

# Couplage domaines fictifs / éléments discrets appliqué à la simulation d'une suspension dense de grains polyédriques

## Contexte :

Le travail de thèse proposé s'inscrit dans le cadre général de la simulation numérique de l'écoulement en conduite à faible nombre de Reynolds d'un assemblage dense de particules non-colloïdales en suspension dans un fluide. Ce domaine de recherche possède une large portée applicative intéressant directement la ville durable, en particulier les problématiques de blocage d'écoulement pouvant conduire au débordement des réseaux d'eaux pluviales ou usées (aggravées par le changement climatique), ou les problèmes de blocage des systèmes de pompage de matériaux de construction. Pour simuler de tels écoulements, il est nécessaire de prendre en compte le couplage fluide-grains, le mouvement des grains obéissant aux lois de Newton et celui du fluide étant régi par les lois de conservation de la mécanique des milieux continus (équations de Navier-Stokes pour un fluide newtonien). Les principales difficultés sont alors liées au calcul des forces d'interaction entre fluide et grains, mais aussi entre grains en contact. Ces difficultés sont encore accrues en présence de particules non sphériques, très courantes dans les applications citées, la forme des particules jouant un rôle significatif dans le comportement des écoulements et devant donc être prise en compte.

Du point de vue méthodologique, différentes approches numériques existent pour résoudre le couplage fluide-grains (par exemple : dynamique stokesienne [1], couplage CFD/DEM [2], couplage LBM/DEM [3]). Elles sont souvent limitées par les coûts de calcul, notamment liés au traitement de la diversité des échelles de temps des phénomènes mais aussi à l'intégration d'une rhéologie non-newtonienne pour le fluide suspendant, ce qui constitue en soi un domaine de recherche actif. En outre, les méthodes couplant DEM et mécanique des fluides s'appuient sur des codes DEM capables de bien simuler l'écoulement d'un assemblage dense de grains secs, cependant ces codes sont très majoritairement dédiés aux assemblages de sphères entre lesquelles la détection de contact est simple et rapide. Pour des grains non-sphériques, la caractérisation des contacts est un problème nettement plus coûteux et complexe qui constitue un autre domaine de recherche actif.

Le laboratoire GPEM a récemment mis au point un outil parallélisé de simulation DEM du comportement d'assemblages denses de grains polyédriques [4]. De même le laboratoire dispose d'un code CFD propriétaire de simulation numérique des écoulements de fluides viscoplastiques sous agitation complexe, par domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange (FDM/LM) distribués, mais aussi de bord. L'association de ces deux outils s'inscrit donc dans une perspective de recherche combinant deux, voire trois aspects cruciaux du sujet : forme des grains et gestion fine de la dynamique locale, voire rhéologie suspendante non-newtonienne. En outre, le laboratoire GPEM va poursuivre le développement du code LBM initié lors des stages de master2 d'A. Bisoulier (2021) et L. Chaillou (2023) et le coupler avec l'outil DEM, ce qui permettra à terme de confronter les approches mixtes CFD/DEM et LBM/DEM.

**Objectifs :**

En premier lieu, l'objectif directeur de la thèse réside dans le couplage des deux codes 3D du laboratoire, le code CFD et le code DEM, en cherchant un compromis entre précision et durée des calculs. Dans le procédé de couplage, le code DEM transmet au code CFD les forces de contact entre polyèdres, tandis que le code CFD fournit au code DEM la mise à jour de la position et de l'orientation des grains en suspension. Ensuite, le code final sera mis en œuvre pour simuler l'écoulement à faible nombre de Reynolds d'une suspension dense dans des configurations élémentaires de réseau de conduite (typiquement : formes en "L", en "T" ou en "+"), pour lesquelles le comportement de l'écoulement n'est pas connu, avec en perspective des stratégies de résolution dans des géométries réalistes de réseaux complexes. Une attention particulière sera portée à l'influence de la forme des grains. Enfin, les résultats d'une ou plusieurs configurations élémentaires précédentes seront confrontés avec ceux des premières simulations réalisées à l'aide du couplage LBM/DEM développé par le laboratoire.

**Verrous :**

- Précision des calculs des forces fluide/grain et entre grains
- Durée des calculs du fait du nombre élevé de particules (1cm<sup>3</sup> peut contenir 10<sup>6</sup> grains de diamètre 0,1mm), difficulté accrue par le caractère non-sphérique des grains
- Stratégie unifiée de discrétisation temporelle intégrant des échelles de temps différentes entre fluide et grains avec des variations locales

**Principales étapes :**

- Étude bibliographique : couplage fluide/grain, résultats numériques ou expérimentaux instrumentés (RMN,...), techniques d'accélération des calculs
- Prise en main et couplage des deux codes maison
- Tests en conduite droite avec 1 seul puis 2 grains proches - benchmarking avec résultats expérimentaux et numériques de la littérature
- Simulations en conduites droites et annulaires pour une suspension dense - benchmarking avec résultats expérimentaux et numériques de la littérature
- Simulation d'écoulements denses dans des motifs élémentaires de réseaux par l'approche CFD/DEM
- Confrontation avec l'approche LBM/DEM en cours de développement au laboratoire, pour palier l'absence de littérature traitant de la simulation de ces configurations

**Originalité du sujet :**

- Grains polyédriques non nécessairement convexes en suspension dans un fluide newtonien ou non
- Analyse de l'écoulement de telles suspensions dans des motifs élémentaires de réseau de conduites

**Profil de candidature :**

Les candidatures attendues devront faire la preuve des éléments suivants autour de la mécanique, des mathématiques appliquées et de l'informatique scientifique :

- Master 2 avec formation en modélisation numérique discrète ou continue
- expérience en programmation scientifique
- large curiosité scientifique et intérêt prononcé pour la rhéologie des suspensions

Seront, en outre, particulièrement appréciées des connaissances dans les domaines suivants :

- mécanique des milieux continus, rhéologie
- méthodes numériques pour la mécanique des fluides et la mécanique non-régulière
- Fortran moderne (Normes 2008 et suivantes)

Une excellente capacité rédactionnelle, notamment en Anglais, est également attendue.

**Références bibliographiques :**

- [1] J. F. Brady and G. Bossis, "Stokesian dynamics," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 20, no. 1, pp. 111–157, 1988.
- [2] C. Selcuk, A. Ghigo, S. Popinet, and A. Wachs, "A fictitious domain method with distributed lagrange multipliers on adaptive quad/octrees for the direct numerical simulation of particle-laden flows," *Journal of Computational Physics*, vol. 430, 10 2020.
- [3] N. J. Di Vaira, L. Laniewski-Wollk, R. L. Johnson Jr., S. M. Aminossadati, and C. R. Leonardi, "Influence of particle polydispersity on bulk migration and size segregation in channel flows," *J. Fluid Mech.*, vol. 939, p. A30, 2022.
- [4] Y. Descantes, "A new discrete element modelling approach to simulate the behaviour of dense assemblies of true polyhedra," *Powder Technology*, vol. 401, p. 117295, 2022.