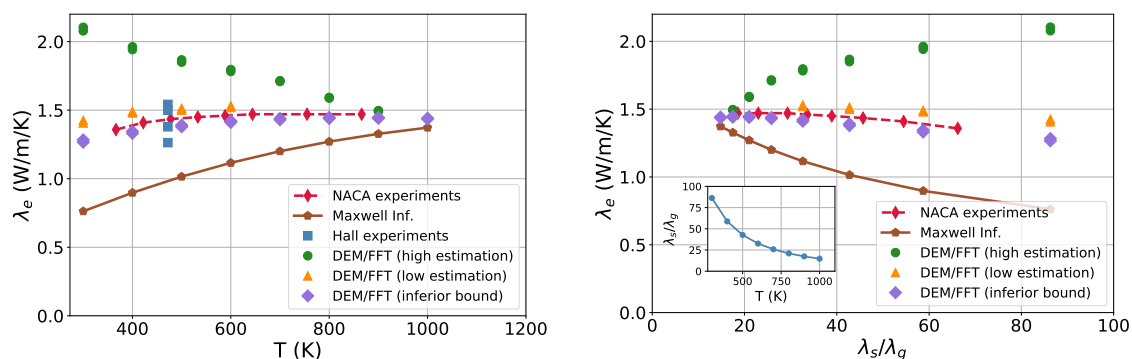


FIGURE 4 – Évolution de la conductivité effective en fonction de la température (à gauche) ou du contraste λ_s/λ_g (à droite) : comparaisons modèles - expériences.

4 Conclusion, perspectives

Dans ce travail, nous avons proposé une méthodologie s'appuyant sur la DEM (génération de l'élément de volume) et sur la FFT (calcul des propriétés effectives) pour simuler la conductivité thermique d'un milieu granulaire. Les effets d'interface solide-gaz, point clé de ces simulations, conduisent à une indétermination des propriétés effectives recherchées. Dans cette étude, nous proposons de définir explicitement ces zones "floues" afin d'encadrer les propriétés effectives recherchées en affectant à ces zones les propriétés thermiques du solide ou du gaz.

Ces bornes ont été comparées à des résultats expérimentaux (particules de dioxyde d'Uranium baignant dans de l'Hélium, température variant de l'ambiante jusqu'à 1000 K, [11]). Nous avons tout d'abord montré qu'en conséquence du rapport relativement important entre la conductivité du solide et celle du gaz (λ_s/λ_g), évoluant entre 65 (à l'ambiante) et 15 (à 900 K), l'écart entre les bornes de Maxwell est trop grand et limite fortement leur intérêt pratique. La méthodologie mise en œuvre permet de resserrer cet écart. Néanmoins, l'effet des zones d'interface sur la conductivité thermique recherchée atteint jusqu'à 25% à température ambiante (écarts relatifs entre les bornes simulées). La borne inférieure s'avère légèrement en deçà mais au final très proche des résultats expérimentaux.

A l'avenir, nous aimerions étudier des milieux granulaires caractérisés par un rapport de taille supérieur à celui étudié ici (≈ 6 dans cette étude). Les zones de contact jouant un rôle important sur les propriétés effectives calculées, nous souhaitons également étudier l'effet de la déformation des particules (cas d'un

milieu granulaire compacté) sur les propriétés effectives simulées.

Remerciements

Les auteurs remercient Dr. E. Castelier pour son aide lors des calculs FFT. Les auteurs remercient également le soutien financier du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives ainsi qu'EDF et FRAMATOME.

Références

- [1] O. Wiener. Die Theorie des Mischkorpers für das Feld der stationären Stromung. *Abhandlungen der Sächsischen Gesellschaft der Akademischen Wissenschaften in Mathematik und Physik*, 32 :509-604, 1912.
- [2] J. C. Maxwell. A Treatise on Electricity and Magnetism, 1873.
- [3] S. Imura and E. Takegoshi. Effect of Gas Pressure on Effective Thermal Conductivity of Packed Beds. *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, 40 :489-497, 1974.
- [4] H.W. Zhang, Q. Zhou, H.L. Xing and H. Muhlhaus. A DEM study on the effective thermal conductivity of granular assemblies. *Powder Technology*, 205 :172 - 183, 2011.
- [5] H. Haddad, M. Guessasma and J. Fortin Heat transfer by conduction using DEM-FEM coupling method. *Computational Materials Science*, 81 :339 - 347, 2014.
- [6] F. Willot, L. Gillibert and D. Jeulin. Microstructure-induced hotspots in the thermal and elastic responses of granular media. *International Journal of Solids and Structures*, 50(10), 1699-1709, 2013.
- [7] S. Torquato. Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. *Springer Science and Business media*, 16, 2013.
- [8] F. Dubois, M. Jean, M. Renouf, R. Mozul, A. Martin, M. Bagneris. LMGC90, 10^{ième} colloque national en calcul des structures, 2011.
- [9] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructures. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 157 :69–94, 1998.
- [10] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : Some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :357–372, 1963.
- [11] J. S. Boegli and R. G. Deissler. Measured effective thermal conductivity of uranium oxide powder in various gases and gas mixtures. National Advisory Committee for Aeronautics Research Memorandum, 1955.
- [12] P.G. Lucuta, H. Matzke and I.J. Hastings. A pragmatic approach to modelling thermal conductivity of irradiated UO₂ fuel : review and recommendations. *Journal of nuclear materials*, 232(2-3), 166-180, 1996.
- [13] R. Drut. Caractéristiques dynamiques de l'hélium : Formules et tables. *Service central de documentation du CEA*, CEA-R-3791, 1-35, 1968.
- [14] R.O.A Hall, D.G. Martin and M.J. Mortimer. The thermal conductivity of UO₂ sphere-pac beds. *Journal of Nuclear Materials*, 173(2), 130–141, 1990.
- [15] Radjai, Farhang and Dubois, Frédéric Modélisation numérique discrète des matériaux granulaires. *ISTE*, 2010