



**HAL**  
open science

## Simulations numériques directes à l'échelle microscopique. Application aux écoulements de suspensions polydisperses concentrées

Grégory Beaume, Patrice Laure, Thierry Coupez

► **To cite this version:**

Grégory Beaume, Patrice Laure, Thierry Coupez. Simulations numériques directes à l'échelle microscopique. Application aux écoulements de suspensions polydisperses concentrées. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. 6 p. hal-00521630

**HAL Id: hal-00521630**

**<https://minesparis-psl.hal.science/hal-00521630>**

Submitted on 28 Sep 2010

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

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

## Simulations numériques directes à l'échelle microscopique. Application aux écoulements de suspensions polydisperses concentrées.

G. Beaume<sup>†\*</sup>, P. Laure<sup>‡</sup> et T. Coupez<sup>\*</sup>

<sup>†</sup> Schneider Electric-Technopôle 38 TEC Grenoble

<sup>\*</sup> Centre de Mise en Forme des Matériaux- Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris UMR 7635  
CNRS 06904 Sophia Antipolis, France

<sup>‡</sup> Institut Non-Linéaire de Nice-UMR 6618 CNRS- Université de Nice Sophia Antipolis  
06560 Valbonne, France

### Résumé :

*Une méthode de simulation numérique directe a été développée pour l'écoulement de mélange de fluides newtoniens et de particules rigides de formes et tailles diverses. Elle est basée sur une approche par domaine fictif, qui consiste à étendre le domaine fluide au domaine occupé par les particules (Glowinski et al(1999)). L'écoulement étant simulé directement à l'échelle des particules, il est ensuite possible de déterminer des paramètres macroscopiques, par homogénéisation sur le volume de calcul.*

### Abstract :

*We present a new finite element method for the direct numerical simulation of fluid flows with suspended rigid spheres and/or fibers. We use a fictitious domain approach extending the fluid domain into the domain occupied by the particles (Glowinski et al(1999)). We are thus able to simulate the evolution of a population of particles under a shear flow, and to compute rheological parameters by direct numerical homogenisation.*

**Mots-clefs : fluide complexe ; Simulation numérique directe ; homogénéisation**

## 1 Introduction

Il existe dans la nature et dans l'industrie un grand nombre de matériaux pouvant être représentés par un mélange d'un fluide et de particules solides. Leur comportement à l'échelle macroscopique (l'échelle des vaisseaux sanguins pour l'écoulement du sang, l'échelle des pièces à mouler pour les écoulements de composites utilisés dans l'industrie, etc... ) est fortement lié aux interactions entre le fluide et les particules d'une part, et entre les particules d'autre part. Pour les suspensions les plus simples (particules toutes identiques, à faible concentration, sans interaction entre elles autres qu' hydrodynamiques ) , il existe des modèles de comportement macroscopique construits par homogénéisation des différentes grandeurs microscopiques , sur un volume élémentaire représentatif du mélange. Les prédictions de ces modèles sont en bon accord avec les observations expérimentales. Néanmoins, lorsque l'on considère des suspensions plus concentrées, les modèles théoriques comportent un certain nombre de paramètres inconnus, que seules les expériences permettent de déterminer. Enfin, dans les cas les plus complexes (grande concentration volumique solide, et plusieurs populations de particules) il n'existe même pas de modèles tenant compte des interactions entre les différentes populations. On doit alors recourir à des modèles empiriques déduits des observations expérimentales (fluide à seuil, fluide en loi puissance) pour avoir une description du comportement macroscopique du mélange.

Pour palier aux lacunes des approches classiques, une alternative intéressante consiste à construire une loi de comportement à partir de simulations numériques directes : il s'agit de simuler directement l'écoulement du fluide et des particules qu'il contient à l'échelle

microscopique, sans aucune approximation (Diaz Goano *et al.* 2003). On peut ensuite moyenniser les différentes grandeurs qui nous intéressent (viscosité effective, tenseur d'orientation des fibres, etc...) sur un volume élémentaire et obtenir une loi de comportement macroscopique : on parle alors d'homogénéisation numérique. Après avoir présenté le problème modèle résolu, nous décrirons brièvement la méthode numérique utilisée puis nous illustrerons notre méthode par quelques résultats obtenus en 2 et 3 dimensions.

## 2 Problème physique

On considère un écoulement de notre mélange sur un domaine spatial  $\Omega$  de géométrie simple (un rectangle de hauteur H et longueur L), séparé en deux sous-domaines  $\Omega_f$  et  $\Omega_s$ , désignant respectivement les domaines fluide solide. Le domaine solide s'écrit comme la réunion des domaines associées à chaque particule  $i$  présente dans le domaine total :  $\Omega_s = \bigcup_{i=1}^n \Omega_s^i$ . Le fluide est supposé newtonien et incompressible. Comme nous nous intéressons au comportement des suspensions lors de la phase d'injection des matériaux dans les moules, nous pouvons faire les approximations classiques liées à ce procédé : on peut négliger les forces d'inertie et de gravité. Le mouvement du fluide est donc correctement décrit par les équations de Stokes :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{\underline{u}} = 0 & \text{sur } \Omega_f & (1) \\ \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \vec{0} & \text{sur } \Omega_f & (2) \\ \underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\eta_f \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{u}}) & \text{sur } \Omega_f & (3) \end{cases}$$

Le mouvement des particules est correctement décrit par les théorèmes de la mécanique des solides. Ainsi, avec les approximations liées à l'injection, la particule solide  $i$ , de barycentre  $\vec{X}_i$ , de masse  $m_i$  et de matrice d'inertie  $\underline{\underline{J}}_i$  se déplaçant à la vitesse  $\vec{U}_i$  et de vecteur rotation  $\vec{\omega}_i$ , obéit aux équations suivantes :

$$\begin{cases} \vec{0} = \vec{F}_i^h + \vec{F}_i^p & (4) \\ \vec{0} = \vec{\Gamma}_i^h + \vec{\Gamma}_i^p & (5) \end{cases}$$

( $\vec{F}_i^h, \vec{\Gamma}_i^h$ ) et ( $\vec{F}_i^p, \vec{\Gamma}_i^p$ ) désignent respectivement les torseurs des efforts exercés sur la particule  $i$  par le fluide et par les autres particules. Le torseur hydrodynamique s'exprime en fonction de la contrainte dans le fluide

$$\begin{cases} \vec{F}_i^h = \int_{\partial\Omega_s^i} \underline{\underline{\sigma}} \vec{n}_{ext} d\Gamma & (6) \\ \vec{\Gamma}_i^h = \int_{\partial\Omega_s^i} (\vec{x} - \vec{X}_i) \wedge \underline{\underline{\sigma}} \vec{n}_{ext} d\Gamma & (7) \end{cases}$$

Le torseur interparticulaire est une force de courte portée, de la même forme que celle proposée par Glowinski *et al.* (1999) et le moment associé. Enfin, nous avons une condition de mouvement de corps solide à l'interface fluide particule :

$$\forall \vec{x} \in \partial\Omega_s^i \quad u(\vec{x}) = \vec{U}_i(\vec{x}) + \vec{\omega}_i \wedge (\vec{x} - \vec{X}_i) \quad (8)$$

## 3 Méthode numérique

### 3.1 Méthode de domaine fictif

Nous utilisons une méthode de domaine fictif pour résoudre notre problème. La philosophie de cette méthode consiste à étendre le calcul du champ de vitesse au domaine  $\Omega$  entier. On peut alors étendre la condition de rigidité (8) à tout le domaine solide  $\Omega_s$  :

$$\forall \bar{x} \in \Omega_s^i \quad u(\bar{x}) = \bar{U}_i(\bar{x}) + \bar{w}_i \wedge (\bar{x} - \bar{X}_i) \quad (9)$$

Nous nous sommes inspirés de la méthode de Patankar *et al.* (2000) pour reformuler la contrainte de rigidité (9) en la remplaçant par la contrainte équivalente d'incompressibilité et d'indéformabilité du domaine solide :

$$\forall \bar{x} \in \Omega_s \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{u}(x)) = \underline{\underline{0}} \quad (10)$$

que nous imposons directement sous forme de contrainte à l'aide du multiplicateur de Lagrange  $\bar{\lambda}$ . Par ailleurs, l'originalité de notre méthode réside dans la reformulation des termes d'interactions interparticulaires. On remarque que tout champ de vitesse  $\bar{w}$  sur  $\Omega_s^i$  est relié aux vitesses et rotations discrètes  $\bar{V}$  et  $\bar{\xi}$  par les relations :

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} \bar{V} = \frac{1}{Vol(\Omega_s^i)} \int_{\Omega_s^i} \bar{w} d\Omega \\ \underline{\underline{I}}_s^i \bar{\xi} = \int_{\Omega_s^i} (\bar{x} - \bar{X}_i) \wedge \rho_s^i \bar{w} d\Omega \end{array} \right.$$

$Vol(\Omega_s^i)$ ,  $\underline{\underline{I}}_s^i$  et  $\rho_s^i$  désignent respectivement le volume, la matrice d'inertie et la masse volumique de la particule  $i$ . Les particules étant soit des sphères, soit des cylindres de révolution, on vérifie aisément que les matrices d'inertie sont diagonales. On montre alors facilement qu'il existe un champ de force continu  $\bar{f}_p(\bar{x})$  défini en tout point de l'espace et tel que :

$$\int_{\Omega} \bar{f}_p(\bar{x}) \bar{w} d\Omega = \bar{F}_i^p \cdot \bar{V} + \bar{\Gamma}_i^p \cdot \bar{\xi} \text{ avec } \bar{f}_p(\bar{x}) = \begin{cases} \frac{\bar{F}_i^p}{Vol(\Omega_s^i)} + \frac{1}{\rho_s^i} (\underline{\underline{I}}_s^i)^{-1} [(\bar{x} - \bar{X}_i) \wedge \bar{\Gamma}_i^p] & \text{si } \bar{x} \in \Omega_s^i \\ \bar{0} & \text{si } \bar{x} \notin \Omega_s^i \end{cases}$$

On obtient alors la formulation variationnelle suivante : on cherche  $(\bar{u}, \bar{\lambda}, p) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega_s) \times L_0^2(\Omega)$  tel que pour tout  $(\bar{w}, \bar{\mu}, q) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega_s) \times L_0^2(\Omega)$  :

$$(12) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \bar{f}_p(\bar{x}) \bar{w} d\Omega = 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{w}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \bar{w} d\Omega \dots \\ \dots + \int_{\Gamma} (\underline{\underline{\sigma}}_{ext}) \bar{w} d\Gamma + \int_{\Omega_s} I_{\Omega_s}(\bar{x}) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{\lambda}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{w}) d\Omega \\ 0 = \int_{\Omega_f} q \nabla \bar{u} d\Omega \\ 0 = \int_{\Omega} I_{\Omega_s}(\bar{x}) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{\mu}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{u}) d\Omega \end{array} \right.$$

### 3.2 Milieu effectif et conditions limites

Pour obtenir une loi de comportement macroscopique par homogénéisation, et sans effet de bord, nous utilisons les conditions limites bipériodiques de Lee Edwards (Lees *et al.* 1972), pour la localisation des particules. Ces conditions permettent d'imposer un écoulement sous cisaillement simple, sans effet de bord. Nous n'utilisons pas directement les conditions de périodicité sur le champ de vitesse, car elles sont difficilement implémentables dans un contexte parallèle. Notre objectif est de créer un milieu effectif autour de notre cellule de calcul, représentatif du milieu réel, et d'effectuer un calcul sans effet de bord. Ce milieu effectif est une image périodique de la cellule de calcul, évoluant au cours du temps, sous l'effet du cisaillement. En pratique, nous effectuons nos calculs sur un carré ou cube unité. Les particules réelles existent dans le carré ou cube central d'arrête un demi, le milieu effectif correspond au reste du domaine. Les calculs de transport de particules et d'homogénéisation sont effectués sur le carré (cube) central. Un exemple de population de particules est donné en figure 2.

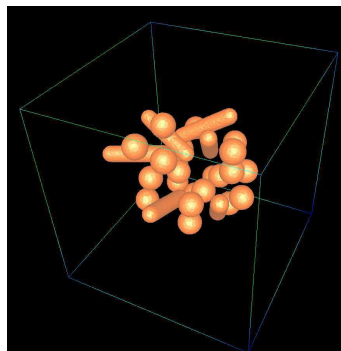
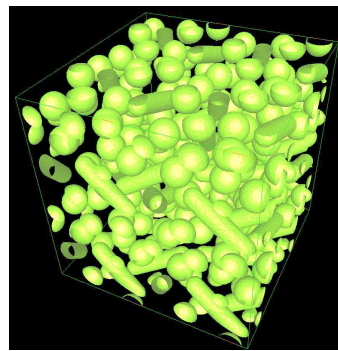


FIG. 2 -Les particules réelles évoluent dans le cube central de côté  $\frac{1}{2}$ . Lorsque une particule quitte le cube, elle y est réintroduite par périodicité (conditions de Lee Edwards)



Le reste du domaine est rempli de particules qui sont des copies des charges réelles du cube central. Ces particules fictives sont créées en utilisant les conditions de périodicité de Lee Edwards

Les conditions limites aux frontières du domaine correspondent à un écoulement de Couette classique.

### 3.3 Projection et transport de la phase solide

La projection du domaine dans le maillage de fond (c'est-à-dire le calcul direct des fonctions caractéristiques) se fait par une méthode de type level-set (Osher *et al.* 1988): on définit aux nœuds du maillage la fonction level-set  $d_s$  comme étant la distance signée (positive dans le domaine solide, négative dans le fluide) à l'interface  $\Gamma_s$  entre les particules et le fluide. Cette fonction dépend du rayon des sphères, de la position du barycentre, et pour les sphères de la longueur et de l'orientation. Cette fonction est facile à calculer et permet de définir directement la fonction caractéristique  $I_{\Omega_s}$  selon :

$$I_{\Omega_s}(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } d_s(\vec{x}) < 0 \\ 1 & \text{si } d_s(\vec{x}) \geq 0 \end{cases} \quad (13)$$

Ce calcul se fait en prenant en compte les images périodiques des particules définissant le milieu effectif. A chaque pas de temps le domaine solide est transporté par une méthode particulière : on met à jour les positions et orientations des particules à partir du champ de vitesse calculé, selon les formules suivantes :

$$\begin{cases} \bar{X}_i(t+dt) = \bar{X}_i(t) + dt \times \bar{u}(\bar{X}_i(t), t) \\ \bar{p}_i(t+dt) = \bar{p}_i(t) + dt \underline{\underline{\Omega}}(\bar{u}(\bar{X}_i(t), t)) \bar{p}_i(t) \end{cases} \quad (14)$$

Où  $\underline{\underline{\Omega}}(\bar{u}(\bar{X}_i(t), t))$  désigne la partie antisymétrique du tenseur gradient de vitesse. On recalcule ensuite la fonction level-set et la fonction caractéristique associée, à partir de ces nouvelles positions et orientations. Il n'y a donc aucune déformation des particules solides.

### 3.4 Algorithme général

Pour résoudre le problème en vitesse pression, nous utilisons une méthode de lagrangien augmenté (ce qui revient à rajouter un terme de pénalisation dans le problème (12)) et nous utilisons un algorithme d'Uzawa pour le calcul du multiplicateur de Lagrange. Cet algorithme converge en 7-8 itérations. Nous nous ramenons à chaque itération à un problème de Stokes incompressible avec second membre, résolu par une méthode classique d'éléments finis P1+P1.

### 3.5 Homogénéisation numérique

Il est possible de calculer à chaque pas de temps les valeurs moyennes des différentes grandeurs. Nous avons concentré notre étude sur les mesures de viscosité apparente pour les suspensions de sphères, et sur les mesures des paramètres rhéologiques équivalents (généralement notés  $N_s$  et  $N_p$ ) pour des suspensions de fibres. La moyenne volumique d'une grandeur est donnée par :

$$\langle X \rangle_{\Omega_i} = \frac{1}{Vol(\Omega)} \int_{\Omega_i} X(\bar{x}) d\Omega \quad (15)$$

On peut facilement montrer que la contrainte volumique moyenne s'exprime selon :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega} = -\langle p \rangle_{\Omega} \underline{\underline{I}} + 2\eta_f \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{u}) \rangle_{\Omega_f} + \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{\lambda}_s) \rangle_{\Omega_s} \quad (16)$$

On peut donc écrire la contrainte moyenne comme la somme d'une contribution fluide et d'une contribution solide qui s'écrit :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = -\langle p \rangle_{\Omega_s} \underline{\underline{I}} + \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\bar{\lambda}) \rangle_{\Omega_s} \quad (17)$$

On peut alors calculer la viscosité apparente de la façon suivante :

$$\eta_{app} = \frac{\langle \underline{\underline{\sigma}}_{xy} \rangle_{\Omega}}{\dot{\gamma}} \approx \eta_f + \frac{\langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{xy}(\bar{\lambda}) \rangle_{\Omega_s}}{\dot{\gamma}} \quad (18)$$

## 4 Quelques résultats et conclusion

Nous montrons ici un premier calcul d'homogénéisation : c'est la mesure d'une viscosité effective pour une suspension de sphères en 2 dimensions, présentée en figure 3. Nous retrouvons bien la croissance exponentielle de la viscosité avec la concentration solide, prédite par les modèles théoriques (Ancey *et al.* 1999).

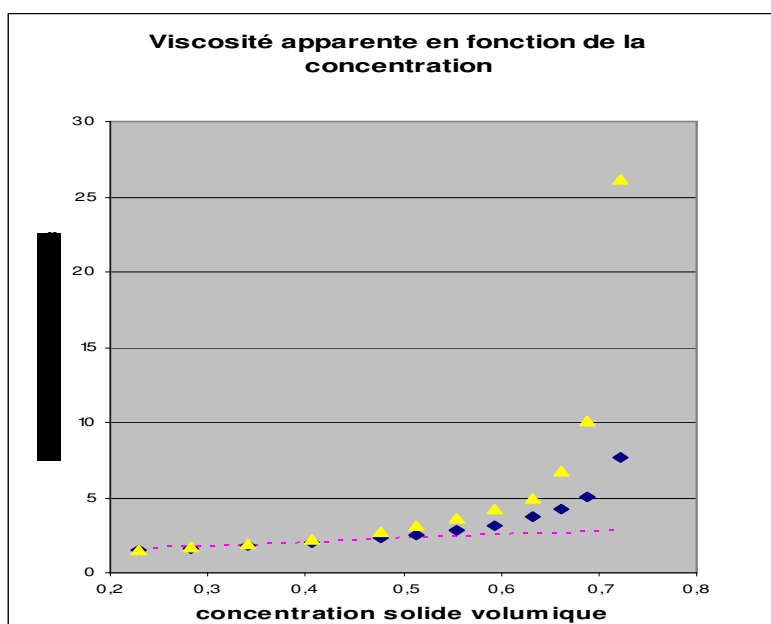


FIG. 2 : Viscosité apparente pour une configuration cubique 2D de disques dans une cellule carrée. Les losanges et les triangles représentent les viscosités calculées pour différents rayons, avec les conditions limites bipériodiques (losanges) et avec des conditions limites de Dirichlet (triangles). En pointillé nous avons tracé la viscosité apparente calculée avec la formule d'Einstein (formule linéaire, valable à faible concentration)

## Références

- Glowinski, G., Pan, T-W., Hesla, T. I. & Joseph, D.D 1999 A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flow. *Int. J. of Multiphase flow*,25: 755-794.
- Diaz-Goano, C., Minev, P. D., Nandakumar, K. 2003 A fictitious domain/finite element method for particulate flows. *J. of Computational Physics*,192: 105-123.
- Lees, A.W., Edwards S.F., 1972 The computer study of transport processes under extreme conditions. *J. Phys. C* 5, 1921.
- Fortin M., Glowinski R. 1983 Augmented lagrangian methods: applications to the Numerical solution of boundary value problems. Amsterdam (book).
- Osher, S., and Sethian 1988 J.A., Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton--Jacobi Formulations. *Journal of Computational Physics*, 79, 12-49.
- Ancely, C. Coussot, P. 1999 Rhéophysique des pâtes et des suspensions, *EDP Sciences*.
- Patankar, N.A., Singh, P., Joseph, D. D, Glowinski, R.et Pan, T. W. (2000) A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/ fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. of multiphase flow*, 26: 1509-1524.