Approche virtuelle pour la génération de milieux poreux et l'évaluation de la tortuosité

Mohamed Chekired, Varvara Roubtsova et Marin Lagacé Institut de recherche d'Hydro-Québec, Varennes, Québec, Canada



RÉSUMÉ

La tortuosité dans les milieux granulaires a été introduite pour tenir compte des caractéristiques du réseau poral nécessaire à l'estimation de la perméabilité. Plusieurs modèles de tortuosité ont été proposés dans la littérature. Ces modèles sont basés sur un écoulement bidimensionnel qui ne reflète pas la réalité, car l'écoulement est intrinsèquement lié au caractère tridimensionnel de la forme des particules. Cet article présente les possibilités qu'offre un outil de simulation numérique, développé à l'IREQ, appelé SiGran, et dont la vocation est de constituer un logiciel robuste et opérationnel pour traiter, entre autres, des problématiques liées aux écoulements au travers des milieux granulaires. Cet outil permet de générer un milieu granulaire constitué de particules de forme sphérique ou naturelle et de simuler un écoulement. L'approche retenue dans le développement de cet outil permet d'étudier les différentes variables à l'échelle microscopique. Les résultats de simulation obtenus, lorsque confrontés à ceux issus d'expériences, montrent que l'outil SiGran reproduit fidèlement la réalité.

ABSTRACT

Tortuosity in granular media has been introduced to reflect the network pore characteristics required to estimate permeability. Several models of tortuosity have been proposed in the literature. These models are based on a two-dimensional flow that does not reflect reality. Tortuosity of flow is intrinsically linked to the three-dimensionality of the particle shape. This article presents the opportunities offered by a numerical simulation tool developed at IREQ, called SiGran, and whose mission is to build a robust and operational software to address, among other things, issues related to flow through granular media. This tool can generate a granular medium consisting of particles of either spherical or natural form and simulate flow through it. The tool was designed to allow for the investigation of the different variables on a microscopic scale. Simulation data obtained using SiGran match extremely well with experimental results.

1 INTRODUCTION

Les besoins de modélisation des écoulements dans les milieux granulaires se rencontrent dans de nombreux domaines. La description des écoulements a été, à ce jour, effectuée à une échelle macroscopique, car il est difficile de considérer la structure du réseau poral dans son intégrité par la mesure exacte des paramètres morphologiques et topologiques de cette structure. Pour comprendre l'influence de ces paramètres, il est nécessaire d'effectuer l'étude des écoulements à l'échelle des pores, régis par les équations de Navier-Stokes, et ensuite son passage aux écoulements macroscopiques, régis par la loi de Darcy. Le comportement à l'échelle macroscopique de Darcy, obtenu en laboratoire et qui décrit les phénomènes pour des volumes suffisamment représentatifs permet de calculer la perméabilité intrinsèque du milieu. Même si la loi de Darcy a été établie expérimentalement, il ne demeure pas moins que son utilisation reste soumise à des hypothèses très restrictives. La perméabilité calculée à l'échelle macroscopique est importante, car elle restitue l'ensemble des phénomènes microscopique de l'écoulement.

Les milieux granulaires présentent des structures porales complexes qui influencent grandement leurs propriétés d'écoulement. L'analyse de ces structures, constituées de pores et de canaux de formes diverses, nécessite la connaissance de la géométrie exacte des pores. Cette dernière est extrêmement complexe à décrire comme cela est mentionné dans les ouvrages dédiés à ce sujet.

Les détails associés aux caractéristiques d'un milieu poreux ne sont que très rarement disponibles lorsque les principaux paramètres caractérisant sa structure géométrique et leur interdépendance sont évalués.

La modélisation des écoulements dans un milieu granulaire doit prendre en compte la complexité interne de sa géométrie au niveau microscopique où les lois physiques fondamentales s'appliquent, mais où les variables sont inaccessibles à la mesure. Pour pallier à cette complexité, la structure porale qui se caractérise par une forte hétérogénéité est généralement modélisée par un faisceau de capillaires parallèles d'égale longueur tel que proposé par le modèle de prédiction de la perméabilité de Kozeny-Carman (KC).

Le modèle KC présente encore des limites, car il ne tient pas compte de la taille des pores et de leur connectivité, de la forme et du changement de section le long d'un pore parcouru par le fluide pour de milieux granulaires constitués de particules de formes diverses. De plus, l'application de ce modèle nécessite la connaissance de la surface spécifique et de la tortuosité. Ces deux paramètres ne sont pas aisés à estimer. Il existe plusieurs études qui traitent du calcul de la tortuosité.

La nécessité de disposer d'informations à l'échelle microscopique pour la compréhension des phénomènes d'écoulement a fait l'objet de plusieurs recherches. L'approche la plus répandue consiste en une reconstitution tridimensionnelle de l'espace poral d'un échantillon de sol à partir de coupes sériées. Cette approche comporte toutefois des incertitudes associées au seuil de binarisation.

Cette incertitude est plus importante lorsque la taille des particules est petite.

La capture tridimensionnelle de la complexité du réseau poral pose donc encore un défi technologique important et il demeure nécessaire de développer une approche qui permettrait de le décrire et ainsi développer des lois qui régissent les écoulements. Cet article présente les possibilités qui caractérisent un outil de simulation, appelé SiGran, permettant un approche virtuelle. Cet outil a été conçu de sorte à pouvoir, non seulement mimer la réalité, mais aussi extraire l'information à l'échelle du pore et de la particule. Il permet, dans une première étape, la génération d'un milieu granulaire, constitué d'un grand nombre de quelque soit l'étendue de la courbe particules, granulométrique et ne se limite donc pas aux milieux mono ou bidisperse. L'approche discrète est retenue et elle suppose que le comportement à l'échelle macroscopique résulte des interactions à l'échelle des grains.

Cet outil tient compte des différentes formes d'interaction qui ont lieu au contact entre les particules sous l'effet de la gravité ou de forces externes qu'elles soient statiques ou dynamiques. Une fois le milieu granulaire généré et conditionné à la densité désirée, l'écoulement est simulé. Les équations de Navier-Stokes complètes, capables de décrire le mouvement d'un fluide, sont résolues. La résolution de ces équations aboutie à la détermination du champ de pression et de vitesses à l'intérieur des pores. L'hypothèse d'un fluide newtonien incompressible en écoulement conservatif est retenue.

Les lignes de courant dans la structure poreuse peuvent être tracées. Elles sont définies comme les lignes tangentes en chacun de leur point au vecteur vitesse en ce point. La longueur réelle des lignes de courant permettra de définir précisément la tortuosité. Aussi, cet outil permet notamment de calculer la surface spécifique et les vitesses des écoulements le long des lignes de courant.

SiGran est en constante évolution et est concu de sorte à pouvoir intégrer les complications rencontrées dans d'autres phénomènes tels que les écoulements turbulents ou la migration des particules. Cet article ne présentera que l'étude de milieux granulaires constitués de particules idéalisées de forme sphérique au travers desquels un écoulement sera simulé. Des travaux de recherche visant l'étude des écoulements au travers de milieux granulaires constitués des particules de forme naturelle sont en cours. La figure 1 montre un milieu granulaire constitué de particules de forme naturelle. Par ailleurs, cet outil a été concu de sorte à permettre, notamment, de: 1/ connaître les forces inter-particulaires, 2/ suivre les trajectoires des particules lors de leur migration lors du processus d'érosion (Chekired et al., 2010) , 3/ simuler des essais de cisaillement direct (Roubtsova et al., 2011) 4/ évaluer les différents types d'énergies lors d'un essai de cisaillement direct (Roubtsova et al., 2015), etc. Cet outil comporte une interface qui permet de visualiser le paramètre choisi et de voyager virtuellement à l'intérieur de l'échantillon.

2 LA TORTUOSITÉ

La tortuosité hydraulique est une propriété fondamentale des milieux poreux. Le concept de tortuosité a été introduit par Carman (1937) dans le but de faire correspondre la perméabilité, calculée sur la base d'un faisceau de tubes capillaires, aux données expérimentales (Dullien, 1979). Ce paramètre est souvent considéré comme paramètre d'ajustement entre les données expérimentales et les celles générées par les modèles de perméabilité. Sa définition est empirique et est, déduite indirectement d'expériences plutôt que déterminée expérimentalement. La tortuosité est donc mesurée indirectement, et à ce jour, n'a pu être calculée.

La tortuosité est définie comme suit:

$$\tau = \frac{l_T}{lo}$$
 [1]

 I_{T} étant la longueur d'un canal qui traverse l'échantillon et I_{o} la longueur du chemin rectiligne.



Figure 1. Vue d'un échantillon constitué de 750 000 particules de forme naturelle (de 10 à 100 microns).

Plusieurs formulations de la tortuosité hydraulique en fonction de la porosité ont été proposées dans la littérature. Ces formulations, dans la majorité des cas, ont été établies à partir d'écoulements bidimensionnels (Koponen, 1996, Duda et al., 2011, Matyka et al., 2008) et rarement tridimensionnels (Yun et al., 2006)), sur des structures idéalisées composées de particules de formes simples dans configurations d'assemblage régulières (Freytag et Roque, 2013). Dans certains cas, ces particules se chevauchent. Yun et al. (2006) ont établi des formules de tortuosité à partir de diverses figures géométriques en utilisant des particules idéalisés. Aussi, certaines formulations introduisent des paramètres d'ajustement sans signification physique. Par ailleurs, les modélisations simplifiées en 2D ne peuvent représenter la réalité, car les écoulements ont un caractère tridimensionnel. En effet, les particules font diverger l'écoulement dans toutes les directions. D'un point de vue énergétique, les particules d'eau suivent le chemin qui requière le moins d'énergie, ce qui signifie que la particule d'eau peut suivre un chemin différent de celui imposé dans une simulation en 2D.

Bien que l'équation KC est largement acceptée, souvent modifiée et très utilisée, comporte une constante empirique qui s'est révélée ne pas être constante. Cette constante traduit la forme des pores et dépend de la tortuosité qui est un paramètre qui présente une grande dispersion selon l'étendue de la porosité étudiée. Parmi les expressions de tortuosité, issues d'essais en laboratoire ou de simulations numériques en 2D, qui ne s'appliquent qu'à des étendues précises de la porosité, on retrouve notamment:

$$\tau = 1 + 0.8(1 - \phi)$$
 Kaponen et al. (1996) [2]

$$\tau = 1 + 0.5\sqrt{1 - \phi}$$
 Duda et al. (2011) [3]

$$T = \phi^{-n}$$
 Dias et al. (2005) [4]

$$\tau = 1 - 0.41 \ln(\phi)$$
 Comiti et Renaud (1898) [5]

$$\tau = 1 - 0.49 \ln(\phi)$$
 Weissberg (1963) [6]

$$\tau = \sqrt{1 + 2(1 - \phi)}$$
 Iversen et Jorgensen (1993) [7]

Il n'existe donc par une formulation de la tortuosité qui peut être appliquée à l'ensemble des milieux granulaires.

3. L'APPROCHE VIRTUELLE

L'approche virtuelle développée consiste à reproduire les différents phénomènes rencontrés dans les milieux granulaires. Il s'agit notamment de générer un milieu granulaire en respectant sa courbe granulométrique et en tenant compte de la nature du contact inter-particules. Une fois l'échantillon généré et conditionné à la densité désirée, un écoulement au travers de l'échantillon est simulé. Le traitement des images permet par la suite d'extraire les données souhaitées.

3.1 Volume élémentaire représentatif

Afin de s'assurer que la taille de l'échantillon généré soit représentative du milieu granulaire, il est important de définir un volume élémentaire représentatif (VER). Ce VER est un volume pour lequel les propriétés caractéristiques moyennes telles que la porosité ou la perméabilité peuvent être déduites et au-delà duquel elles ne varient plus. En réalité, un milieu poreux est constitué de particules solides et de vides pour lesquelles il n'est pas possible d'attribuer des notions comme la porosité et la perméabilité qu'à partir d'une échelle supérieure de plusieurs ordres de grandeur à l'échelle des pores.

Comme la discrétisation temporelle et spatiale nécessaire à gestion des contacts inter-particulaires et à la résolution des équations de Navier-Stokes nécessitent un temps de calcul important, la plus petite taille du VER a été adoptée.

3.2 Génération virtuelle des milieux granulaires

La méthode des éléments discrets est la méthode qui représente un milieu granulaire comme un assemblage de particule. Cette méthode permet d'obtenir la position, la vitesse et l'accélération de chaque particule à chaque itération à partir des forces d'interaction. (Bertrand et al., 2005; Lemieux et al., 2008). La figure 2 montre les interactions tridimensionnelles considérées lors de la génération des milieux granulaires.

Les équations fondamentales de mouvement pour la particule *i* s'expriment comme suit.

$$m_i \frac{d\vec{V}_i}{dt} = m_i \vec{g} + \sum_{i=1}^k \left(\vec{F}_{cnjj} + \vec{F}_{dnjj} + \vec{F}_{ctjj} + \vec{F}_{dt,ij} \right) \tag{8}$$

$$I_{i} \frac{d\vec{\omega}_{i}}{dt} = \sum_{i=1}^{k} \left(\vec{T}_{ij} + \vec{M}_{ij}\right)$$
 [9]

L'indice j réfère à la particule voisine et l'indice k réfère, quant à lui, au nombre de particules voisines.

 m_{i} , l_{i} , sont la masse (kg) et le moment d'inertie (kg·m²) de la particule i, respectivement.

 \vec{V}_i et $\vec{\omega}_i$: Vitesses de translation (m/s) et de rotation (s⁻¹) de la particule *i*, respectivement.

t: Temps (s)

g: Accélération de gravité (m/s)

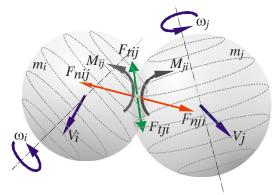


Figure 2. Représentation des interactions inter-particules

En se basant sur la théorie de contact proposée par Hertz (1882), la force normale du contact est:

$$\vec{\mathsf{F}}_{cn,ij} = -\mathsf{K}_n \delta_n^{\frac{3}{2}} \vec{n} \ \ (\mathsf{N}). \tag{10}$$

Hertz suppose que le contact provoque des déformations localisées dans la zone du contact dont la taille est négligeable par rapport à l'échelle des corps.

$$\mathsf{K}_{\scriptscriptstyle n} = \frac{4}{3}\mathsf{E}^*\sqrt{\mathsf{R}^*}$$

$$\frac{1}{E^{*}} = \frac{1 - v_{i}^{2}}{E_{i}} + \frac{1 - v_{j}^{2}}{E_{j}}$$
 représente le module de Young du

E: Module de Young (Pa) et v: Coefficient de Poisson

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{|R_i|} + \frac{1}{|R_i|}$$
 représente le rayon du contact

R: Rayon de particule (m)

 δ_n : Déplacement normal (m)

 \vec{n} : Direction de la normale du contact

La théorie de Mindlin et Deresiewicz (1953) a été retenue pour la force de friction au contact et s'exprime comme suit:

$$\frac{d\vec{F}_{ct,ij}}{\vec{d}\delta_t} = -K_t$$

Cette force est limitée par la loi de Coulomb $\left| \mathbf{F}_{cl,ij} \right| \leq \mu_s \mathbf{F}_{cl,ij}$

$$K_{t} = 2\sqrt{R\delta_{n}} \left(\frac{G_{i}}{2 - v_{i}} + \frac{G_{j}}{2 - v_{j}} \right)$$

 μ_{s} : Coefficient de friction

 δ_t : Déplacement tangentiel (m) G: Module de cisaillement (Pa)

 $\vec{F}_{dn,ij} = -C_n \vec{V}_{n,ij}$ et $\vec{F}_{dt,ij} = -C_t \vec{V}_{t,ij}$: Forces normales et tangentielles d'amortissement (N), respectivement.

 $C_n = 2\sqrt{m^*K_n}$: Coefficient d'amortissement normal au contact

$$C_{i} = C_{i} \sqrt{\frac{K_{i}}{K_{n}}}$$
 :Coefficient d'amortissement tangentiel

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$$
 représente le masse au contact (kg)

$$\vec{T}_{ij} = R_i \left(\vec{F}_{ctij} + \vec{F}_{dtij} \right)$$
: Moment des forces tangentielles (N·m)

$$\vec{M}_{_{ij}} = -\mu_{_{r}} \Big| \vec{F}_{_{cn,ij}} \Big| \frac{\vec{\omega}_{_{i}}}{\left|\vec{\omega}_{_{i}}\right|} \ : \ \ \text{Moment des forces d'amortissement}$$

(N-m)

 μ_r : Coefficient de friction généré par le roulement

OpenCL a été utilisé afin d'atteindre un haut niveau de parallélisme de données sur NVIDIA Graphics Processing Unit (GPU) basé sur Tesla High Performance Computing (HPC) hardware. L'interface de programmation OpenGL a été retenue.

Les échantillons sont générés en premier lieu avec une densité minimale. Pour atteindre cet état de densité, l'échantillon est généré couche par couche. Chacune des couches de particules est positionnée au-dessus de la dernière couche générée et ne sera soumise à la gravité que lorsque les particules de la dernière couche s'immobilisent. L'outil permet de générer un échantillon composé de particules sphériques sans ségrégation et en respectant la courbe granulométrique dans toute son étendue. La figure 3 montre des captures d'écran du processus de génération d'un échantillon composé de particules sphériques. Les couleurs dans la figure 3(a) traduit les différentes couches de particules. Celles de la figure 3(b) montre les vitesses des particules. La couleur bleue signifie que la vitesse est nulle. Enfin, la figure 3(c) montre une vue de l'échantillon dans laquelle les couleurs sont associées à la taille des particules.

Une fois l'échantillon généré, il est soumis à une vibration jusqu'à l'obtention d'une densité désirée. Dans le cas de cet article, les échantillons sont densifiés jusqu'à l'obtention de la densité maximale. Lors de la vibration, une contrainte verticale constante de 14 kPa est appliquée sur l'échantillon. La fréquence de vibration est égale à 60 Hz en double amplitude de 0,33 mm, ce qui correspond à la procédure de la norme ASTM D 4253. Aussi, afin de s'assurer que l'échantillon a bien atteint la densification maximale, la hauteur est mesurée tout au long du processus de vibration.

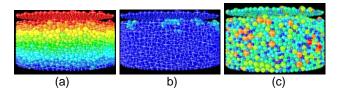


Figure 3. Captures d'écran lors du processus de génération d'un échantillon composé de particules de forme sphérique.

3.3 Modélisation des écoulements

On considère l'écoulement incompressible d'un fluide visqueux newtonien en trois dimensions. La formulation différentielle des équations de Navier-Stokes, qui décrivent un écoulement d'un fluide, visqueux, newtonien, incompressible et à température constante est la suivante:

• Équation de continuité (pour un fluide incompressible)
$$\nabla u = 0$$
 [11]

Avec:
$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

 $u = (u_x, u_y, u_z)$: Vitesse eulérienne en un point de fluide.

• Équation de bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -(u.\nabla)u + \nabla \cdot (\nu \nabla u) - \frac{1}{\rho} \nabla p + f$$
 [12]

ρ: Densité de l'eau (kg/m³)

p: Pression (Pa)

 f: Résultante des forces massiques s'exerçant dans le fluide (N/kg)

Pour résoudre les équations de Navier-Stokes, il est nécessaire de discrétiser la zone dans laquelle se déroule l'écoulement, afin de linéariser les équations différentielles et de calculer les vitesses et les pressions en des points donnés de l'espace.

La discrétisation est une opération permettant de transformer un modèle mathématique dans une version numérique qui peut être traitée par des moyens informatiques. Toutes les variables sont distribuées dans l'espace ou le temps soient notamment, les composantes de la vitesse et le champ de pression. Ces variables doivent ainsi être représentées de manière discrète et sont portées sur des " nœuds ".

Pour la discrétisation spatiale, un maillage en différences finies "Marker-and-Cell", ou maillage MAC, introduit par Harlow et Welsh (1965) a été adopté. Il s'agit d'un maillage Eulérien qui se caractérise par une grille fixe et régulière. Tous les points de la discrétisation restent par conséquent fixes dans l'espace au fur et à mesure de l'avancée de la résolution du problème. Pour obtenir la description eulérienne d'un écoulement, on calcule les grandeurs physiques (vitesse et pression) aux points du réseau de discrétisation, disposés en des points déterminés de l'espace. Sur ce réseau, le champ de pression est centré sur les points de maillage alors que les champs de vitesse sont décalés d'une demi-maille, respectivement dans les directions x, y et z. La pression est donc enregistrée au centre de la cellule, et les composantes de la vitesse sont stockées sur les faces de la cellule.

Pour prévenir une instabilité numérique, le pas de temps doit être assez petit. En fait, le pas de temps doit être inférieur au plus petit des deux pas de temps déterminés par les termes d'advection et diffusion (Condition de Neumann). Ainsi, le pas de temps sera déterminé comme suit:

$$\Delta t \le \min \left(\Delta t_{\text{adv.}} = \frac{4\nu}{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}, \ \Delta t_{\text{diff.}} = \frac{0.25h^2}{\nu} \right)$$
 [13]

Dans le cas d'un faible Nombre de Reynolds, le terme diffusif contrôlera le pas de temps. Avant chacune des itérations, la valeur du pas de temps est déterminée à partir de ces conditions.

En mécanique des fluides, il est traditionnel de considérer que les vitesses normale et tangentielle à une surface solide sont nulles, autrement dit que le fluide ne pénètre pas et ne glisse pas sur la surface solide. Cette hypothèse constitue la condition de non-glissement et de non-pénétration ("no-pénétration et no-slip") qui est empirique et n'a donc pas de fondement physique. Pour s'assurer d'une interaction adéquate entre les particules et le fluide, il est nécessaire d'introduire la notion de non-glissement sur chacune des cellules en surface de la particule.

Dans les équations de Navier-Stockes, valident pour le mouvement d'un fluide incompressible dans l'espace poral, la condition de non-glissement a été retenue pour les cellules qui appartiennent aux particules (W. Kalthoff et al., 1997).

4. VALIDATION

Dans le but de valider les résultats obtenus par l'outil de simulation SiGran, des simulations ont été effectuées sur des milieux granulaires identiques à ceux utilisés par Dias et al. (2005). Ces auteurs ont évalué expérimentalement la porosité, la perméabilité et a déduit la tortuosité de milieux granulaires constitués de billes de trois diamètres différents et sont $d_C = 2 \pm 0.2$ mm, $d_M = 0.75$ à 1 mm (moyenne = 0.875 mm) et $d_F = 0.1$ à 0.2 mm (moyenne de 0.150 mm). D'autres mélanges ont été étudiés par ces auteurs, mais ne seront pas traités dans cet article.

La formule développée par ces auteurs pour l'estimation de la porosité est :

$$\epsilon = exp(2,0989X_{C+M}^{2'(\sqrt[4]{\delta_{MC}}\,\delta_{FC}})\epsilon_F^0 \frac{1-X_{C+M}}{1-X_{C+M}\,\epsilon_F^0}$$
 [14]

 $\varepsilon_{\scriptscriptstyle F}^{\scriptscriptstyle 0}$: Porosité de la fraction fine et X _{C+M}: Fraction volumique des particules grossières (C) et moyennes (M). La valeur de $\varepsilon_{\scriptscriptstyle F}^{\scriptscriptstyle 0}$, dans ce cas, est de 0,371.

 $\delta_{C}^{M} e t \delta_{C}^{F} = d_{M} / d_{C} \ e t \ d_{F} / d_{C}, respectivement.$

La perméabilité est calculée comme suit:

$$k = \frac{\epsilon d_{av}^2}{36K_0(1-\epsilon)^2} \left(\frac{\epsilon}{T}\right)^2$$
 [15]

avec: Ko =2 et
$$d_{av} = \left[\frac{1 - X_{C+M}}{d_F} + \left(\frac{0.3}{d_M} + \frac{0.7}{d_C}\right)X_{C+M}\right]^{-1}$$

La tortuosité est calculée comme suit:

$$T = \frac{1}{\epsilon^n}$$
 [16]

La valeur de n est définie par l'expression suivante:

$$n = 0.5 + aX_{C+M} - bX_{C+M}^2 + cX_{C+M}^3$$

Avec : a = -0.23, b = 0.83 et c = 1.29 II est à noter que les valeurs des coefficients a, b et c proposées par Dias et al. (2005), soient a = 0.153, b = 1.13 et c = 1.625, ont été modifiées pour qu'elles puissent correspondre aux données expérimentales obtenues par ces auteurs.

Les figures 4 et 5 montrent l'évolution de la porosité et de la perméabilité pour le milieu granulaire retenu, respectivement. La figure 6 montre, quant à elle, la tortuosité moyenne en fonction de la fraction volumique X_{C+M} obtenue par les simulations, comparée à celle obtenue expérimentalement par Dias et al. (2005).

La figure 5 montre que la porosité obtenue à l'aide de l'outil de simulation SiGran est proche de celle obtenue par Dias et al. (2005) en utilisant l'expression 14. La différence entre les courbes peut être due au fait que les particules sphériques utilisées par ces auteurs ne sont pas parfaitement sphériques alors que celles générées virtuellement le sont. Aussi, cette figure montre qu'au-delà de $X_{C+M=0}$,6, il n'est plus possible d'évaluer la porosité, car l'échantillon ne peut être formé. En effet, le nombre de petites particules n'est pas assez élevé pour combler le vide dans la partie supérieure du moule, comme le montre la figure 7. Cette figure montre le cas ou $X_{C+M} = 0,73$ ($X_C = 49\%$ $X_M = 24\%$ et $X_F = 20\%$). Selon Dias et al. (2004) ce mélange est qualifié de complexe non homogène.

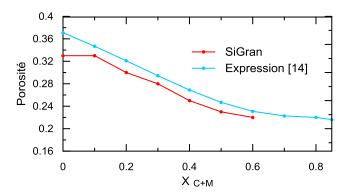


Figure 4. Porosité en fonction de la fonction de X_{C+M}

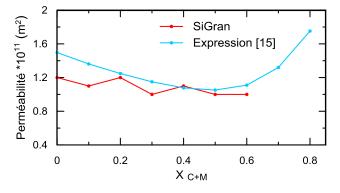


Figure 5. Perméabilité en fonction de la fonction de X_{C+M}

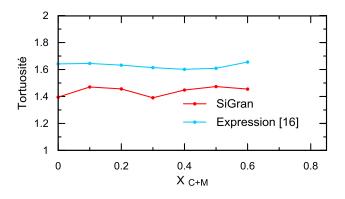


Figure 6. Tortuosité moyenne en fonction de X_{C+M}

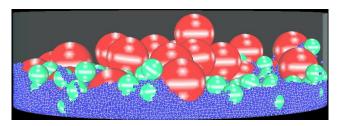


Figure 7. Mélange de particules avec $X_{C+M} = 0.73$ ($X_C = 49\% X_M = 24\%$ et $X_F = 20\%$).

5. ÉTUDE D'UN MILIEU GRANULAIRE POLYDISPERSE

La courbe granulométrique du milieu granulaire polydisperse, constitué de 10000 particules, est présentée à la figure 8. La hauteur initiale et le diamètre de l'échantillon sont de 16,75 mm et 25 mm, respectivement. Ce milieu a été généré dans un état lâche et ensuite densifié par vibration. L'échantillon a été subdivisé en 20 sections de hauteur égale comme le montre la figure 9 afin d'évaluer l'indice des vides le long de la hauteur de l'échantillon.

Pour assurer la densification totale de l'échantillon, la hauteur échantillon est calculée à intervalles de temps régulier au cours de la vibration. La figure 10 montre l'évolution de la hauteur de l'échantillon en fonction du temps de vibration. Cette figure montre que la hauteur de l'échantillon décroît au cours du processus de vibration et se stabilise au bout de 10 secondes.

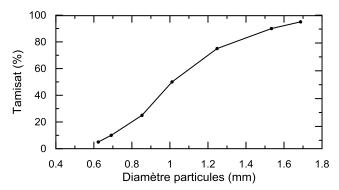


Figure 8. Courbe granulométrique

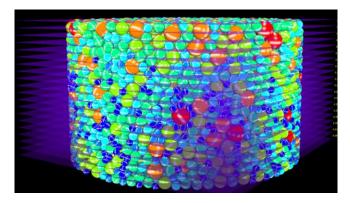


Figure 9. Vue de l'échantillon généré (e_{min}). La couleur traduit la taille des particules.

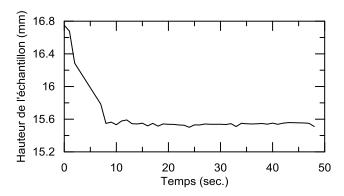


Figure 10. Évolution de la hauteur de l'échantillon pendant le processus de vibration

La porosité à l'état lâche et l'état dense, le long de la hauteur de l'échantillon, sont montrés à la figure 11. Cette figure montre l'influence des vides aux extrémités de l'échantillon. Les résultats des simulations sont présentés au tableau 1. Le gradient de pression est égal à 4 Pa. Ce tableau présente les valeurs de la tortuosité moyenne avec et sans les lignes de courant à proximité de la frontière latérale de l'échantillon.

L'outil SiGran permet de rendre translucides les particules (Figure 12), ce qui permet de disposer d'une vue sur l'ensemble des lignes de courant lorsque l'échantillon est dans un état dense. Cette figure montre aussi que les vitesses le long des lignes de courant peuvent être visualisées. La figure 13(a) montre, quant à elle, uniquement les lignes de courant qui passent par le centre de l'échantillon. La figure 13(b) en montre une vue du plan transversal des lignes de courant. Aussi, il est possible d'extraire les vitesses le long des lignes de courant comme le montre la figure 14.

La distribution des tortuosités est présentée à la figure 15. Cette figure montre qu'il n'existe qu'une très faible variation de la valeur de la tortuosité lorsqu'on supprime les lignes de courant à proximité de la frontière latérale de l'échantillon. Ce résultat confirme que le VER adopté représente le milieu granulaire étudié. Le nombre de lignes de courant supprimé est égal à 2403 et 3045 pour e_{max} et e_{min}, ce qui représente 7,6 et 9,7%, respectivement.

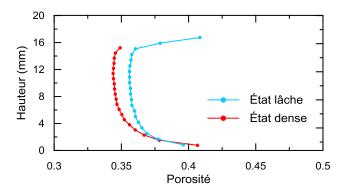


Figure 11. Variation de l'indice des vides le long de la hauteur de l'échantillon

Tableau 1. Résultats obtenus des simulations

	État lâche	État dense
Hauteur de l'échantillon (mm)	16,75	15,5
Porosité (Indice des vides)	0,41 (0,69)	0,35 (0,54)
Nombre total de lignes de courant	31417	31411
Nombre de lignes de courant excluant celles à proximité de la frontière latérale	29008	28372
Tortuosité moyenne de toutes les lignes de courant	1,176	1,218
Tortuosité moyenne en excluant les lignes de courant à proximité de la frontière latérale	1,179	1,221

L'outil SiGran peut aussi extraire l'ensemble du champ de pression sur n'importe quel plan, qu'il soit vertical ou horizontal comme le montre la figure 16. Afin de s'assurer de recueillir des valeurs précises des pressions dans les pores, les dimensions d'un voxel retenues dans la présente étude sont 0,125 mm de côté. Le nombre de voxels est égal à 3893600.

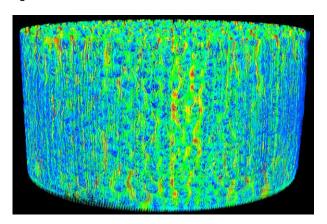


Figure 12. L'ensemble des lignes de courant qui traversent l'échantillon

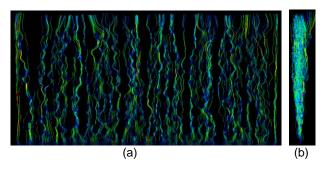


Figure 13. Vue des lignes de courant

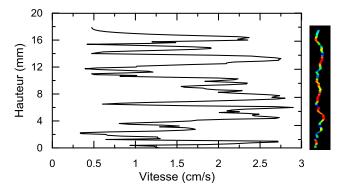


Figure 14. Vitesses le long d'une ligne de courant

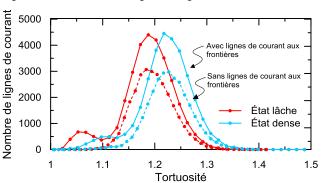


Figure 15. Distribution des tortuosités

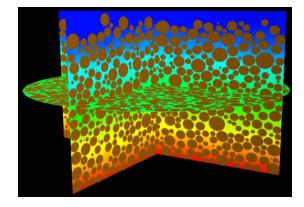


Figure 16. Vue des pressions dans les pores sur les plans YX, YZ et XZ

CONCLUSION

L'outil de simulation SiGran, développé à l'Institut de Recherche d'Hydro-Québec (IREQ), a pour but de mimer la réalité complexe du comportement macroscopique des milieux granulaires qui trouve son origine à l'échelle des grains et des pores au sein desquels la présence d'une phase fluide peut être considérée. Cet article présente l'étude de milieux granulaires constitués de mélanges ternaires qui ont permis de valider l'outil de simulation SiGran. Un autre milieu granulaire polydisperse a été étudié et les tortuosités ont été calculées. Cette approche multi-échelle a donc pour principe l'établissement de liens entre le comportement macroscopique et les différentes structures d'écoulement mis en jeu à l'échelle microscopique (échelle du pore et de la particule). Il est à noter que la réalité micro des structures granulaires est absente dans les approches phénoménologiques. C'est donc là l'émergence d'une nouvelle approche orientée par le développement de la micromécanique et des mécanismes d'écoulements dans les milieux granulaires qui permet de déduire directement un comportement macro sans être lié au choix de la forme mathématique de la loi de comportement. L'outil SiGran permet, d'une part, une analyse quantitative de l'influence des divers paramètres, telle que la tortuosité, et d'autre part, l'accessibilité à des données pratiquement inaccessibles autrement.

RÉFÉRENCES

- Bertrand, F., Leclaire, L. A. et Levecque, G. 2005. DEM-Based Models for the Mixing of Granular Materials. Chemical Engineering Science, 60(8-9). 2517-2531.
- Carman, P.C. 1937. Fluid Flow through Granular Beds. Transactions . Institution of Chemical. Eng. 15. 150–166.
- Chekired, M. et Roubtsova, V. 2010. 2-D Pore-Particle Scale Model of the Erosion at the Boundary of Two Soils Under the Horizontal Groundwater Flow. ICSE-5, 5th International Conferences on Scour and Erosion.
- Comiti, J. et Renaud, M. 1989 A New Model for Determining Mean Structure Parameters of Fixed Beds from Pressure Drop Measurements: Application to Beds Packed with Parallelepiped Particles, Chem. Eng. Sci., Vol. 44. 1539 - 1545.
- Dias, R., Mota, M., Teixeira, J. A. et Yelshin, A. 2005. Study of ternary Glass Spherical Particle Beds: Porosity, Tortuosity and Permeability. Filtration, 5(1). 68 75.
- Dias, R., Teixeira, J. A., Mota, M., et Yelshin, A. 2004. Particulate Binary Mixtures: Dependence of Packing

- Porosity on Particle Size Ratio. Ind. Eng. Chem. Res. 43, 7912–7919.
- Duda, A, Koza, Z. et Matyka, M. 2011. Hydraulic Tortuosity in Arbitrary Porous Media Flow. Phys. Rev. E, 84:036319.
- Dullien, F. A. L. 1979. Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure. Academic Press, New York.
- Freytag, I. et Roque, W.L. 2013. Influence of Granular Packing on Porosity and Tortuosity. Physical Review Series E 88, 2; 02301-1 02301-6.
- Harlow F. H. et Welch J. E. 1965. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with a Free Surface. *The Physics of Fluids*, vol. 8. 2182-2189.
- Iversen N. et Jørgensen B. B. 1993. Diffusion Coefficients of Sulfate and Methane in Marine Sediments: Influence of Porosity. Geochimica et Cosmochimica. 57, 571
- Kalthoff W., Schawarzer S. et Herrmann H. J. (1997) Algorithm for the simulation of particle suspension with inertia effects. Physical Review E 56. 2234-2242.
- Koponen, A., Kataja, M., et Timonen, J. 1996. Tortuous Flow in Porous Media, Phys. Rev. E: Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat., Vol. 54. 406 - 410.
- Lemieux, A., Leonard, G., Doucet, J., Leclaire, L.A., Viens, F., Chaouki, J. et Bertrand, F. 2008. Large-Scale Numerical Investigation of Solids Mixing in a V-Blender Using the Discrete Element Method. Powder Tech. 181 (2) . 205-216.
- Matyka, M., Khalili, A. et Koza, Z. 2008. Tortuosity-Porosity Relation in Porous media Flow. Phys. Rev. E 78. 263061-8.
- Mindlin, R. D. et Deresiewicz, H. 1953. Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. ASME J. Appl. Mech. 20. 327-344.
- Roubtsova, V., Chekired, M., Morin, B. et Karray, M. 2011. 3D Virtual Laboratory for Geotechnical Applications: An other perspective. Particles 2011, II Inter. Conf.on Particle-based Methods Fundamentals and Applications, Barcelona, Spain.
- Roubtsova, V., Chekired, M., Karray, M. et Amirpour, S. 2015. Work-energy Balance for Discrete Element Method Using Shear Stress Tests. CMN2015, Congress on Mumerical Methods in Engineering, Lisbon, Portugal, 29 june-2 July (accepted for publication).
- Weissberg, H. L. 1963. Effective Diffusion Coefficient in Porous Media. J. Appl. Phys., Vol. 34. 2636 2639.
- Yun, M., Yu, B., Xu, P. et Wu, J. 2006. Geometrical Models for Tortuosity of Streamlines in Three-Dimensional Porous Media. The Canadian Journal of Chemical Eng. Vol. 84, Issue 3. 301-309.