

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 9 |
| 1 Modélisation et simulation d'écoulements de fluides complexes : état de l'art | 15 |
| 1.1 Les suspensions- généralités | 15 |
| 1.1.1 Classification des suspensions | 15 |
| 1.1.1.1 Les suspensions molles | 15 |
| 1.1.1.2 Les suspensions dures | 16 |
| 1.1.2 Description des suspensions | 16 |
| 1.1.2.1 Concentration solide ϕ | 16 |
| 1.1.2.2 Granulométrie | 16 |
| 1.1.2.3 Configuration | 17 |
| 1.1.2.4 Interactions au sein de la suspension | 17 |
| 1.1.3 Les interactions hydrodynamiques | 17 |
| 1.1.4 Les autres interactions interparticulaires | 18 |
| 1.1.4.1 Interactions colloïdales | 18 |
| 1.1.4.2 Interactions répulsives à courtes portées entre particules | 18 |
| 1.2 Modélisation du comportement des suspensions molles | 19 |
| 1.2.1 Comportement multi-échelle et homogénéisation | 19 |
| 1.2.2 Construction du tenseur des contraintes particulières | 19 |
| 1.2.2.1 Homogénéisation temporelle | 20 |
| 1.2.2.2 Homogénéisation spatiale | 20 |
| 1.3 Loi de comportement pour les suspensions modèles | 22 |
| 1.3.1 Les suspensions de sphères | 23 |
| 1.3.1.1 Régime dilué : le modèle d'Einstein | 23 |
| 1.3.1.2 Régime semi-dilué : les modèles de Batchelor | 23 |
| 1.3.1.3 Vers les régimes concentrés : formule de Krieger et Dougherty | 23 |
| 1.3.1.4 Approche empirique pour les grandes concentrations | 25 |
| 1.3.1.5 Phénomène de migration de particules dans les suspensions de sphères concentrées | 26 |
| 1.3.2 Les suspensions de fibres | 27 |
| 1.3.2.1 Description microscopique de l'orientation | 28 |
| 1.3.2.2 Description macroscopique de l'orientation | 29 |
| 1.3.2.3 Comportement des suspensions de fibres | 32 |
| 1.3.2.4 Limites des modèles de suspensions de fibres | 32 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1.3.3 | Les suspensions complexes | 33 |
| 1.3.3.1 | Mélanges polydispersés de sphères | 34 |
| 1.3.3.2 | Mélange de fibres de différents rapports de forme | 34 |
| 1.3.3.3 | Mélanges de fibres et de sphères | 35 |
| 1.4 | Simulation d'écoulements de suspensions dans la littérature | 36 |
| 1.4.1 | La simulation prédictive à l'échelle macroscopique | 36 |
| 1.4.2 | La simulation investigative à l'échelle microscopique | 37 |
| 1.4.2.1 | Méthodes sans couplage | 37 |
| 1.4.2.2 | Méthodes avec couplage faible | 37 |
| 1.4.2.3 | Méthodes avec couplage fort | 38 |
| 1.4.2.4 | Simulations de fibres flexibles | 40 |
| 1.5 | Bilan de l'étude bibliographique | 40 |
| 2 | Evolution d'une particule solide dans une matrice fluide | 43 |
| 2.1 | Introduction | 43 |
| 2.2 | Les équations mécaniques | 43 |
| 2.2.1 | La matrice fluide | 44 |
| 2.2.2 | La particule solide | 45 |
| 2.2.3 | Conditions aux limites | 45 |
| 2.3 | Forme variationnelle et discrétisation | 45 |
| 2.3.1 | Forme variationnelle en (\vec{u}, p) sur le domaine fluide Ω_f | 47 |
| 2.3.2 | Extension des équations au domaine total Ω | 48 |
| 2.3.2.1 | Extension des champs (\vec{u}, p) au domaine solide | 48 |
| 2.3.2.2 | Extension des intégrales à Ω | 48 |
| 2.3.2.3 | Le terme à l'interface $\partial\Omega_s$ | 53 |
| 2.3.2.4 | Forme variationnelle sur $\mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$ | 53 |
| 2.3.3 | Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda}, \vec{U}, \vec{w})$ sur Ω | 54 |
| 2.3.4 | Forme variationnelle en $\{\vec{u}, p, \vec{\lambda}\}$ sur Ω | 55 |
| 2.3.4.1 | Contrainte d'indéformabilité de Ω_s | 56 |
| 2.3.4.2 | Formulation forte continue équivalente pour un corps solide | 56 |
| 2.3.4.3 | Formulation faible continue équivalente | 56 |
| 2.3.5 | Forme variationnelle en (\vec{u}, p) sur Ω | 58 |
| 2.3.5.1 | Méthode de pénalisation du lagrangien | 58 |
| 2.3.5.2 | Calcul du multiplicateur de Lagrange $\vec{\lambda}$ par un algorithme d'Uzawa | 59 |
| 2.3.5.3 | Méthode de lagrangien augmenté | 59 |
| 2.3.6 | Discrétisation du problème en (\vec{u}, p) sur Ω | 60 |
| 2.4 | Description et transport de la phase solide | 61 |
| 2.4.1 | Méthode de level-set pour la définition du domaine solide | 61 |
| 2.4.1.1 | Définition de la fonction "level set" | 62 |
| 2.4.1.2 | Sphère | 62 |
| 2.4.1.3 | Cylindre de révolution | 62 |
| 2.4.1.4 | Ellipsoïde | 63 |
| 2.4.1.5 | Calcul de la fonction caractéristique $\mathbb{I}_{\Omega_s}(t^n)$ | 64 |
| 2.4.2 | Le transport de la fonction distance signée α_s | 65 |
| 2.4.2.1 | Méthode de transport particulaire explicite | 66 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.4.2.2 | Schéma implicite pour le déplacement des particules . . . | 67 |
| 2.4.2.3 | Relocalisation périodique | 70 |
| 2.5 | Description générale de la méthode de calcul : résumé | 72 |
| 2.6 | Validations et premiers résultats numériques | 73 |
| 2.6.1 | Un sphère dans un champ de cisaillement | 73 |
| 2.6.1.1 | Influence du maillage et du facteur de pénalisation | 75 |
| 2.6.1.2 | Etude de la rotation d'une sphère dans un écoulement de Couette | 78 |
| 2.6.2 | Un particule allongée dans un champ de cisaillement | 78 |
| 2.6.2.1 | La solution de l'équation de Jeffery | 78 |
| 2.6.2.2 | Rotation d'un ellipsoïde dans un écoulement de Couette | 80 |
| 2.6.2.3 | Rotation d'un bâtonnet dans un écoulement de Couette | 80 |
| 2.7 | Conclusion | 87 |
| 3 | Evolution d'un ensemble de particules solides dans une matrice fluide | 89 |
| 3.1 | Introduction | 89 |
| 3.2 | Interactions particulières | 89 |
| 3.2.1 | Interactions hydrodynamiques et non-hydrodynamiques | 89 |
| 3.2.2 | Régime d'écoulement théorique et numérique | 90 |
| 3.2.3 | Expressions des forces interparticulaires | 92 |
| 3.2.3.1 | Forces entre sphères | 92 |
| 3.2.3.2 | Forces entre fibres | 93 |
| 3.2.3.3 | Force entre fibre et sphère | 95 |
| 3.3 | Equations mécaniques et formulations variationnelles | 95 |
| 3.3.1 | Prise en compte des forces d'interactions | 96 |
| 3.3.2 | Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda}, \vec{U}, \vec{\omega})$ sur Ω | 97 |
| 3.3.3 | Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda})$ sur Ω | 97 |
| 3.3.4 | Calcul de la force non hydrodynamique continue | 99 |
| 3.3.5 | La matrice d'inertie | 100 |
| 3.4 | Description et transport de la phase solide à N particules | 102 |
| 3.4.1 | La fonction level-set pour N particules | 102 |
| 3.4.2 | Gestion des collisions entre particules | 102 |
| 3.4.2.1 | Méthode par modification du champ de vitesse | 103 |
| 3.4.2.2 | Méthode par modification des forces | 104 |
| 3.4.3 | Raffinement de maillage et h -adaptation | 105 |
| 3.5 | Générateurs de positions et orientations de particules | 107 |
| 3.5.1 | Ajustement de paramètres | 108 |
| 3.5.1.1 | Cas général | 108 |
| 3.5.1.2 | Arrangement ordonné | 109 |
| 3.5.2 | Génération de réseau | 109 |
| 3.5.3 | Positionnement initial | 110 |
| 3.5.4 | Perturbation du positionnement initial | 110 |
| 3.5.5 | Algorithme de correction des positions | 110 |
| 3.6 | Premiers résultats numériques et expérimentaux | 113 |
| 3.6.1 | Interactions de deux sphères dans un écoulement de Couette | 113 |
| 3.6.2 | Calcul 2D pour une suspension fibre-sphères | 113 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.6.3 | Calcul 3D pour une suspension fibre-sphères | 114 |
| 3.6.4 | Observations experimentales d' une suspension fibre-sphères | 117 |
| 3.6.4.1 | Dispositif expérimental | 117 |
| 3.6.4.2 | Les mesures effectuées | 119 |
| 3.6.4.3 | Analyse des résultats | 120 |
| 3.7 | Conclusion | 122 |
| 4 | Rhéologie numérique | 125 |
| 4.1 | Introduction | 125 |
| 4.2 | Volume représentatif et effets de bords | 125 |
| 4.2.1 | Approche par fenêtrage | 126 |
| 4.2.1.1 | Intérêt du fenêtrage | 127 |
| 4.2.1.2 | Limites de l'approche | 127 |
| 4.2.2 | Approche par champ périodique | 128 |
| 4.2.2.1 | Conditions limites périodiques | 128 |
| 4.2.2.2 | Conditions limites bipériodiques de Lee-Edwards | 130 |
| 4.2.2.3 | Le problème du parallélisme et le passage au 3D | 131 |
| 4.2.3 | Approche mixte | 132 |
| 4.3 | Homogénéisation numérique | 134 |
| 4.3.1 | Définitions | 134 |
| 4.3.1.1 | Les champs continus | 134 |
| 4.3.1.2 | Les champs discrets | 134 |
| 4.3.2 | Loi de comportement construite par homogénéisation | 135 |
| 4.4 | Suspension de sphères | 135 |
| 4.4.1 | Influence du maillage | 136 |
| 4.4.2 | Evolution de la viscosité effective au cours du temps | 136 |
| 4.4.3 | Etude en concentration | 138 |
| 4.5 | Suspension de fibres | 140 |
| 4.5.1 | Suspension de fibres initialement orientées | 140 |
| 4.5.1.1 | Evolution du tenseur d'orientation d'ordre 2 | 140 |
| 4.5.1.2 | Relations de fermeture | 140 |
| 4.5.1.3 | Evolution de l'orientation : les limites du modèle de Folgar et Tucker | 141 |
| 4.5.1.4 | Loi de comportement | 145 |
| 4.5.2 | Suspension de fibres sans orientation initiale | 148 |
| 4.5.2.1 | Evolution du tenseur d'orientation d'ordre 2 | 148 |
| 4.5.2.2 | Relation de fermeture | 148 |
| 4.5.2.3 | Evolution de l'orientation | 148 |
| 4.5.2.4 | Loi de comportement | 152 |
| 4.5.3 | Influence du rapport de forme à concentration fixée | 153 |
| 4.5.4 | Suspensions de fibres et de sphères | 155 |
| 4.6 | Conclusion | 158 |
| 5 | Conclusions et perspectives | 161 |
| 5.1 | Amélioration de l'outil de rhéologie numérique | 162 |
| 5.2 | Les simulations à l'échelle microscopiques ou mésoscopiques | 163 |

TABLE DES MATIÈRES

7

A Rappels d'analyse fonctionnelle et d'optimisation

177

Introduction

Qui, de nos jours, n'a jamais entendu parler de matériaux composites? Quiconque s'intéresse de près ou de loin aux propriétés de la matière, d'un point de vue très théorique ou au contraire très appliqué, a tôt ou tard eu à faire aux composites. Pour ceux qui n'ont jamais entendu ce mot là qu'ils se rassurent : il est quasiment certain qu'un objet en composite se trouve à moins d'un mètre d'eux !

La définition donnée par l'encyclopédie en ligne Wikipédia[©] (première page sur les dix-huit millions de liens proposés par le moteur de recherche google[©] pour le mot "composite" !) est la suivante : *le matériau composite est l'assemblage d'au moins deux matériaux non miscibles (mais ayant une forte capacité d'adhésion). Le nouveau matériau ainsi constitué possède des propriétés que les éléments seuls ne possèdent pas. Ce phénomène, qui permet d'améliorer la qualité de la matière face à une certaine utilisation (légèreté, rigidité à un effort, etc), explique l'utilisation croissante des matériaux composites, dans différents secteurs industriels. Néanmoins, la description fine des composites reste complexe du point de vue mécanique..* Cette dernière phrase justifie à elle seule l'engouement de la communauté scientifique pour les composites ! Le bois et le torchis furent les premiers composites naturels à être utilisés. Aujourd'hui ils sont omniprésents dans l'industrie, sous forme de bétons armés, de placoplâtre et de plastiques renforcés de fibres de verre. Le travail présenté ici porte sur cette dernière catégorie de composite, et plus précisément sur leur comportement en moulage par injection.

Schématiquement, le procédé de fabrication d'une pièce moulée par injection de composite peut être découpé en deux étapes distinctes :

- la phase de remplissage : le matériau composite, à l'état liquide, est injecté dans le moule.
- la phase de solidification : le matériau composite passe de l'état liquide à l'état solide à l'intérieur du moule.

Le procédé de moulage par injection, et le déroulement des deux phases, sont fortement liés à la température. Lorsque la matrice fluide est un thermoplastique, le changement d'état est réversible. On injecte le composite chaud (donc à l'état liquide) dans le moule. En refroidissant l'ensemble, le thermoplastique revient alors à l'état solide. Lorsqu'il s'agit de résines thermodurcissables, le changement d'état est dû à une réaction chimique : la résine thermodurcissable, à faible température, est à l'état liquide, formée de monomères. Injectée dans le moule chaud, les monomères vont réticuler en une molécule de polymère plus rigide : c'est la phase de polymérisation, qui est irréversible.

La conception des moules est une étape délicate et coûteuse. Il faut en effet s'assurer que le moule puisse être complètement rempli avant la phase de solidification. Par ailleurs,

il faut que la pièce finale ait des propriétés mécaniques et thermiques suffisamment bonnes. Les propriétés thermiques sont généralement liées à celles de la résine plastique. Garantir une résistance mécanique à diverses sollicitations est plus compliqué : ces propriétés vont être directement liées à la microstructure du composite, et plus particulièrement à la quantité et l'orientation des fibres de renfort.

En général, la spécificité de chaque secteur industriel impose d'autres critères de qualité. Dans le secteur des équipements et composants électriques, auquel appartient Schneider Electric, qui a financé ce travail de recherche, des matériaux isolants et ignifugeants sont requis. Les composites sont généralement utilisés pour fabriquer des boîtiers de systèmes électromécaniques complexes, qui sont souvent le siège de phénomènes d'arcs électriques. Ces arcs peuvent accidentellement provoquer des départs d'incendie, et le boîtier doit empêcher la propagation du feu. Une méthode efficace consiste à rajouter de l'alumine tri-hydratée dans le composite. Cette molécule libère des molécules d'eau en cas d'élévation de température et permet ainsi l'extinction du feu. D'autres charges solides (nous entendons par charge solide tout type de particule solide présent dans le composite, autre que les fibres de renfort) peuvent être utilisées ; la formulation générale du composite dépendant de son utilisation. Du carbonate de calcium est souvent rajouté en grande quantité pour réduire le coût de revient du composite. Des agents anti-retraits, des charges ayant des propriétés magnétiques particulières, etc peuvent aussi être rajoutés.

Pour bien appréhender le procédé d'injection de tels matériaux, une bonne modélisation du comportement des composites à l'échelle du procédé (ou échelle macroscopique) est donc impérative. Ce comportement macroscopique est directement lié à la structure du composite à l'échelle des particules (ou échelle microscopique). Des travaux de recherches en modélisation et simulation sont menés à ces deux échelles :

- à l'échelle macroscopique : la simulation est devenue aujourd'hui un outil indispensable au mouliste. Elle lui permet de prédire les faiblesses d'une pièce moulée. Cette simulation permet alors une correction de la géométrie du moule, avant même de l'avoir fabriqué. Ce qui se traduit par un gain considérable en temps (la création d'un moule pouvant prendre plusieurs mois) et en argent. La simulation à l'échelle macroscopique a recours à des techniques numériques avancées. Les géométries à discrétiser (ou mailler) sont généralement complexes et nécessitent l'utilisation de mailleur performant. Le calcul de l'écoulement se fait à l'aide de méthodes numériques élaborées et robustes, comme les éléments finis, avec suivi du front de matière. De plus, les calculs à effectuer impliquent un grand nombre d'inconnues et le recours au calcul distribué est généralement indispensable. Les codes de simulation développés au Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF), et plus particulièrement le logiciel Rem3D[®], développé principalement au sein du groupe CIM (Calcul Intensif en Matériaux), ont recours à ces techniques de pointe. Ce qui fait leur succès auprès des centres de Recherche et Développement des entreprises partenaires.
- à l'échelle microscopique : si c'est la simulation du procédé qui intéresse surtout le mouliste, la simulation à l'échelle microscopique est tout aussi importante. En effet,

la pertinence d'une simulation d'un remplissage un moule dépend avant tout de la qualité du modèle de comportement utilisé pour décrire l'écoulement du composite. La simulation numérique à l'échelle microscopique permet d'améliorer la description du comportement proposée par les modèles théoriques. Il s'agit alors de construire par homogénéisation une loi de comportement macroscopique en moyennant le comportement du fluide et des particules dans un volume élémentaire mésoscopique : c'est l'échelle intermédiaire entre les pièces injectées et les particules. Ce volume élémentaire doit plus ou moins correspondre à la taille d'un élément du maillage de la pièce. Il va donc fortement dépendre de la géométrie du moule considéré. Deux types de méthodes numériques peuvent être rencontrées : les approches de dynamique moléculaire, privilégiant la dynamique des particules : on estime les efforts exercés par le fluide sur les particules de manière approchée, puis on étudie la dynamique des particules en résolvant un problème de dynamique à N corps. Ces approches privilégient la dynamique des particules au détriment du calcul de l'écoulement. Ce dernier est généralement estimé de manière approximative, pour calculer ensuite les efforts exercés sur le fluide. Avec l'évolution de la puissance des micro-ordinateurs, ces méthodes, peu coûteuses en temps de calcul, sont délaissées au profit des simulations numériques directes. En ayant recours à des techniques numériques avancées développées pour la simulation à l'échelle macroscopique, il est possible de simuler directement, et sans approximation, l'évolution couplée de la matrice fluide et des particules.

Le travail de thèse que j'ai effectué au CEMEF, sous la direction et l'encadrement de Patrice Laure et Thierry Coupez, est une contribution au développement d'un outil de simulation numérique directe pour décrire le comportement macroscopique de l'écoulement de composites. Cet outil, que nous avons appelé microrhéomètre numérique, devra à terme permettre la détermination précise des paramètres macroscopiques caractérisant l'écoulement de divers composites. Le modèle que nous avons retenu pour les composites est le suivant : une matrice fluide newtonienne, des fibres de renfort et d'autres charges solides. Les fibres sont modélisées par des bâtonnets, les charges par des sphères de divers rayons. Ce travail fait suite à la thèse d'Alexandra Megally, soutenue en juillet 2005 au CEMEF [Meg05]. Son travail a consisté à utiliser les outils numériques alors disponibles pour élaborer une première version du microrhéomètre. Mon travail a permis d'élaborer une seconde version plus complète et plus robuste.

Point de départ : la thèse d'A. Megally (2005)

L'outil de simulation numérique directe développé par Megally et Laure consiste à simuler l'évolution d'une population de particules et d'un fluide, dans une cellule de Couette périodique. Cette approche est basée sur une méthode de domaines fictifs. Ce qui revient plus ou moins à remplacer les particules par du fluide, et à étudier ainsi un problème fluide sur toute la cellule de Couette, qui est de géométrie simple. Le maillage du domaine et la gestion des conditions limites sont alors grandement simplifiés. En contre-partie, il est nécessaire de calculer une fonction caractéristique permettant de repérer le domaine solide dans la cellule. On doit également imposer un comportement de corps rigide au fluide occupant le domaine solide. En pratique, le problème d'évolution couplé fluide/particules

est remplacé par un problème de Stokes multi-domaines, avec une viscosité très grande dans le sous-domaine occupé par les particules. La fonction caractéristique est calculée par élément à l'aide d'une méthode de voxelisation. L'outil permettait d'étudier soit des suspensions de fibres, soit des suspensions de sphères.

Cette méthode a été validée sur des cas tests simples, comme la rotation d'une fibre dans un écoulement de cisaillement plan, ou l'interaction hydrodynamique entre deux sphères se rapprochant l'une de l'autre sous l'effet du cisaillement. A plus grande concentration, différents problèmes ont été rencontrés. La principale difficulté est la formation d'amas de particules, lors de simulations dynamiques. Ces amas n'ont pas de sens physique. Leur apparition est sûrement due à des erreurs commises dans le calcul du champ de vitesse et le déplacement des particules. Les sources d'erreurs sont nombreuses : approximation du domaine solide lors du calcul de la fonction caractéristique, approximation du comportement de corps rigide par un comportement très visqueux, pas de temps probablement trop grand, etc. Une fois formés, ces amas ont tendance à persister. Ce phénomène est lié à la méthode de domaines fictifs utilisée : si on impose à deux sous-domaines (correspondant à deux particules distinctes) d'être indéformables et qu'ils viennent à se chevaucher, alors ils ne forment plus qu'un seul et même corps indéformable. Ce phénomène limite naturellement la durée des simulations, et la pertinence des résultats obtenus. Néanmoins, une étude préliminaire a été menée par Megally et Laure pour évaluer par homogénéisation les paramètres macroscopiques caractérisant le comportement de suspensions de sphères ou de fibres. Ils ont retrouvé qualitativement les bonnes dépendances des différents paramètres par rapport à la concentration solide totale, au rapport de forme, etc. Cependant, les valeurs numériques obtenues sont plus grandes que les valeurs théoriques et expérimentales d'un ou deux ordres de grandeurs. Cette différence est la conséquence des erreurs énumérées précédemment. Mon travail a consisté à améliorer la méthode numérique.

Ce qui a été fait au cours de ma thèse :

Mon travail a consisté à améliorer les différents points sur lesquels l'outil exploratoire mis au point par Megally et Laure présentait quelques faiblesses :

1. la description de la microstructure : les nouvelles méthodes numériques développées au CEMEF ont été mises à contribution pour la nouvelle version du microrhéomètre. Tout d'abord nous avons généralisé la méthode numérique pour pouvoir travailler avec des suspensions mixtes de sphères et de fibres. Nous avons développé le code Genepop, pour générer automatiquement une population de particules mélangeant des fibres de diverses orientations et des sphères de divers rayons dans une cellule élémentaire. Ce programme est très utile à concentration importante, où il n'est plus possible de créer la microstructure manuellement. Nous avons ensuite modifié notre méthode de calcul de fonction caractéristique. La méthode de voxelisation a été remplacée par une méthode de level-set, plus efficace et plus précise, permettant un calcul de fonction caractéristique aux noeuds et non plus aux éléments. Enfin, nous avons utilisé la méthode de remaillage basée sur le calcul de la fonction level-set qui a été développée au CEMEF. Cette étape de remaillage permet de mieux décrire les interstices entre particules et réduit la taille globale du maillage.

2. le calcul du champ de vitesse sur domaine fictif : nous avons amélioré le calcul du champ de vitesse dans les particules pour, d'une part, empêcher ou du moins limiter la formation d'amas, et d'autre part, améliorer la précision des calculs de paramètres rhéologiques. La méthode utilisée précédemment revenait à pénaliser les déformations du domaine solide. Nous l'avons remplacée par une méthode plus précise de lagrangien augmenté. Pour prévenir la formation d'amas, nous avons rajouté des forces répulsives à courte portée entre particules, que nous prenons en compte dans le calcul du champ de vitesse fluide sous la forme d'un champ de force continu. La méthode développée est générale et permet de prendre en compte d'autres types de forces interparticulaires.

3. la gestion des amas existants : l'amélioration du calcul du champ de vitesse fictif a permis de limiter la formation d'amas mais pas de l'empêcher complètement. En effet, à très grande concentration, il faudrait utiliser un pas de temps extrêmement petit pour que les amas ne se forment plus. Pour limiter la durée totale des simulations, nous avons préféré mettre au point une méthode correctrice qui consiste à corriger la position des particules après leur déplacement pour s'assurer qu'il n'y ait plus de chevauchement.

4. le contrôle des effets de bords : au fur et à mesure de l'avancée de ces travaux, nous avons réalisé que les conditions limites utilisées avaient un rôle important à jouer, à la fois sur la formation des amas, et sur les calculs de paramètres rhéologiques. Dans l'approche initiale, les conditions limites sur le champ de vitesse correspondent à un écoulement de Couette classique, ce qui revient à considérer l'écoulement entre deux plaques rigides. La condition de périodicité porte uniquement sur le transport des particules : ce qui sort par un bord est réinjecté par l'autre. La seconde version du microrhéomètre a recours à une méthode de fenêtrage périodique, qui permet d'étendre la condition de périodicité au champ de vitesse. De plus, pour supprimer les effets de parois, nous avons implémenté des conditions multipériodiques en cisaillement : ce sont les conditions limites de Lee Edwards, utilisées en dynamique moléculaire et pour les milieux granulaires.

Cette thèse comporte quatre chapitres. Le premier chapitre présente une étude bibliographique sur les suspensions de fibres et de sphères, et sur leur comportement macroscopique.

Le deuxième chapitre est consacré à la méthode numérique utilisée dans nos simulations numériques directes. J'ai fait le choix de détailler la construction de la formulation variationnelle, en partant des formulations de référence dans la littérature. Le traitement de la phase solide et de son couplage avec le liquide ainsi que la gestion des conditions limites y est présenté.

Le troisième chapitre présente les résultats obtenus au cours des premières simulations, pour valider notre méthode numérique.

Le quatrième chapitre est une application aux suspensions concentrées de sphères et de fibres. La méthode de calcul des paramètres rhéologiques y est présentée, ainsi que les résultats obtenus.

La méthode numérique présentée aux chapitres deux et trois s'appuie sur un certain nombre de résultats, bien connus ou non, qu'il m'a semblé important de citer. Pour faciliter la lecture, j'ai choisi de mettre l'ensemble de ces résultats en annexe. L'annexe A rappelle les principaux résultats d'analyse fonctionnelle et d'optimisation dont nous avons eu besoin pour justifier notre formulation.

Une grande partie de la thèse a été consacrée à l'étude des conditions limites.

Chapitre 1

Modélisation et simulation d'écoulements de fluides complexes : état de l'art

Nous présentons ici une étude bibliographique sur les écoulements de fluides complexes, également appelés suspensions. Les suspensions sont des modèles pertinents pour les composites lors de leur injection dans les moules. Dans la première partie de ce chapitre, nous présenterons les suspensions de manière générale. Nous donnerons ensuite les principaux résultats présents dans la bibliographie concernant les suspensions de sphères ou de fibres puis les suspensions dites complexes : les mélanges de fibres et de sphères, avec une grande concentration en particules. Dans une seconde partie, nous nous intéresserons aux méthodes numériques existantes pour la simulation de tels écoulements. Au terme de cette étude nous dresserons un bilan sur l'avancement actuel dans la recherche portant sur la modélisation et la simulation des écoulements de suspensions.

1.1 Les suspensions- généralités

1.1.1 Classification des suspensions

De manière générale, nous désignons par suspension le mélange d'un liquide et de particules solides. On comprend aisément que le comportement d'un tel mélange va dépendre avant tout de la quantité relative de fluide et de particules. En l'absence de particule, nous avons à faire à un comportement fluide pur, bien décrit par les équations de la mécanique des fluides. A l'opposé, en l'absence de fluide, nous avons à faire à un milieu granulaire sec, décrit par la mécanique des solides. Entre ces deux extrêmes, Coussot et Ancey [AC99] proposent une découpe en deux grandes catégories de suspensions : les suspensions "molles" et les suspensions "dures".

1.1.1.1 Les suspensions molles

Les suspensions molles désignent les suspensions pour lesquelles le comportement fluide l'emporte sur le comportement solide. Ce sont naturellement les suspensions dont

la concentration en fluide est bien plus importante que la concentration en particules solides. Au niveau de la modélisation, on cherche à prendre en compte la présence de particules dans le comportement du fluide. Dans les équations, il s'agit de modifier la loi de comportement du fluide par ajout d'un terme supplémentaire : la contrainte particulaire. On reste donc dans un régime d'écoulement hydrodynamique.

1.1.1.2 Les suspensions dures

Contrairement aux suspensions molles, les suspensions dures sont gouvernées par la dynamique des particules, et plus particulièrement par les contacts, directs ou lubrifiés, entre particules. Dans ces suspensions, l'aspect particulaire est naturellement privilégié par rapport au fluide. En pratique, on se ramène à un problème discret à N corps solides. Les effets du fluide sont alors pris en compte dans ces équations sous la forme d'un torseur des efforts hydrodynamiques exercés sur les particules.

Les suspensions utilisées pour modéliser les écoulements de composites appartiennent pour la plupart à la catégorie des suspensions molles. Les composites les plus complexes se situent à la frontière des suspensions molles et dures : ce sont les plus difficiles à modéliser car le fluide et les particules jouent des rôles équivalents dans le comportement du composite.

1.1.2 Description des suspensions

La description des suspensions nécessite un certain nombre de notions et de grandeurs que nous rappelons ici. Notons que l'étude du comportement des suspensions est un problème multi-échelle. La manière dont les particules vont interagir à l'échelle microscopique va déterminer le comportement macroscopique de la suspension.

1.1.2.1 Concentration solide ϕ

La grandeur utilisée en priorité pour caractériser une suspension est sa concentration solide, dont nous avons déjà parlé. Pour un volume élémentaire représentatif de la suspension (qui contient du fluide et un échantillon représentatif de particules solides), la concentration solide est définie comme étant la concentration volumique des particules solides dans le volume élémentaire. La classification des suspensions en suspensions molles et dures dépend uniquement de ce paramètre.

1.1.2.2 Granulométrie

La donnée de la concentration solide totale ϕ permet une première classification des suspensions, mais pour aller plus loin nous devons introduire la notion de granulométrie. La granulométrie est la description précise des particules solides constituant la suspension. Les particules sont classées dans différentes catégories en fonction de leur géométrie, de leur forme, de leur taille. Une suspension peut être constituée uniquement de particules sphériques de même rayon. Elle peut également être formée de sphères de rayons différentes. Ou alors, elle peut ne contenir que des particules allongées (des fibres), ou des

particules de forme quelconque, ou encore un mélange d'un peu tout ! Ainsi, des suspensions caractérisées par une même concentration solide peuvent avoir des granulométries très différentes, ce qui se traduit par des comportements différents.

1.1.2.3 Configuration

Donnons nous à présent deux suspensions de même concentration et de même granulométrie. Pouvons-nous être certains que ces deux suspensions vont réagir de la même manière à une contrainte donnée ? Non ! Nous avons besoin d'une autre donnée pour caractériser complètement notre suspension : la configuration, c'est-à-dire la façon dont les particules sont positionnées les unes par rapport aux autres dans la suspension, et la façon dont elles sont orientées. Notons que la configuration joue un rôle important à l'échelle microscopique mais aussi à l'échelle macroscopique. A l'échelle des particules, la configuration est caractérisée par les positions et orientations individuelles des particules. A l'échelle macroscopique, elle est caractérisée par une concentration solide locale, en chaque population de particules, et par des tenseurs d'orientation, que nous présenterons plus en détail dans la suite.

1.1.2.4 Interactions au sein de la suspension

La configuration joue un rôle d'autant plus important que la concentration solide est grande. Ceci est lié au fait que les interactions au sein de la suspension dépendent directement des positions relatives des particules. Ces interactions peuvent être de différentes natures. Il y a les interactions hydrodynamiques qui jouent un rôle prépondérant dans les suspensions molles, et les autres interactions interparticulaires, indépendantes du fluide. Nous supposons que la suspension considérée est non-brownienne. En effet, la diffusion brownienne est un phénomène lié à l'agitation des molécules de fluide qui entrent en collision avec les particules solides. Ce phénomène prend donc de l'importance lorsque les particules sont de petite taille, en dessous du micron. Or, les particules solides que nous considérons sont caractérisées par des dimensions minimales supérieures au micron.

1.1.3 Les interactions hydrodynamiques

Les suspensions sont le siège d'interactions fluide-structures. La présence des particules au sein du fluide modifie son écoulement, qui lui même va agir sur la dynamique des particules. Nous désignons par interactions hydrodynamiques les efforts exercés par le fluide sur une particule. Ces interactions traduisent les effets d'une particule sur une autre, transmis par le fluide. Pour mieux comprendre ce phénomène, considérons une suspension contenant uniquement deux particules. Alors il est clair que la présence de la deuxième particule va perturber l'écoulement autour de la première. Cette perturbation sera d'autant plus importante que les particules sont proches. Ainsi, les interactions hydrodynamiques traduisent bien des interactions interparticulaires véhiculées par le fluide. Le torseur $\{\vec{F}_h, \vec{\Gamma}_h\}$ des efforts exercés par le fluide sur les particules est défini par les

équations suivantes :

$$\vec{F}_h = \int_{\partial\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext} d\Gamma \quad (1.1)$$

$$\vec{\Gamma}_h = \int_{\partial\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) d\Gamma \quad (1.2)$$

Ω_s désigne l'espace occupé par la particule, Γ sa frontière (\vec{n}_{ext} sa normale extérieure) et \vec{X} son barycentre. $\underline{\underline{\sigma}}$ est la contrainte dans le fluide (donnée par la loi de comportement du fluide). Ces notations sont résumées sur le graphique 1.1.

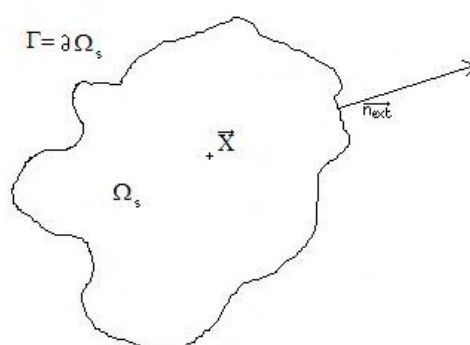


FIGURE 1.1 – Notations.

1.1.4 Les autres interactions interparticulaires

Dans les suspensions molles, se sont généralement les interactions hydrodynamiques qui gouvernent le comportement. En effet, les particules sont suffisamment proches pour que les interactions hydrodynamiques aient un rôle à jouer, mais pas assez pour que les interactions non-hydrodynamiques, à courte portée, soient significatives. Lorsque la concentration solide devient plus importante, la distance moyenne entre particule diminue, et les autres interactions jouent un rôle de plus en plus important.

1.1.4.1 Interactions colloïdales

Les interactions colloïdales sont des forces à très courte portée, de Van der Waals ou électrostatiques. Elles se manifestent lorsque les particules ont une longueur caractéristique très faible (inférieure au micron). Elles peuvent jouer un rôle important dans certaines suspensions, comme les agrégats de noir de carbone, étudiés dans la thèse de M. Leboeuf [Leb07b]. Dans le cadre de notre étude, compte tenu de la taille relativement importante ($> 1 \mu\text{m}$) des particules, nous n'en avons pas tenu compte.

1.1.4.2 Interactions répulsives à courtes portées entre particules

Les interactions répulsives courte portée entre particules jouent un rôle prépondérant dans les suspensions dures. Pour les suspensions molles à grande concentration solide,

ce type d'interaction entre également en jeu, et modifie le comportement macroscopique de la suspension. [ACE99] distinguent trois types d'interactions différentes. Les forces de lubrification sont les efforts hydrodynamiques entre particules très proches. Bien que ce soient des interactions hydrodynamiques, ces forces sont généralement classées dans la catégorie des forces répulsives à courte portée, car elles s'apparentent plus par leurs effets à des forces de collision. Les interactions hydrodynamiques générales présentées précédemment sont à contrario des interactions à longues portée. Les deux autres types d'interactions sont les forces de collisions (qui obéissent à la loi des chocs) et les forces de friction (qui obéissent à la loi de Coulomb). Ces interactions permettent de bien décrire l'évolution des particules. Les auteurs ont proposé une construction du tenseur des contraintes macroscopiques en découpant la contribution particulaire en contributions élémentaires, chacune correspondant à un type particulier d'interaction courte portée. Malheureusement, les expressions proposés ne peuvent pas en général être calculées, ce qui les rend inutilisables telles quelles.

1.2 Modélisation du comportement des suspensions molles

Pour modéliser le comportement d'une suspension molle, l'approche générale consiste à prendre en compte les effets des particules sur le fluide dans la loi de comportement du mélange. Cette nouvelle loi est construite par homogénéisation.

1.2.1 Comportement multi-échelle et homogénéisation

Lors de la construction de la loi de comportement, le caractère multi-échelle apparaît de façon évidente dans l'étude des suspensions. En effet, il s'agit de relier la loi de comportement macroscopique du mélange aux interactions entre le fluide et les particules, qui se passent à l'échelle microscopique. Pour relier ces deux échelles, Batchelor [Bat70b] a développé une technique d'homogénéisation, largement reprise depuis pour étudier les suspensions. Il considère un volume élémentaire représentatif, sur laquelle il construit une loi de comportement en reliant les valeurs moyennes des champs de contrainte, pression, et taux de déformation. Il montre ainsi que la loi de comportement obtenue pour la suspension est la même que celle du fluide, avec deux termes supplémentaires, dont l'un est généralement prépondérant : c'est le tenseur des contraintes particulières.

1.2.2 Construction du tenseur des contraintes particulières

Pour construire la loi de comportement macroscopique de la suspension, Batchelor considère un volume élémentaire Ω , de frontière totale $\partial\Omega$. On appelle Ω_s le volume occupé par les particules solides et $\partial\Omega_s$ leur interface avec le fluide. \vec{u} désigne le champ de vitesse en tout point de la cellule (dans le fluide ou le solide) et à tout instant. On suppose que le fluide vérifie l'équation de Navier Stokes, c'est-à-dire que la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$, la masse volumique ρ , la densité de force volumique \vec{f}_v et le champ de vitesse \vec{u} sont reliés par l'équation :

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \vec{f}_v \quad (1.3)$$

1.2.2.1 Homogénéisation temporelle

Dans un premier temps, une homogénéisation temporelle est faite. En effet, du fait de l'agitation thermique, les variables que nous avons définies sur notre volume élémentaire fluctuent rapidement autour de leur valeur moyenne (temporelle). En pratique, l'expérimentateur est incapable de mesurer ces fluctuations qui sont trop rapides. Il mesure donc une valeur moyenne $\bar{\vec{u}}$ (respectivement $\underline{\underline{\sigma}}$) du champ de vitesse (respectivement champ de contrainte) sur une période θ , qui représente le temps minimal entre deux mesures successives. En effectuant une moyennisation temporelle de l'équation de Navier-Stokes, on obtient pour $\bar{\vec{u}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial \bar{\vec{u}}}{\partial t} + (\bar{\vec{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{\vec{u}} = \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} - \overline{\rho \vec{u}' \otimes \vec{u}'}) + \vec{f}_v \quad (1.4)$$

qui correspond à l'équation de Navier Stokes avec un terme de contrainte supplémentaire, $\vec{u}' = \vec{u} - \bar{\vec{u}}$ qui désigne la fluctuation (imperceptible pour l'expérimentateur) du champ de vitesse autour de sa moyenne temporelle. Le terme supplémentaire dans l'équation (1.4) est lié à la non-linéarité du terme $(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}$. Sa moyenne temporelle n'est pas égale au produit de la moyenne de chaque facteur. Compte tenu de ses fluctuations, les variables mesurées (que nous noterons dans la suite sans le signe de barre) obéissent donc à l'équation de Navier Stokes :

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \nabla \cdot \tilde{\underline{\underline{\sigma}}} + \vec{f}_v \quad (1.5)$$

avec

$$\tilde{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\sigma}} - \overline{\rho \vec{u}' \otimes \vec{u}'} \quad (1.6)$$

Dans des écoulements non turbulents, le terme de fluctuation reste négligeable devant le terme de contrainte usuel. Par la suite nous assimilerons donc $\tilde{\underline{\underline{\sigma}}}$ à $\underline{\underline{\sigma}}$.

1.2.2.2 Homogénéisation spatiale

Batchelor a repris cette méthode d'homogénéisation temporelle pour construire une loi de comportement pour une suspension, en homogénéisant à présent par rapport aux variables spatiales. On définit $\underline{\underline{\Sigma}}$ la moyenne spatiale sur Ω du champ de contrainte :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} d\Omega \quad (1.7)$$

Dans la construction proposée par Batchelor, on suppose que le fluide a un comportement newtonien, c'est-à-dire qu'il vérifie :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{I}} + 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \quad (1.8)$$

avec η la viscosité du fluide, et $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u})$ le tenseur taux de déformation, en dimension d (2 ou 3) :

$$\forall i, j = 1 \dots d \quad \dot{\epsilon}_{ij}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.9)$$

On obtient la loi de comportement macroscopique en effectuant une moyenne spatiale sur Ω de l'équation (1.8) :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\Sigma}} &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_f} \underline{\underline{\sigma}} d\Omega + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} d\Omega \\
&= 2\eta \underbrace{\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} d\Omega}_{\underline{\underline{D}}} - \underbrace{\left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_f} p d\Omega \right) \underline{\underline{I}}}_P + \underbrace{\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} d\Omega}_{\underline{\underline{\Sigma}}_p} \\
&= 2\eta \underline{\underline{D}} - P \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\Sigma}}_p
\end{aligned} \tag{1.10}$$

La loi de comportement du mélange est la somme de deux termes : le premier terme correspond à une loi de comportement newtonienne, identique à celle du fluide ; le deuxième terme dépend du comportement du domaine solide, et que l'on appelle contrainte particulière. Le taux de déformation est nul sur le domaine solide ; c'est une conséquence de la condition de mouvement de corps rigide de la particule solide :

$$\forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \vec{u}(\vec{x}) = \vec{U}_s + \vec{\omega}_s \times (\vec{x} - \vec{X}) \iff \forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) = 0 \tag{1.11}$$

\vec{U}_s et $\vec{\omega}_s$ désignent respectivement la vitesse du barycentre de la particule, et sa vitesse angulaire. On peut ainsi étendre l'intégrale du taux de déformation à Ω entier. On relie ensuite la contrainte particulière $\underline{\underline{\Sigma}}_p$ à la dynamique de la particule. La démonstration donnée ci dessous est due à [ACE99]. En appliquant le théorème de la divergence, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\Sigma}}_p &= \frac{1}{vol(\Omega)} \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} d\Omega \\
&= \frac{1}{vol(\Omega)} \left(\int_{\partial\Omega_s} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \otimes \vec{x} d\Gamma - \int_{\Omega_s} (\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \otimes \vec{x} d\Omega \right)
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Or pour un corps solide, l'équation de conservation du mouvement peut s'écrire en tout point :

$$\forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \rho_s \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}(\vec{x}) - \vec{g} \right) \tag{1.13}$$

Avec ρ_s la masse volumique (homogène) de la particule solide. En utilisant la condition de mouvement de corps rigide, on montre aisément que :

$$\forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \rho_s \left(\frac{d\vec{U}}{dt} + \omega_s^2 (\vec{x} - \vec{X}) + \frac{d\vec{\omega}_s}{dt} \times (\vec{x} - \vec{X}) - (\vec{\omega}_s \cdot (\vec{x} - \vec{X})) \vec{\omega}_s - \vec{g} \right) \tag{1.14}$$

Par ailleurs, la conservation de la quantité de mouvement de la particule s'écrit :

$$m_s \frac{d\vec{U}}{dt} = m_s \vec{g} + \vec{F}_{ext} \tag{1.15}$$

Avec $m_s = \rho_s vol(\Omega_s)$ la masse totale de la particule. \vec{F}_{ext} désigne la force extérieure subie par la particule. En régime hydrodynamique, elle se résume à la force exercée par le fluide sur la particule :

$$\vec{F}_{ext} = \int_{\partial\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext} d\Gamma \tag{1.16}$$

De même, la conservation du moment cinétique s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \left(\underline{\underline{J}}_s \underline{\underline{\omega}}_s \right) = \underline{\underline{\Gamma}}_{ext} \quad (1.17)$$

où $\underline{\underline{J}}_s$ désigne la matrice d'inertie de la particule, et nous noterons $\underline{\underline{J}}_s^{-1}$ sa matrice inverse. On montre alors que l'équation (1.14) devient :

$$\forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \rho_s \left(\frac{\vec{F}_{ext}}{m_s} + \omega_s^2 (\vec{x} - \vec{X}) + \underline{\underline{J}}_s^{-1} \underline{\underline{\Gamma}}_{ext} \times (\vec{x} - \vec{X}) - (\underline{\underline{\omega}}_s \cdot (\vec{x} - \vec{X})) \underline{\underline{\omega}}_s \right) \quad (1.18)$$

Après quelques calculs, on peut exprimer la contrainte particulaire comme la somme de deux termes :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = \underline{\underline{\Sigma}}_p^s + \underline{\underline{\Sigma}}_p^r \quad (1.19)$$

avec $\underline{\underline{\Sigma}}_p^s$ la contribution du fluide et des particules voisines sur la particule :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p^s = \frac{1}{|\Omega|} \left[\int_{\partial\Omega_s} (\underline{\underline{\sigma}} \vec{n}_{ext}) \otimes (\vec{x} - \vec{X}) d\Omega - \underline{\underline{\mathcal{N}}} \left(\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times (\underline{\underline{\sigma}} \vec{n}_{ext}) d\Gamma \right) \right] \quad (1.20)$$

où $\underline{\underline{\mathcal{N}}}(\vec{W})$ désigne l'opérateur antisymétrique suivant :

$$\vec{x} \rightarrow \underline{\underline{\mathcal{N}}}(\vec{W})\vec{x} = \vec{W} \times \vec{x} \quad (1.21)$$

Le terme $\underline{\underline{\Sigma}}_p^r$ est une contribution liée à la rotation propre des particules :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p^r = \frac{1}{2|\Omega|} \underline{\underline{J}}_s \left[\underline{\underline{\omega}}_s \otimes \underline{\underline{\omega}}_s - \omega_s^2 \underline{\underline{I}} \right] \quad (1.22)$$

Le tenseur des contraintes particulières est donc directement lié aux paramètres cinétiques de la particule, mais aussi aux efforts qu'elle subit. Pour déterminer complètement le tenseur, on doit expliciter la champ de vitesse au voisinage de la particule, pour en déduire la contrainte exercée sur sa frontière. Notons que $(\underline{\underline{\sigma}} \vec{n}_{ext})$ représente la force surfacique exercée sur la particule par le fluide, et également par les autres particules, s'il y a des interactions non-hydrodynamiques.

1.3 Loi de comportement pour les suspensions modèles

Malheureusement, il est impossible de calculer le tenseur particulaire dans le cas général, car on ne connaît pas le champ de vitesse dans l'écoulement au voisinage des particules, sauf dans des cas particuliers. Pour obtenir une expression exploitable, il est nécessaire d'émettre certaines hypothèses sur le champ de vitesse fluide au voisinage de la particule. Le premier cas considéré par Einstein [Ein56] fut l'étude d'une suspension d'une sphère dans un fluide "infini". Il a servi de point de départ à l'étude des suspensions légèrement concentrées, faite par Batchelor [Bat70b][Bat70a]. D'autres auteurs [KD59][FA67] ont proposé des expressions empiriques pour la contrainte particulaire dans les suspensions concentrées de sphères. Ces formules sont en fait une généralisation des formules rigoureusement obtenues par Batchelor. Néanmoins, c'est l'approche de ce dernier qui servira de point de départ pour l'étude du comportement des suspensions de fibres.

1.3.1 Les suspensions de sphères

Un résultat expérimental bien connu pour les suspensions de sphères concerne leur comportement : en régime hydrodynamique, une suspension de sphères dans un fluide newtonien se comporte comme un fluide newtonien de plus grande viscosité. Cette viscosité $\eta_{eff}(\phi)$ effective qui caractérise la suspension croît avec la concentration ϕ . Nous rappelons ici les principales lois utilisées.

1.3.1.1 Régime dilué : le modèle d'Einstein

Einstein fut le premier à proposer un modèle de viscosité effective pour les suspensions faiblement concentrées. En supposant la concentration faible, on peut considérer que les particules sont suffisamment éloignées les unes des autres pour que le champ de vitesse autour d'une particule ne soit pas perturbé par la présence des autres particules. En considérant une telle suspension soumise à un cisaillement simple de taux apparent $\dot{\gamma}$ il est alors possible de calculer l'expression analytique du champ de vitesse autour de la sphère, puis la puissance dissipée par un volume contenant la particule solide soumis au cisaillement. En égalisant cette puissance avec celle dissipée par le même volume d'un fluide newtonien de viscosité effective η_{eff} soumise au même taux de cisaillement, on obtient en première approximation :

$$\eta_{eff}(\phi) = \eta(1 + 2.5\phi) \quad (1.23)$$

1.3.1.2 Régime semi-dilué : les modèles de Batchelor

Batchelor et Green [BG72a] ont étendu la formule d'Einstein au cas des suspensions modérément concentrées, en prenant en compte les interactions entre sphères. En première approximation, ils considèrent deux sphères en interactions dans un fluide infini, et ne prennent pas en compte les éventuelles interactions avec d'autres particules. Leurs calculs conduisent au rajout d'un terme d'ordre 2 en ϕ^2 dans la formule d'Einstein :

$$\eta_{eff}(\phi) = \eta(1 + 2.5\phi + 7.6\phi^2) \quad (1.24)$$

La validité de cette approximation est limitée aux suspensions de concentrations inférieures à 10 %.

1.3.1.3 Vers les régimes concentrés : formule de Krieger et Dougherty

La généralisation des formules d'Einstein et de Batchelor devient très vite compliquée pour des concentrations plus importantes. En effet, les interactions hydrodynamiques deviennent très importantes, et il est difficile de déterminer précisément l'expression du champ de vitesse perturbé au voisinage des particules. La généralisation se fait donc de manière empirique ou semi-empirique. Les différents modèles de viscosité effective à concentration modérée ont deux caractéristiques :

- à faible concentration, le développement limité d'ordre 1 doit redonner la formule d'Einstein.

- en accord avec les observations expérimentales, la viscosité doit devenir infiniment grande lorsque la concentration tend vers une concentration critique ϕ_c .

Parmi ces modèles empiriques, nous rappelons la construction de l'un des plus utilisés, le modèle de Krieger et Dougherty [KD59]. Il a le mérite de reposer uniquement sur des arguments physiques, et de ne faire aucune hypothèse sur la granulométrie des sphères : la formule est valable pour une suspension mono ou multimodale. L'idée principale est la suivante : chaque sphère voit un milieu effectif (formé du fluide et des autres sphères) se comportant comme un fluide homogène dont la viscosité ne dépend que de la concentration. On construit alors une suspension de concentration totale ϕ de deux manières différentes : soit en considérant directement une population de sphères de concentration ϕ dans un fluide de viscosité η , soit en considérant une population de concentration ϕ_2 dans la suspension intermédiaire de concentration solide $\phi - \phi_1$. On désigne par V_1 , V_2 et V_f les volumes occupés respectivement par la population 1, la population 2 et le fluide au sein du volume élémentaire considéré. Alors les concentrations ϕ , ϕ_1 et ϕ_2 vérifient la relation :

$$\begin{aligned}
 \phi - \phi_1 &= \frac{V_1 + V_2}{V_1 + V_2 + V_f} - \frac{V_1}{V_1 + V_f} \\
 &= \frac{1}{V_1 + V_2 + V_f} \left(V_1 + V_2 - V_1 \frac{V_1 + V_2 + V_f}{V_1 + V_f} \right) \\
 &= \frac{1}{V_1 + V_2 + V_f} \left(V_1 + V_2 - V_1 \left(1 + \frac{V_2}{V_1 + V_f} \right) \right) \\
 &= \frac{V_2}{V_1 + V_2 + V_f} \left(1 - \frac{V_1}{V_1 + V_f} \right) \\
 &= \phi_2 (1 - \phi_1)
 \end{aligned} \tag{1.25}$$

Ces deux suspensions étant équivalentes, la viscosité effective $\eta_{eff}(\phi)$ doit donc vérifier :

$$\forall \phi_1, \phi_2 = \frac{\phi - \phi_1}{1 - \phi_1} \quad \eta_{eff}(\phi_1) \eta_{eff}(\phi_2) = \eta \eta_{eff}(\phi) \tag{1.26}$$

On remarque que la relation (1.25) peut s'écrire :

$$(1 - \phi) = (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) \tag{1.27}$$

La fonction $\eta(\phi) = \eta, (1 - \phi)$ constitue donc une solution particulière de (1.26). En fait, on montre que toutes les solutions sont de la forme :

$$\eta_{eff}(\phi) = \eta \left(1 - \frac{\phi}{A} \right)^{-\alpha} \tag{1.28}$$

La théorie impose $A = 1$, mais la formule a été généralisée pour pouvoir introduire la notion de concentration critique. Le coefficient α est ajusté aux données expérimentales. Il est généralement proche de 2. Pour retrouver la formule d'Einstein, il faut prendre $A = \phi_c$ et $\alpha = 2.5\phi_c$. Implicitement, cette loi suppose que les particules sont homogènement réparties dans le domaine. La difficulté expérimentale que l'on a pour déterminer le coefficient α provient du fait que dans un rhéomètre de Couette, il n'est pas possible d'assurer l'homogénéité dans la suspension. Des récentes expériences menées par Ovarlez [OBR06] ont permis de s'affranchir de ce problème : une étude de concentration locale et

des profils de vitesse au sein du rhéomètre a été effectuée par IRM. Il retrouve en tout point du fluide la même loi de Krieger et Dougherty, pour chacune des concentrations locales mesurées (voir figure 1.2). La viscosité locale vérifie selon lui l'équation (1.28) avec $\alpha = 2$ et $\phi_c = 0.605$.

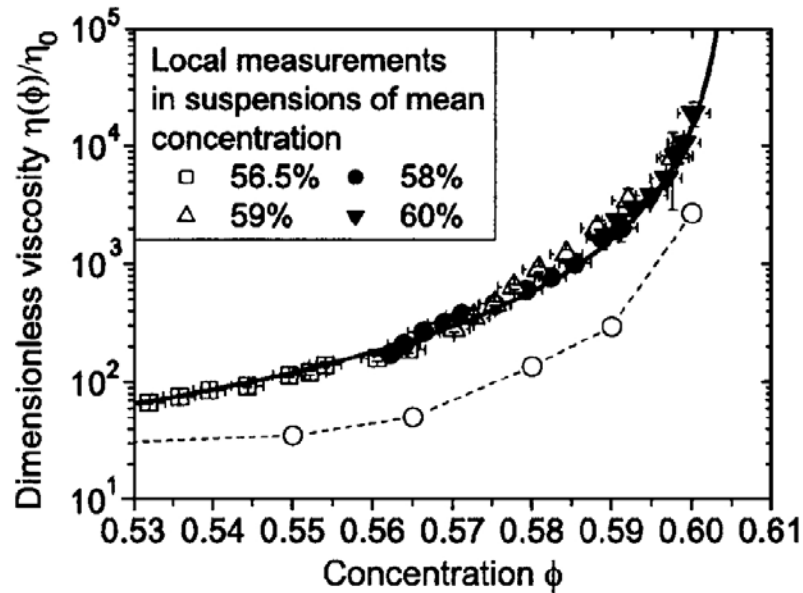


FIGURE 1.2 – Viscosité en fonction de la concentration locale obtenue par [OBR06]. L'ensemble des points expérimentaux suivent une loi de Krieger et Dougherty.

1.3.1.4 Approche empirique pour les grandes concentrations

Expérimentalement, on observe une divergence de la viscosité effective lorsque la concentration se rapproche d'une valeur critique ϕ_c . À l'approche de cette limite, les différents modèles existants conduisent à des estimations différentes de la viscosité. Il est même discutable de supposer que la suspension reste en régime hydrodynamique et conserve son comportement newtonien. Quelle que soit l'approche retenue, deux points méritent d'être soulignés :

- les particules étant plus proches les unes des autres, les interactions hydrodynamiques jouent un rôle de plus en plus important. Les particules très proches les unes des autres contribuent de manière plus importante à l'augmentation de viscosité (car il y a une dissipation d'énergie visqueuse plus importante dans les interstices entre particules proches). La distance minimale entre particules devient un paramètre fondamental, et très difficile à évaluer, car il dépend de la configuration des particules.
- les fluctuations de concentration locale doivent être prises en compte. En effet, au voisinage de ϕ_c , une petite variation de ϕ entraîne une variation importante de la viscosité. Les phénomènes de migration de particules prennent alors toute leur importance.

1.3.1.5 Phénomène de migration de particules dans les suspensions de sphères concentrées

La concentration locale jouant un rôle important dans l'évaluation de la viscosité effective d'une suspension, différents auteurs ont cherché à modéliser le phénomène de migration de particules. Parmi les premiers auteurs à s'y intéresser, citons Leighton, Acrivos et Gadala-Maria. Au cours d'expériences de rhéométries, Acrivos et Gadala-Maria [GMA80] observèrent une diminution de la viscosité apparente d'une suspension concentrées après de longues périodes de cisaillement, ce qui n'était prévu par aucun modèle (voir figure 1.3).

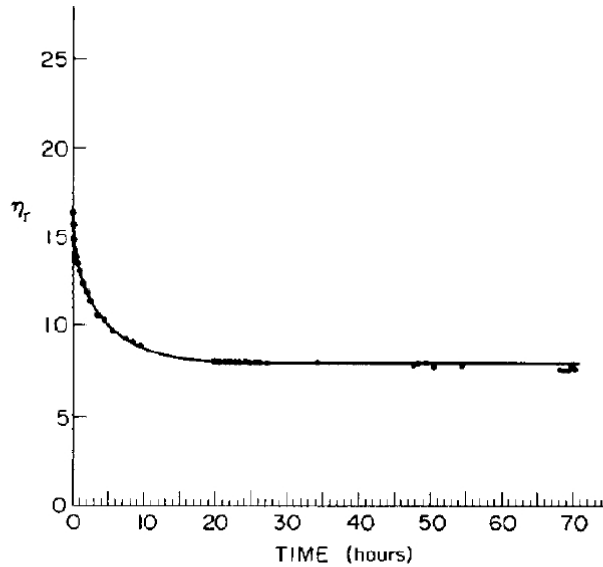


Fig. 1. The relative viscosity of a $\phi = 0.45$ suspension as a function of the time it was sheared in the Couette device at $|\dot{\gamma}| = 24 \text{ sec}^{-1}$. Polystyrene spheres, 40–50 μm in diameter, in a mixture of silicone oils.

FIGURE 1.3 – Viscosité relative d'une suspension de sphères avec une concentration solide de 45%, cisailée dans un rhéomètre de Couette avec un taux de cisaillement de $|\dot{\gamma}| = 24 \text{ s}^{-1}$

Le rhéomètre utilisé pour l'expérience était constitué d'un entrefer (contenant initialement la suspension à concentration donnée) et d'un réservoir (contenant initialement du fluide) pouvant communiquer. Leighton et Acrivos [LA87] expliquèrent la décroissance de la viscosité mesurée par un phénomène de migration des particules de l'entrefer (zone fortement cisailée) vers le réservoir (zone à faible cisaillement). Ce phénomène de migration induit par le cisaillement conduit à une diminution de la concentration en sphères dans l'entrefer, donc à une diminution de la viscosité. Philips, Armstrong et Brown [Pt91] proposèrent une équation constitutive pour modéliser ce phénomène de migration de particules dans une suspension de sphères identiques :

$$\frac{D\phi}{Dt} = \underbrace{a^2 K_c \nabla \cdot (\phi^2 \vec{\nabla} \dot{\gamma} + \phi \dot{\gamma} \vec{\nabla} \phi)}_{-\nabla \cdot \vec{N}_c} + \underbrace{a^2 K_\eta \nabla \cdot (\dot{\gamma} \phi^2 \frac{1}{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial \phi} \vec{\nabla} \phi)}_{-\nabla \cdot \vec{N}_\eta} \quad (1.29)$$

a désigne le rayon des particules, ϕ la concentration locale, η la viscosité effective, $\dot{\gamma}$ le taux de cisaillement local, et K_c et K_η deux coefficients de diffusion, \vec{N}_c et \vec{N}_η désignent deux flux de particules d'origines différentes :

- \vec{N}_c est un terme de flux lié aux interactions entre particules sous l'effet d'un cisaillement. Lorsque deux sphères se rapprochent l'une de l'autre sous l'effet d'un cisaillement (constant) les deux particules entrent en interaction, et sont repoussées l'une par rapport à l'autre de manière symétrique. Ce phénomène engendre un flux de particules, des zones où les collisions sont les plus fréquentes vers les zones où les collisions se font plus rares. On peut montrer que le nombre de collisions par unité de volume et de temps est proportionnel à $a\dot{\gamma}\phi$. Il est alors naturel de prendre un flux de particules dans la direction de $-\vec{\nabla}(a\dot{\gamma}\phi)$. Le déplacement des particules lors d'un tel rapprochement étant de l'ordre de a , on obtient le vecteur \vec{N}_c proposé, avec un coefficient $K_c > 0$ de l'ordre de l'unité.
- un second terme a été introduit pour tenir compte des variations dans la viscosité. En effet, lorsque deux sphères se rapprochent l'une de l'autre dans un milieu dont la viscosité n'est pas uniforme, la particule évoluant dans la zone de plus faible viscosité est repoussée plus fortement. En effet, la viscosité étant plus faible, la particule est soumise à moins de résistance pour s'éloigner. Pour estimer ce flux, les auteurs font l'hypothèse que le déplacement lors d'une interaction se fait dans la direction $-\vec{\nabla}\eta$. Le déplacement a une amplitude de $a^2/\eta|\vec{\nabla}\eta|$ (homogène à une longueur). En multipliant par le nombre de collisions par unité de volume et de temps, puis en remarquant que $\vec{\nabla}\eta = \frac{\partial\eta}{\partial\phi}\vec{\nabla}\phi$, nous obtenons le flux de particules N_η .

Différentes études expérimentales et numériques ont été menées pour prédire l'évolution d'une suspension concentrée de sphères dans un fluide newtonien. [Kt94] mirent au point une expérience d'anémométrie Laser-Doppler (LDA) pour mesurer les coefficients K_c et K_η dans un écoulement de Poiseuille. [NB94] ont effectué des simulations numériques (basé sur la méthode "Stokesian Dynamics", que nous présenterons plus loin) d'écoulement de suspensions concentrées; les résultats obtenus étaient en accord avec les observations expérimentales. [St98] ont également mené une étude expérimentale (par LDA) et numérique (par résolution d'un problème de Stokes couplé avec l'équation (1.29)) sur les suspensions concentrées. D'autres études numériques [At97] ont confirmé l'importance que pouvait avoir l'inhomogénéité de la concentration solide sur le comportement global de la suspension.

1.3.2 Les suspensions de fibres

De nombreux résultats ont été établis pour les suspensions de sphères. L'utilisation croissante des fibres de verre dans l'industrie a naturellement poussé les universitaires à s'intéresser spécifiquement à cette catégorie de suspension. Les suspensions de fibres diffèrent des suspensions de sphères par la présence d'un autre paramètre : leur orientation. L'orientation est d'une importance cruciale, surtout dans les applications industrielles. En effet, les propriétés mécaniques des matériaux obtenus sont fortement liés à l'orientation des fibres au cours du procédé de fabrication. Par ailleurs, l'écoulement de la suspension

est couplée à l'orientation des fibres. Une question importante était également le choix de la description macroscopique de l'orientation : il n'était pas envisageable de décrire l'orientation d'une population de fibres à partir des descriptions unitaires de chacune des fibres. La notion de tenseur d'orientation a donc été introduite.

1.3.2.1 Description microscopique de l'orientation

Les premiers travaux portant sur l'évolution d'une particule allongée (le modèle pour les fibres) datent de 1922. Ils sont dus à Jeffery [Jef22], qui a établi l'équation d'évolution de l'orientation d'une particule ellipsoïdale de révolution dans un fluide visqueux. La description de l'état d'un ellipsoïde de révolution nécessite la connaissance de deux paramètres supplémentaires par rapport à une sphère : une longueur L , et un vecteur orientation \vec{p} .

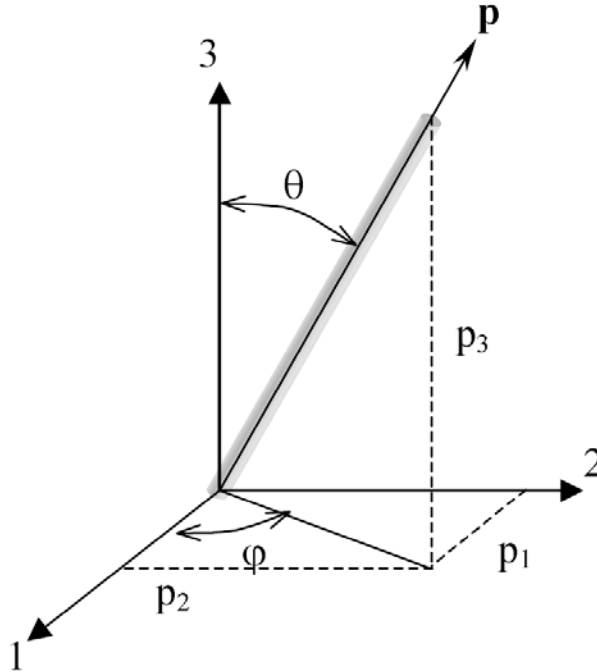


FIGURE 1.4 – Définition des angles et du vecteur caractérisant l'orientation d'une fibre.

Jeffery a démontré que l'évolution de l'orientation \vec{p} dépend de l'écoulement et d'un seul paramètre géométrique propre à l'ellipsoïde de révolution : son rapport de forme $\beta = L/D$, où D est le diamètre de la plus grande section (perpendiculaire à \vec{p}) de l'ellipsoïde. L'équation de Jeffery est la suivante :

$$\frac{D\vec{p}}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u})\vec{p} + \lambda(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u})\vec{p} - (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \vec{p} \otimes \vec{p})\vec{p}) \quad (1.30)$$

$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u})$ et $\underline{\underline{\Omega}}(\vec{u})$ désignent les taux de déformation et de rotation dans le fluide. λ est un paramètre adimensionnel dépendant uniquement du rapport de forme :

$$\lambda = \frac{\beta^2 - 1}{\beta^2 + 1} \quad (1.31)$$

Dans un écoulement de cisaillement plan, Jeffery a ainsi démontré qu'une fibre dans le plan de cisaillement possède un mouvement de rotation périodique dans le plan de cisaillement, avec une période T vérifiant :

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}} \left(\beta + \frac{1}{\beta} \right) \quad (1.32)$$

1.3.2.2 Description macroscopique de l'orientation

La description unitaire de l'orientation des fibres n'est pas adaptée à l'étude d'une population d'un grand nombre de fibres. Pour décrire l'orientation macroscopique d'une population de fibres, nous utilisons les tenseurs d'orientation.

Les tenseurs d'orientation

Le tenseur d'orientation d'ordre k d'une population de fibres est la moyenne des produits tensoriels d'ordre k des vecteurs d'orientation unitaires $(\vec{p}^i)_{i=1\dots N}$ des N fibres appartenant à la population. Le tenseur d'orientation d'ordre 1 est donc le vecteur d'orientation moyen :

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{p}^i \quad (1.33)$$

En pratique, ce sont essentiellement les tenseurs d'ordre 2 et d'ordre 4 qui sont utiles pour la description de l'orientation d'une population. L'expression du tenseur d'ordre 2 est la suivante :

$$\underline{\underline{a}}_2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{p}^i \otimes \vec{p}^i \quad \text{avec } \forall j, k \quad (\underline{\underline{a}}_2)_{jk} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_j^i p_k^i \quad (1.34)$$

Nous avons représenté sur la figure 1.5 quelques populations particulières de fibres en dimension 2, avec l'expression du tenseur d'orientation $\underline{\underline{a}}_2$ associé :

Le tenseur d'ordre 4 s'exprime selon :

$$\underline{\underline{\underline{a}}}_4 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{p}^i \otimes \vec{p}^i \otimes \vec{p}^i \otimes \vec{p}^i \quad \text{avec } \forall j, k, l, m \quad (\underline{\underline{\underline{a}}}_4)_{jklm} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_j^i p_k^i p_l^i p_m^i \quad (1.35)$$

Les expressions (1.34) et (1.35) des tenseurs d'orientation peuvent être utilisées pour décrire une population de quelques dizaines, voire centaines de particules. Pour connaître l'évolution de ces tenseurs, on doit toujours calculer les orientations unitaires des particules. Lorsque le nombre de fibres devient trop important, cela devient impossible. Il est alors préférable d'utiliser une approche statistique pour exprimer ces tenseurs. Plutôt que de considérer les évolutions de chacune des fibres, on introduit et étudie la densité de probabilité $\Psi(\theta, \phi)$ associée toute orientation (θ, ϕ) . La probabilité pour que l'orientation d'une fibre soit comprise entre (θ_1, ϕ_1) et $(\theta_1 + d\theta, \phi_1 + d\phi)$ est alors donnée par :

$$P(\theta_1, \phi_1) = \int_{\theta_1}^{\theta_1 + d\theta} \int_{\phi_1}^{\phi_1 + d\phi} \Psi(\theta, \phi) \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (1.36)$$

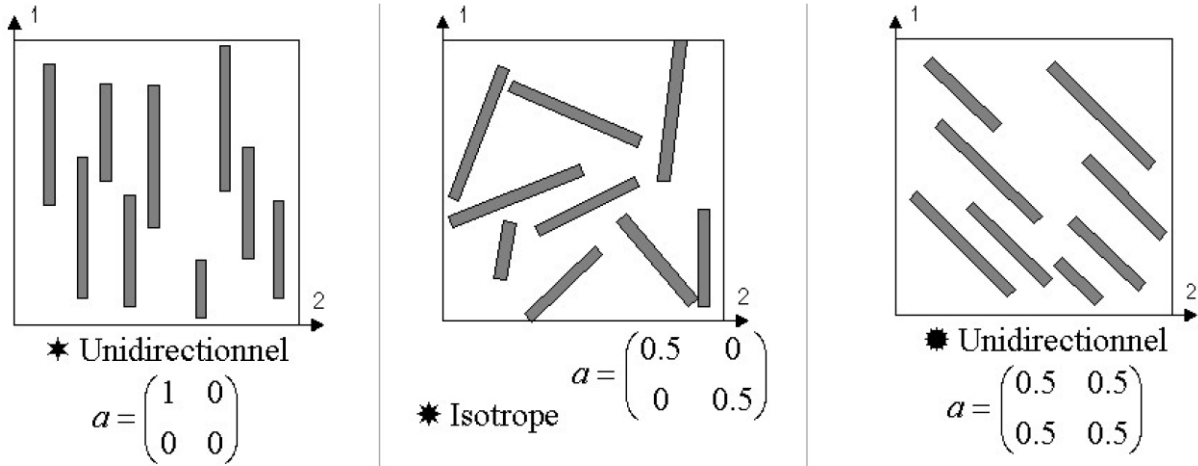


FIGURE 1.5 – Exemples de tenseur d'orientation d'ordre deux, en deux dimensions, pour différentes populations de fibres

Cette probabilité est ensuite utilisée pour définir les tenseurs d'orientation. Ainsi, le tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ est donné par la relation :

$$\underline{\underline{a}}_2 = \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{\phi=0}^{\pi} \vec{p}(\theta, \phi) \otimes \vec{p}(\theta, \phi) \Psi(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \quad (1.37)$$

La connaissance des tenseurs d'orientation est donc liée à la détermination de la fonction $\Psi(\theta, \phi)$.

Evolution des tenseurs d'orientation : l'équation de Folgar et Tucker

Dans une suspension de fibres, l'écoulement va modifier l'orientation des fibres (donc en particulier les tenseurs d'orientation), et réciproquement le comportement de la suspension va dépendre des tenseurs d'orientation. Mathématiquement, nous avons donc besoin d'une équation d'évolution des tenseurs d'orientation en fonction des caractéristiques de l'écoulement, et d'une loi de comportement fonction de ces mêmes tenseurs. L'évolution des tenseurs d'orientation est donnée par la célèbre équation de Folgar et Tucker [FT84]. Elle s'obtient à partir de l'équation de Jeffery pour une orientation donnée \vec{p} , et d'une équation d'évolution pour Ψ . Pour obtenir cette équation, Folgar et Tucker considèrent la fraction de fibres dont l'orientation est comprise entre (θ, ϕ) et $(\theta + d\theta, \phi + d\phi)$. Selon Folgar et Tucker, le flux de particules entrant dans notre intervalle pendant dt est donné par $-\nabla \cdot (\Psi(\theta, \phi) \frac{D\vec{p}}{Dt}(\theta, \phi)) dt$, avec l'opérateur divergence exprimé en coordonnées sphériques. Ainsi, en l'absence d'autre phénomène, la densité de probabilité obéit à l'équation :

$$\frac{D\Psi}{Dt} = -\nabla \cdot (\Psi \frac{D\vec{p}}{Dt}) \quad (1.38)$$

Un terme de diffusion brownienne est ensuite ajouté pour obtenir finalement une équation de Fokker Planck (c'est-à-dire une équation de diffusion avec un terme de dérive, ou drift) :

$$\frac{D\Psi}{Dt} = -\nabla \cdot (\Psi \frac{D\vec{p}}{Dt}) + D_r \Delta \Psi(\theta, \phi) \quad (1.39)$$

Bien que le terme rajouté soit un terme de diffusion de la même forme que celui qui décrit le mouvement de particules browniennes dans un fluide ; il n'a ici rien à voir avec un comportement brownien des fibres. Une particule est soumise à un mouvement brownien lorsque ses dimensions sont proches de celles des molécules de fluide. En pratique, on prend en compte ces interactions pour des dimensions inférieures ou égales au micron. Ici, le terme représente les interactions avec les autres fibres, dont les dimensions sont effectivement proches de celles de la particule considérée (ce sont les mêmes). On considère donc que l'orientation des particules sous l'effet du mouvement global du fluide est perturbée par des "chocs" (ce sont ici des interactions hydrodynamiques, complexes à modéliser) avec les autres particules. Le coefficient de diffusion est pris sous la forme :

$$D = C_I \dot{\gamma} \quad (1.40)$$

Le coefficient de diffusion dépend de l'intensité et de la fréquence des collisions. Folgar et Tucker estiment que la fréquence des interactions est proportionnel au taux de cisaillement généralisé (tout comme dans l'équation de Philips, Armstrong & Brown pour la migration de sphères). Les autres paramètres (comme la concentration en fibres ou leurs dimensions) sont pris en compte dans le coefficient C_I . Une approximation est donc faite implicitement : on suppose que la fréquence des interactions est indépendante de l'orientation des particules. A partir de l'équation de Jeffery (1.30), de (1.37) et (1.39), on obtient l'équation de Folgar et Tucker :

$$\frac{Da_2}{Dt} = (\underline{\underline{\Omega}}(\underline{\underline{u}})\underline{\underline{a}}_2 - \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\Omega}}(\underline{\underline{u}})) + \lambda(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{u}})\underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{u}}) - \underline{\underline{a}}_4 : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{u}}) + C_I \dot{\gamma}(\underline{\underline{I}} - 3\underline{\underline{a}}_2)) \quad (1.41)$$

Relation de fermeture

Connaissant l'écoulement (c'est-à-dire le champ de vitesse) et le tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ à un instant t , il n'est toujours pas possible de déterminer $\underline{\underline{a}}_2$ à l'instant suivant $t + dt$. En effet, la résolution de (1.41) nécessite la connaissance du tenseur d'ordre 4 $\underline{\underline{a}}_4$. Une idée aurait été d'établir une équation d'évolution pour le tenseur d'ordre 4, sur le même modèle que l'équation de Folgar et Tucker. Malheureusement, par construction, cette nouvelle équation ferait apparaître le tenseur d'ordre 6, et plus généralement, l'équation d'évolution du tenseur d'ordre $2k$ dépend du tenseur d'ordre $2k + 2$. Pour achever la résolution de (1.41) on est obligé de recourir à une relation de fermeture $\underline{\underline{a}}_4 = f(\underline{\underline{a}}_2)$. Il en existe un grand nombre basées sur différentes hypothèses, et applicables dans différents cas de figures. Les trois relations de fermeture les plus simples et les plus connues sont les relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride.

La relation de fermeture linéaire est une écriture des composantes $(a_4)_{ijkl}$ du tenseur d'ordre 4 comme une combinaison linéaire des composantes $(a_2)_{mn}$ $m, n = i, j, k$ ou l . Les coefficients sont choisies de sorte que la relation de fermeture soit exactement vérifiée pour une orientation isotrope (orientation pour laquelle les tenseurs d'orientation peuvent

être calculés explicitement).

La relation de fermeture quadratique reste l'une des plus utilisées bien qu'elle ne respecte pas les propriétés de symétrie du tenseur d'ordre 4. Elle s'écrit :

$$\underline{\underline{a_4}}^{quad} = \underline{\underline{a_2}} \otimes \underline{\underline{a_2}} \quad (1.42)$$

Enfin, la relation de fermeture hybride consiste à prendre une combinaison linéaire des relations de fermeture linéaire et quadratique :

$$\underline{\underline{a_4}}^{hyb} = p \underline{\underline{a_4}}^{quad} + (1-p) \underline{\underline{a_4}}^{lin} \quad (1.43)$$

Le coefficient p est une fonction de $\underline{\underline{a_2}}$, qui vaut 1 lorsque les fibres sont alignées, et 0 lorsque l'orientation est isotrope.

D'autres relations de fermetures plus subtiles sont basées sur des propriétés mathématiques, comme les invariants des tenseurs. Ce sont les approximations naturelles et orthotropes [AT90][CT95]. D'autres études plus récentes [JS05] construisent une relation de fermeture en faisant intervenir le tenseur d'ordre 6.

1.3.2.3 Comportement des suspensions de fibres

Pour achever la construction d'un modèle de suspension de fibres, il ne manque plus qu'à construire une loi de comportement des suspensions, c'est-à-dire une relation entre la contrainte dans le fluide et les tenseurs d'orientation des fibres. Les premiers modèles proposés sont dus à [Cox70] et [Bat71]. Ils sont basés sur la théorie des corps élanés. D'autres auteurs ont par la suite proposé des améliorations du modèle de Batchelor. Tucker [Tuc91] a généralisé les modèles de comportement existants sous la forme synthétique suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + 2\eta_{eff}(\beta, \phi) [\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + N_s(\beta, \phi) [\underline{\underline{\dot{\epsilon} a_2}} + \underline{\underline{a_2 \dot{\epsilon}}}] + N_p(\beta, \phi) \underline{\underline{a_4}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}] \quad (1.44)$$

La construction d'un modèle de comportement revient donc à donner des expressions analytiques pour les coefficients N_s , N_p . η_{eff} est le plus souvent pris égal à η_f . Les modèles diffèrent par les hypothèses faites pour estimer ces coefficients. Dans le tableau 1.1 ci-dessous, nous donnons les expressions analytiques des coefficients pour les modèles les plus célèbres. On remarque que pour la plupart, le coefficient N_s est pris égal à zéro. Lorsqu'il est non nul, ce dernier est toujours petit devant N_p .

1.3.2.4 Limites des modèles de suspensions de fibres

Les modèles théoriques que nous venons de citer présentent un certain nombre de limitations. Premièrement, ils ne sont valables (et cohérents entre eux) qu'à concentration modérée. A grande concentration, les coefficients N_p et N_s varient de manière importante d'un modèle à un autre. Aucun ne se distingue réellement par sa pertinence. Une relation de fermeture est nécessaire pour résoudre les équations. Là encore, il n'existe pas à ce jour de relation suffisamment générale pour être valable dans tous les cas de figures.

| Modèle | $N_s(\beta, \phi)$ | $N_p(\beta, \phi)$ |
|---|---|--|
| Batchelor [Bat71] | 0 | $\frac{\beta^2 \phi}{3 \ln \beta}$ Milieu dilué $\beta \gg 1$ |
| [Bat71] Milieu semi-dilué $\beta \gg 1$ | 0 | $\frac{\beta^2 \phi}{9 \left[\ln 2\beta - \ln(1 + 2\beta\sqrt{\phi/\pi}) - 1.5 \right]}$ |
| [LDH+88] | $\frac{\phi(6 \ln 2\beta - 11)}{\beta^2}$ | $\frac{\phi(6 \ln 2\beta - 11)}{2(\ln 2\beta - 1.5)}$ |
| Dinh & Armstrong [DA84] | 0 | $\frac{\beta^2 \phi}{3 \ln(2h/d)}$ $h = \begin{cases} d/2\sqrt{\pi/\phi} & \text{(align.)} \\ \frac{\pi d}{4\phi\beta} & \text{(iso.)} \\ (1-f)h^{iso} + h^{ali.} & \text{sinon} \end{cases}$ $f = 1 - 27 \det(\underline{a_2})$ |
| Shaqfeq & Fredrickson [SF90] | 0 | $\frac{2\beta^2 \phi}{3[-\ln(\phi) + \ln(-\ln \phi) + \zeta]}$ ζ fonction de la forme des fibres et de l'orientation |
| [PTG91] $5 < \beta < 30$ | 0 | $\frac{\beta^2 \phi(2 - \phi/A)}{4(\ln 2\beta - 1.5)(1 - \phi/A)^2}$ $A = 0.53 - 0.013\beta$ |

TABLE 1.1 – Synthèse des différentes expressions analytiques pour les coefficients intervenant dans la loi de comportement (1.44).

1.3.3 Les suspensions complexes

Si la littérature sur les suspensions modèles de sphères ou de fibres est importante, celles sur les suspensions plus complexes l'est beaucoup moins. Nous rappelons que nous désignons par suspensions complexes toutes les suspensions autres que celles considérées jusqu'ici. Rentrent donc dans cette catégorie :

- les mélanges bidisperses et polydisperses de sphères
- les mélanges de fibres de différents rapports de forme
- les mélanges de fibres et de sphères.
- les suspensions de particules de forme quelconque.

Nous présentons ici les rares résultats publiés à ce jour portant sur le sujet.

1.3.3.1 Mélanges polydispersés de sphères

Les mélanges multidispersés (et en particuliers les mélanges bidispersés) de sphères sont particulièrement intéressants car ils représentent bien un grand nombre de matériaux composites utilisés dans l'industrie. En effet, il est fréquent de rajouter plusieurs charges solides dans une matrice polymère. Chaque charge a un rôle particulier à jouer, pour améliorer les propriétés mécaniques, thermiques électriques, et parfois esthétiques du composite.

Pour modéliser le comportement de telles suspensions, la plupart des auteurs utilisent la formule de Krieger et Dougherty (1.28) pour calculer la viscosité effective d'une telle suspension :

$$\eta_{eff}(\phi) = \eta \left(1 - \frac{\phi}{\phi_c}\right)^{-\alpha} \quad (1.45)$$

En effet, dans la construction de cette formule, aucune hypothèse particulière n'a été faite sur la granulométrie. En supposant que la suspension conserve un comportement newtonien, on suppose implicitement que toutes les particules sont des sphères, mais pas qu'elles ont le même rayon. A première vue la formule de Krieger et Dougherty doit conduire à la même viscosité effective quelque soit la granulométrie. En réalité, de nombreuses expériences ont mis en évidence une diminution de la viscosité effective (en statique : [SG54], [SP92], [PST94], et en dynamique : [GP97]) dans les mélanges bimodaux de sphères comparée à la viscosité effective des suspensions monomodales correspondantes, de même concentration solide totale. La viscosité du mélange dépend à la fois de la concentration relative en chacune des populations de sphères et du rapport de taille. Cette variation de viscosité est purement structurelle : la concentration maximale ϕ_m est une fonction de la granulométrie. [OT81] ont proposé un modèle qui a été largement adopté par la suite pour calculer la concentration maximale $\phi_m(\lambda, \xi)$ comme une fonction du rapport de taille λ et de la composition ξ (défini comme étant la fraction volumique de petites sphères). Le graphique 1.6 donne l'évolution de la concentration maximale en fonction de ξ pour différentes valeurs de λ .

Nous renvoyons le lecteur à l'article de référence pour les formules analytiques du modèle.

Pour les suspensions polydispersés de sphères avec au moins trois tailles différentes, il n'existe pas de modèle de compacité comparable au modèle d'Ouchiyama et Tanaka. Néanmoins, on prédit une réduction de la viscosité avec une augmentation du nombre de tailles de sphères différentes, d'autant plus grands que les rapports de taille entre les différentes sphères seront grands.

1.3.3.2 Mélange de fibres de différents rapports de forme

Il est rare que les fibres utilisées pour la préparation d'un composite aient toutes les mêmes dimensions (donc le même rapport de forme). En effet, il est fréquent que de nombreuses fibres soient broyées lors de la phase de malaxage du composite qui précède son injection. En pratique on observe une distribution continue des rapports de formes (les fibres ont toutes le même rayon mais pas la même longueur). Ainsi il est d'usage d'utiliser un seul tenseur d'orientation pour décrire l'ensemble des fibres. Une autre approche envisageable serait de ne considérer que les populations de fibres en quantité significative,

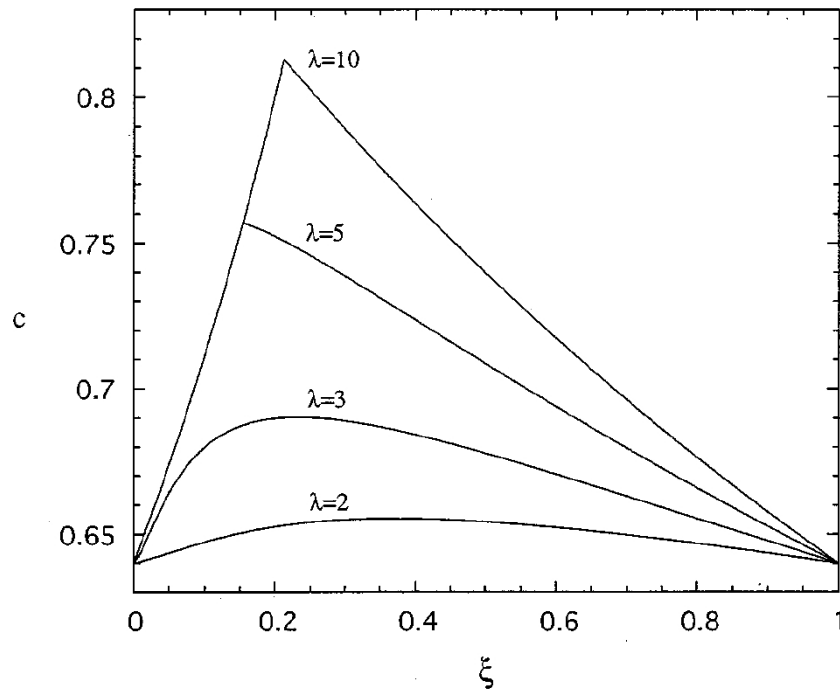


FIGURE 1.6 – Concentration maximale d'une suspension bimodale de sphères en fonction du rapport entre le rayon des grandes sphères et celui des petites

et de décrire chacune des populations à l'aide d'un tenseur d'orientation. Aucune étude théorique n'a à notre connaissance été publiée sur le sujet.

1.3.3.3 Mélanges de fibres et de sphères

Enfin, les suspensions complexes d'un grand intérêt sont les mélanges de fibres et de sphères. En effet, la majorité des composites contiennent à la fois des fibres de verres et d'autres particules solides. Néanmoins, aucun modèle n'a été établi pour décrire le comportement de tels mélanges. Dans le cas d'un mélange de fibre et de sphères de même taille, on peut distinguer trois cas de figures particuliers, en fonction des tailles relatives des fibres (de longueur L et de rayon R_f) et des sphères (de rayon R_s) :

- $R_s \ll R_f \ll L$: c'est le cas de figure où les sphères sont très petites en comparaison avec les fibres. Dans ce cas, la modélisation de la suspension complexe est relativement simple. On peut assimiler le milieu { fluide + sphères } à un fluide de viscosité effective plus importante, et considérer l'évolution de la population de fibres dans ce milieu effectif. Ainsi, on conserve le modèle d'évolution d'une population de fibres dans un fluide dans sa globalité ; on ne modifie que la valeur de la viscosité de la matrice fluide. Les valeurs des coefficients N_s , N_p et C_i n'ont pas à être modifiés.
- $R_f < R_s < L$: c'est le cas de figure le plus courant dans les applications. Dans ce cas, les sphères étant de la même taille que les fibres, on ne peut pas assimiler

le mélange { fluide + sphères } à un milieu effectif. Les interactions hydrodynamiques subies par les fibres vont être modifiées de par la présence des fibres. On s'attend à ce que les interactions pseudo-browniennes soient amplifiées (car il y a un plus grand nombre de particules autour des fibres qui perturbent son mouvement). Un premier modèle simplifié consisterait à prendre un coefficient C_i plus important.

- $R_s \gg L \gg R_f$: c'est le cas inverse, dans lequel les fibres sont de très petite taille devant les sphères. Il est difficile de construire un modèle dans ce cas précis. Il n'est pas d'un grand intérêt dans l'étude des composites.

1.4 Simulation d'écoulements de suspensions dans la littérature

L'écoulement de suspensions est un domaine de recherche très actif tant au niveau de la modélisation que de la simulation. Dans cette section, nous présentons une étude bibliographique générale sur la simulation d'écoulement de suspensions. Indépendamment des méthodes numériques en jeu et des suspensions traitées, nous pouvons classer les différentes simulations dans deux grandes catégories.

La première catégorie est la simulation à l'échelle macroscopique. La seconde, qui nous intéresse particulièrement, est la simulation d'investigation, à l'échelle microscopique.

1.4.1 La simulation prédictive à l'échelle macroscopique

Nous désignons ici sous le terme de simulation prédictive toute simulation dont la finalité est la prédiction d'un résultat concernant une structure à l'échelle macroscopique. Rentrent dans cette catégorie tous les procédés de mise en forme de matériaux, les calculs de structure, etc ... Les simulations de cette catégorie présentent plusieurs caractéristiques communes :

- le comportement de la suspension est connu. On utilise un modèle pertinent pour l'application considérée, que l'on résout par des méthodes numériques classiques (différences fines, volumes finis, éléments finis). Il s'agit donc de résoudre un problème de mécanique continue (on privilégie donc l'aspect "continu" du mélange, à l'aspect "discret" des particules).
- la principale difficulté liée à ces simulations concerne la géométrie complexe du domaine. Par exemple, lorsque l'on étudie le remplissage d'un moule par injection, on doit gérer l'avancée du front de matière dans le moule, qui a lui même une géométrie complexe, et nécessite donc un outil de maillage puissant.

En pratique, c'est ce type de simulation qui intéresse réellement les industriels, car il fournit un résultat concret sur un procédé de fabrication d'une pièce. Cette simulation constitue en général une étude préliminaire pour s'assurer de la bonne conception d'un moule, avant le test expérimental. Néanmoins, la pertinence des résultats obtenus est directement liée à la qualité du modèle de comportement utilisé. Et nous avons vu que ces modèles présentent de nombreuses imperfections (paramètres arbitraires, relation de fermeture

1.4.2 La simulation investigative à l'échelle microscopique

La simulation à l'échelle microscopique consiste à étudier le couplage entre la matrice fluide et les particules solides. D'une manière générale, on considère une population représentative de particules solides dans un fluide. Le volume élémentaire (carré ou cube) ainsi créé est soumis à une contrainte particulière (écoulement de Couette ou Poiseuille). En étudiant l'évolution de chacune des particules au sein de l'écoulement, on peut en déduire par homogénéisation des informations sur le comportement macroscopique de la suspension : concentration solide locale, tenseurs d'orientation, etc ...

La quantité d'information obtenue dépend du couplage utilisé dans la simulation numérique. Dans l'étude bibliographique proposée ici, nous avons classé les différentes méthodes dans trois catégories différentes :

- Méthode sans couplage : on calcule des forces hydrodynamiques exercées sur chacune des particules, en utilisant un écoulement modèle qui ne tient pas compte de la présence des particules. La simulation consiste alors à résoudre un problème à N corps solides, soumis à des forces extérieures (dont les forces hydrodynamiques).
- Méthode avec couplage faible : C'est la même approche, mais l'écoulement modèle utilisé pour calculer les forces hydrodynamiques tient compte des particules à travers certains paramètres (concentration et orientation).
- Méthode avec couplage fort : On étudie directement l'évolution du fluide en présence de particules, et l'évolution des particules au sein du fluide. Plus aucune hypothèse n'est faite sur le comportement des particules ou du fluide.

Naturellement, la complexité des calculs et le coût en temps en d'autant plus élevé que le couplage est fort.

1.4.2.1 Méthodes sans couplage

Il s'agit de simuler l'évolution de particules solides au sein d'un fluide dont l'évolution est supposée connue. On se ramène donc à un problème à N corps soumis à un certain nombre de forces (qu'il convient de bien modéliser) : forces hydrodynamiques, forces de contacts, forces d'interactions browniennes (si suspension brownienne), etc... Il s'agit d'une généralisation des simulations de type dynamique moléculaire, aux suspensions de particules solides. [BB88] donnèrent d'ailleurs le nom de "Dynamique Stokesienne" à ce type de simulation. Ces simulations ont l'avantage de ne pas être trop coûteuses en temps de calcul (on ne s'intéresse qu'à l'évolution des particules).

1.4.2.2 Méthodes avec couplage faible

En pratique, les méthodes sans couplage ont été très peu utilisées. En effet, les hypothèses faites sur l'évolution du fluide sont trop restrictives. Il est d'ailleurs possible de les relaxer facilement en introduisant un faible couplage entre l'évolution des particules et le fluide : plutôt que d'utiliser un taux de déformation (et un taux de vorticité) pour calculer l'évolution des particules au sein du fluide, on les recalcule à chaque instant à partir des informations sur la microstructure (concentration, orientation). Pour calculer le taux de déformation et de vorticité au voisinage des particules on peut effectuer un calcul global (on calcule un seul et même taux de déformation/vorticité pour l'ensemble des particules) ou un calcul local (on discrétise le domaine et on calcule le champ de

vitesse en tout point du domaine, par une méthode d'éléments finis par exemple). On obtient ainsi une valeur différente pour les taux de déformation/vorticité associés à chacune des particules. Ces méthodes ont été largement utilisées dans les années 90, car elles permettaient de tenir compte (partiellement) du couplage fluide/structure au sein des suspensions tout en restreignant les temps de calculs. Certains auteurs ont ainsi effectué des calculs de coefficients de diffusion pour caractériser la migration de particules dans des suspensions concentrées (voir par exemple [NB94]). D'autres ([SK97], [Ft98], [Ft99] et [At06]) ont obtenu des relations de fermeture et des estimations du coefficient C_i pour des suspensions de fibres concentrées (donc avec des interactions non-hydrodynamiques).

1.4.2.3 Méthodes avec couplage fort

Les méthodes avec couplage faible ont permis de déterminer partiellement les paramètres macroscopiques caractérisant les suspensions. Néanmoins, elles nécessitent l'utilisation d'un modèle de comportement, donc le choix de valeurs pour les paramètres rhéologiques.

Pour s'affranchir de ce modèle, et déterminer directement la loi de comportement pour la suspension, on ne doit plus faire aucune approximation lors du calcul du champ de vitesse. On doit donc calculer le champ de vitesse en tout point du fluide, en tenant compte de la présence des particules. On parle alors de simulation directe. Ce type de simulation est nettement plus coûteux en temps de calcul, principalement pour deux raisons :

- le milieu fluide, sur lequel le champ de vitesse est calculé, a une géométrie complexe. Toutes les méthodes numériques ne sont pas adaptées (les différences finies par exemple ne conviennent pas du tout) et il est difficile et long de discrétiser (ou "mailler") correctement le milieu fluide.
- cette géométrie évolue rapidement, ce qui nécessite l'utilisation systématique d'une méthode de remaillage efficace.

Quelques auteurs ([Ht92][Hu96]) se sont intéressés à la simulation directe d'écoulement de suspensions par cette méthode intuitive. Cette approche est très utile et suffisante dans des problèmes d'interactions fluide-structure avec un faible nombre de corps solides (un cas d'étude classique étant l'écoulement d'air autour d'une aile d'avion) mais est ingérable avec un grand nombre de corps, surtout s'il s'agit d'un calcul 3D.

La simulation directe a connu son essor grâce à la méthode des domaines fictifs. Glowinski *et al.* ont mis au point une méthode de domaines fictifs adaptée à la résolution d'un problème de Stokes (et plus généralement pour une classe d'opérateurs elliptiques) sur un domaine à géométrie complexe ([GPP94]). D'une manière générale, la méthode de domaines fictifs consiste à étendre la définition du champ de vitesse (donc du problème) au domaine entier, et à imposer le comportement des particules solides via une contrainte imposée à l'aide d'un multiplicateur de lagrange. Le principal avantage de cette méthode est que le problème fluide est formulé sur le domaine (fictif) total, qui est de géométrie simple (cube ou carré) et pour lequel on peut utiliser un maillage fixe, rendant accessible en terme de temps de calcul la simulation directe d'écoulement de suspension.

Validée sur l'étude de l'écoulement autour d'une sphère (2D) [Gt98], Glowinski *et al.* ont ensuite étendu leurs cas d'études aux suspensions de sphères (2D) [Gt99] [GPH⁺01], à l'étude d'un ellipsoïde en 3D [Pt02] et enfin à l'étude de deux ellipsoïdes en interaction dans un fluide [Pt05]. Son extension pour étudier des suspensions concentrées dans des

géométries 3D n'a pas encore été effectuée. De nombreux auteurs ont développé des variantes de la méthode présentée par Glowinski *et al.*. Les innovations de ces variantes portent en général sur l'un des 4 points suivants : le comportement de la matrice fluide, le traitement technique du domaine fictif, le déplacement des particules, ou les conditions limites.

Comportement de la matrice fluide

La méthode des domaines fictifs a été étendue par différents auteurs [SJH⁺00] [HHM04b] aux suspensions de sphères dans une matrice viscoélastique.

Traitement du domaine fictif

Le traitement du domaine fictif concerne la formulation de la contrainte de mouvement de corps rigide des particules et le domaine de définition du multiplicateur de Lagrange associé. Plusieurs auteurs [PSJ⁺00] [DGMN03] ont proposé leur propre formulation en remplaçant la contrainte de mouvement de corps rigide par une contrainte d'indéformabilité. Ces formulations permettent de s'affranchir des maillages des particules, et de travailler sur un unique maillage. Nous les aborderons en détail dans le chapitre suivant. D'autres auteurs [Vt07] ont remplacé la contrainte imposée à l'aide d'un multiplicateur par un calcul explicite des forces d'interactions entre les deux phases. Enfin, [WT07] ont été les premiers à publier une étude de simulation directe d'écoulements de suspensions avec remaillage de la frontière fluide-particule.

Déplacement des particules

Le déplacement des particules peut se faire de différentes manières, selon la méthode numérique utilisée. Le déplacement est systématiquement calculé à partir d'un schéma d'ordre 1 ou 2 en temps. Les méthodes diffèrent par leur calcul du champ de vitesse utilisé dans ces schémas. Deux approches sont fréquemment utilisées.

La première consiste à recalculer les efforts hydrodynamiques exercés sur chacune des particules, à partir du champ de vitesse fluide. Il s'en déduit l'accélération de la particule, puis sa vitesse. Cette approche n'est pas la plus naturelle dans le cadre des domaines fictifs.

La seconde approche, plus appropriée aux techniques de domaines fictifs, consiste à interpoler le champ de vitesse fluide au barycentre de la particule. Ce champ de vitesse est bien défini, car il appartient au domaine fictif défini dans ce type d'approche.

Conditions limites

Lorsque l'on cherche à construire un modèle de comportement par homogénéisation, on rencontre une difficulté au niveau des conditions limites. En effet, les modèles de comportement macroscopiques pour les suspensions de sphères ou de fibres sont implicitement construits en supposant que l'"on est loin des bords". Ce qui signifie simplement qu'il n'y a

pas d'effet de bord sur le volume élémentaire considéré. Lorsque l'on cherche à déterminer par une simulation directe les paramètres caractérisant de telles lois macroscopiques, on doit donc imposer des conditions limites sans effet de bord. Or l'utilisation de conditions limites de Dirichlet classiques pour imposer un écoulement de Couette ou de Poiseuille traduisent ni plus ni moins la présence de parois, donc des effets de bords importants ! Ces conditions limites ne conviennent donc pas. Un moyen simple de supprimer les effets de bords est d'imposer des conditions limites périodiques classiques, ou de Lee-Edwards, pour prendre en compte un cisaillement. Ces conditions limites sont assez simples à imposer aux particules (il suffit de calculer des forces interparticulaires périodiques et de relocaliser les particules par périodicité). En revanche, calculer un champ de vitesse fluide sur domaine fictif, avec condition de périodicité est moins évident. [HHM04a] ont proposé une formulation pour le calcul d'un champ de vitesse fictif vérifiant les conditions limites de Lee Edwards, sur une cellule 2D. Une autre méthode pour supprimer les effets de bord est la technique de fenêtrage. Cette technique consiste à faire un calcul sur un domaine grand puis à effectuer le calcul d'homogénéisation sur un sous-domaine. Une telle approche a été proposée par [DMHP07] qui a combiné la technique de fenêtrage avec une relocalisation aléatoire des particules.

1.4.2.4 Simulations de fibres flexibles

Quelques rares auteurs se sont intéressés à la dynamique de fibres déformables. La déformabilité des fibres est un propriété intéressante à prendre en compte, car les fibres utilisées dans l'industrie (fibres de verres en particulier) le sont la plupart du temps. En revanche la description unitaire de chaque fibre est plus complexe. L'approche proposée par [YM93] a été retenue par tous les auteurs : elle consiste à modéliser la fibre flexible par une chaîne de sphères liées les unes aux autres par des liaisons élastiques (voir figure 1.7). Les sphères peuvent également tourner autour des axes des liaisons.

Dans cette première étude, la présence de la fibre n'était pas pris en compte dans l'écoulement (méthode sans couplage). [SG98] ont proposé une méthode de simulation avec couplage, validée sur la dynamique d'une fibre flexible 2D dans un écoulement de Couette. [Jt01][Jt02] ont mis au point une méthode avec couplage faible permettant de suivre l'évolution d'une population d'une centaine de fibres flexibles. Aucune étude n'a à ce jour été publiée sur la simulation directe avec couplage fort de l'écoulement de fibres 3D, déformables ou non.

1.5 Bilan de l'étude bibliographique

Le sujet de ce document est le développement d'une méthode numérique pour modéliser et simuler l'écoulement de suspensions de particules solides. La complexité de ces écoulement vient du couplage qui existe entre l'écoulement du fluide et l'évolution de la structure formée par l'ensemble des particules. L'étude bibliographique présentée ici porte sur la modélisation de ces suspensions, et sur les simulations numériques.

Les études expérimentales et théoriques pour modéliser les écoulements de suspensions sont nombreuses. Il existe de nombreux modèles de comportement pour les suspensions de sphères ou de fibres. Néanmoins, leur domaine de validité est restreint aux faibles

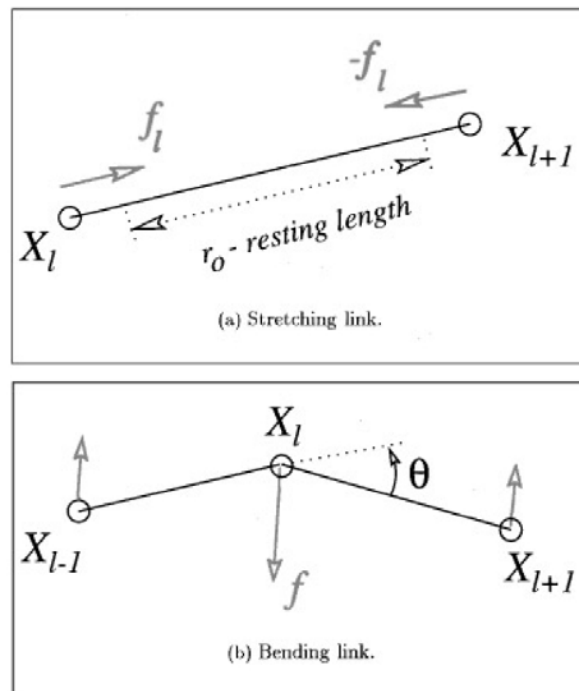


FIGURE 1.7 – Degrés de liberté des chaînes de sphères utilisées par [YM93] pour modéliser des fibres flexibles.

concentrations. Lorsque celle-ci devient importante, la modélisation des interactions hydrodynamiques et non-hydrodynamiques devient difficile, et les modèles de comportement construits restent approximatifs. Par ailleurs, il n'existe pas de modèle pour le comportement de mélange de fibres et de sphères. Ce sont pourtant ces suspensions complexes qui représentent le mieux la majorité des écoulements de composite que l'on retrouve dans l'industrie.

Les simulations numériques ne sont pas en reste, avec une multitude d'études consacrées aux interactions entre fluide et structure dans les suspensions. Ces études se divisent en deux catégories. Dans les simulations "macro", le fluide et les particules sont considérées comme un fluide homogène. Les particules sont décrites par un ensemble de paramètres macroscopiques (concentration locale, tenseur d'orientation). Ce sont les modèles précédemment présentés qui sont utilisés. La validité des résultats obtenus est donc à l'image de celle des lois de comportement utilisées : pertinents pour des suspensions faiblement concentrée, et trop approximatifs pour les mélanges plus complexes.

Dans les simulations "micro" on étudie l'évolution du fluide et de chacune des particules. Ces simulations renseignent précisément sur les arrangements des particules, et l'évolution du fluide à leur proximité. Elles doivent donc permettre, au moins en théorie, de reconstruire des lois de comportements plus précises pour les suspensions complexes, par homogénéisation. Cependant la majorité de ces études sont consacrées aux suspensions de sphères. Par ailleurs, la plupart ne considèrent que des suspensions en deux dimensions, occultant la troisième dimension qui joue un rôle fondamental dans l'étude de l'orientation des fibres. Les rares études en trois dimensions n'impliquent qu'un petit nombre de particules.

Ainsi, malgré une littérature abondante, les simulations à l'échelle "micro" n'ont fait qu'effleurer le problème des écoulements de suspensions concentrées, en trois dimensions. L'étude proposée dans ce document présente une méthode originale pour simuler de tels écoulements, en trois dimensions, avec des concentrations plus importantes, permettant d'en déduire par homogénéisation des lois de comportement macroscopique.

Chapitre 2

Evolution d'une particule solide dans une matrice fluide

2.1 Introduction

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'évolution d'une particule solide dans une matrice fluide newtonienne. C'est un problème d'interaction fluide-structure. La particule solide subit des efforts hydrodynamiques qui modifient sa trajectoire. Réciproquement, la façon dont évolue la particule au sein du fluide va modifier l'écoulement de ce dernier. Nous avons mis au point une méthode numérique pour étudier ce problème. Notre approche est pleinement multi-domaine. Nous assimilons la particule solide à une seconde phase fluide (non miscible avec la première) qui se comporte comme un corps solide. Ce chapitre est consacré à la présentation de cette méthode. Deux points techniques seront abordés :

1. la description et le transport de la particule solide (en tant que sous-domaine).
2. le traitement de la phase solide dans le calcul des champs de vitesse et pression.

Nous avons utilisé cet outil de simulation pour étudier la rotation d'une sphère puis d'une fibre dans un écoulement de cisaillement. Les résultats obtenus seront présentés en fin de chapitre.

2.2 Les équations mécaniques

Nous étudions l'écoulement d'un fluide chargé soumis à un cisaillement (macroscopique) $\dot{\gamma}$ imposé, occupant le domaine spatial Ω , carré ou cube unité selon la dimension. Le domaine spatial Ω s'écrit comme la réunion d'un sous-domaine fluide Ω_f et d'un sous-domaine solide Ω_s . Le domaine Ω_s correspond à l'espace occupé par une particule solide. Le domaine spatial Ω est fixe. En revanche, Ω_f et Ω_s évoluent au cours du temps. Γ est la frontière extérieure du domaine de calcul. $\partial\Omega_s$ désigne l'interface fluide-particule.

La particule solide est décrite par plusieurs paramètres. Dans le cadre de cette thèse nous avons considéré des particules de forme sphérique, ellipsoïdale, et cylindrique de révolution. Pour décrire le positionnement de la particule dans l'espace, seuls deux paramètres sont nécessaires : le barycentre \vec{X} particule et l'orientation \vec{p} de la particule.

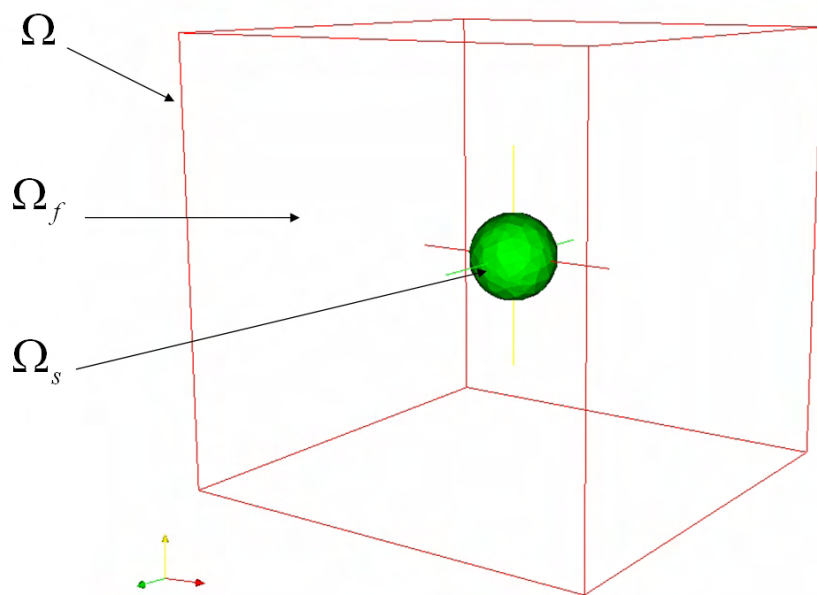


FIGURE 2.1 – Le domaine de calcul $\Omega = \Omega_f(t) \cup \Omega_s(t)$

Notons que l'orientation n'est pas indispensable dans le cas d'une sphère.

La cinétique globale du système est donnée par :

- la donnée du champ de vitesse \vec{u} et de pression p en tout point du domaine fluide Ω_f .
- la vitesse \vec{U} du barycentre et sa vitesse de rotation $\vec{\omega}$.

Nous introduisons également la masse M de la particule et $\underline{\underline{J}}$ sa matrice d'inertie.

2.2.1 La matrice fluide

La matrice fluide est supposée ici newtonienne incompressible, mais il sera par la suite possible d'étudier des matrices obéissant à d'autres lois de comportement (pseudoplastiques, viscoélastiques, etc ..). Nous étudions le comportement des suspensions en injection. Par conséquent, nous ferons les approximations classiques liées à ce type d'écoulement : nous négligeons les forces d'inertie et de gravité à la fois pour le fluide et les particules. Les équations régissant l'évolution de la matrice fluide sont donc les suivantes :

■ sur Ω_f :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega_f \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega_f \quad (2.2)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \quad \text{sur} \quad \Omega_f \quad (2.3)$$

2.2.2 La particule solide

La particule solide obéit aux équation de la mécanique des solides. L'évolution de $\vec{X}(t)$ est donnée par la conservation de la quantité de mouvement :

$$M \frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} = M \frac{d\vec{U}}{dt} = \vec{F}_h + M\vec{g} \quad (2.4)$$

L'évolution de $\vec{p}(t)$ est donnée par la conservation du moment cinétique :

$$\frac{d(\underline{J}\vec{\omega})}{dt} = \vec{\Gamma}_h \quad (2.5)$$

\vec{F}_h et Γ_h désignent la force hydrodynamique et le couple associé exercés sur la particule. Si on néglige les forces de gravité et d'inertie, on trouve que la composante totale des forces et du couple provenant des interactions hydrodynamiques est nulles, c'est à dire :

$$\vec{F}_h = \int_{\partial\Omega_s} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext} d\Gamma \approx \vec{0} \quad (2.6)$$

$$\vec{\Gamma}_h = \int_{\partial\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) d\Gamma \approx \vec{0} \quad (2.7)$$

2.2.3 Conditions aux limites

Sur la frontière Γ du domaine Ω nous utilisons des conditions aux limites de Dirichlet ou Neumann . En dimension 3, Γ est constitué de 6 faces numérotées de 1 à 6, comme c'est indiqué sur la figure 2.2. Nous définissons $\partial\Omega_f(t^n) = \Gamma \cup \partial\Omega_s(t^n)$ pour tout t^n la frontière totale du domaine fluide et nous nous donnons une partition $\{\partial\Omega_{Ne}(t^n), \partial\Omega_{Dir}(t^n)\}$ de $\partial\Omega_f(t^n)$. Par définition, nous avons :

$$\partial\Omega_{Ne}(t^n) \cup \partial\Omega_{Dir}(t^n) = \partial\Omega_f(t^n) \quad \text{et} \quad \partial\Omega_{Ne}(t^n) \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) = \emptyset$$

$\partial\Omega_{Dir}$ désigne la partie de la frontière sur laquelle nous imposons des conditions aux limites de type Dirichlet, c'est-à-dire que l'on impose une valeur donnée au champ de vitesse. A l'interface entre le fluide et la particule solide $\partial\Omega_s$, la condition de Dirichlet traduira la condition de mouvement de corps rigide de la particule :

$$\forall \vec{x} \in \partial\Omega_s(t^n) \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) \quad \vec{u}(\vec{x}) = \vec{U} + \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X}) \quad (2.8)$$

$\partial\Omega_{Ne}(t^n)$ désigne l'autre partie de la frontière, sur laquelle nous imposons une condition de type Neumann. Dans notre cas, cela revient à imposer une contrainte donnée sur $\partial\Omega_{Ne}(t^n)$.

2.3 Forme variationnelle et discrétisation

Connaissant les équations mécaniques du problème et les conditions limites, nous pouvons à présent passer à la discrétisation du problème et à la résolution. Nous considérons

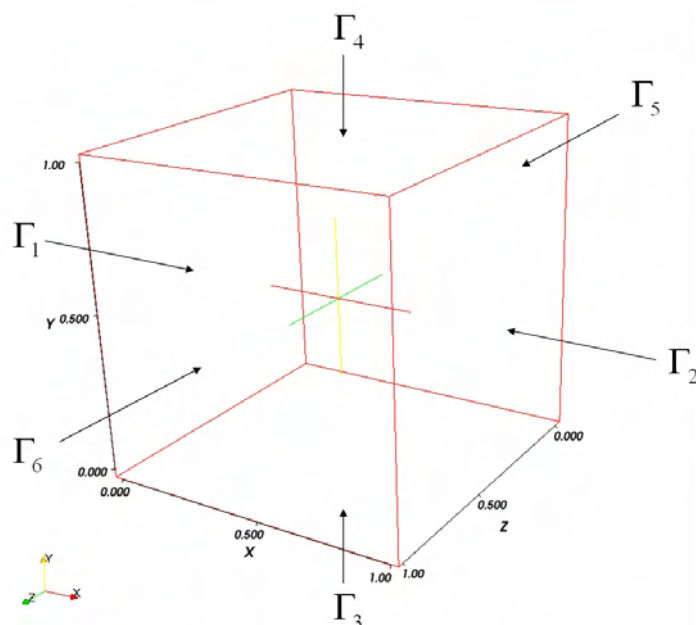


FIGURE 2.2 – Numérotation des faces du cube

ici un problème d'évolution, ce qui signifie que nous aurons à la fois une discrétisation en temps et en espace. L'intervalle de temps $[0, T]$ pendant lequel nous étudions notre problème sera découpé en N intervalles de durée $dt = T/N$. Cette discrétisation est donnée par $N + 1$ instants $\{t_0 = 0; \dots; t^n; t^{n+1}; \dots; t^N = T\}$. A chaque instant t^n , nous avons alors un problème stationnaire à résoudre sur le domaine spatial Ω .

Il existe 2 grandes catégories de techniques pour gérer les problèmes d'interaction fluide-structure avec une interface Γ_s mobile. Ce sont les techniques lagrangiennes (ou ALE) d'une part, et eulérienne (ou par domaine fictif) d'autre part.

Les **techniques lagrangiennes** reviennent à résoudre successivement les 2 sous-problèmes couplés suivants :

- Calcul du champ de vitesse fluide $\vec{u}(t^n)$ sur $\Omega_f(t^n)$, en fonction de la position $(\vec{X}(t^n), \vec{p}(t^n))$ de la particule à l'instant t^n et de sa cinétique $(\vec{U}^{n-1}, \vec{\omega}^{n-1})$ à l'instant t^{n-1} .
- Calcul de la vitesse de la particule à l'instant t^n puis de sa position à l'instant t^{n+1} , à partir des forces et couples hydrodynamiques exercées par le fluide (ou du champ de vitesse, voir plus loin) à l'instant t^n .

Seul le domaine fluide $\Omega_f(t^n)$ est discrétisé. On a un suivi de l'évolution de la frontière $\partial\Omega_s$, puisque les interfaces sont maillées. A chaque instant les noeuds du maillage sont déplacés avec la vitesse du fluide, pour obtenir le maillage de Ω_f à l'instant suivant. On a donc recours à chaque instant à une opération de remaillage. Cette opération est longue et indispensable (pour conserver une description correcte de l'interface). Cette approche est peu utilisée principalement pour cette raison. Par ailleurs, bien qu'il n'y ait pas de grosses difficultés techniques, la gestion des conditions aux limites à l'interface et la mise à jour des vitesses de la particule sont des opérations fastidieuses à effectuer. En réalité,

les difficultés liées à ce type d'approche sont vraiment pénalisantes lorsque l'on considère un grand nombre de particules.

Les **méthodes de domaine fictif**, consistent à étendre la formulation au domaine fictif Ω entier. Cette technique revient à remplacer la particule solide par du fluide, auquel nous devons imposer un comportement de corps rigide. L'interface $\partial\Omega_s$ n'apparaît plus explicitement dans le problème, et nous devons en contrepartie introduire une méthode pour décrire et transporter les domaines solide et fluide au cours du temps. On parle de technique eulérienne, car il est possible de travailler avec un maillage fixe (le maillage ne suit plus la matière). C'est cette démarche que nous avons adoptée dans cette thèse.

Nous donnerons dans un premier temps la formulation variationnelle classique, écrite sur Ω_f , utilisée dans la technique lagrangienne. Ensuite, nous étendrons cette formulation au domaine fictif Ω . Cette formulation fera apparaître les champs discrets $\{\vec{U}(t^n), \vec{\omega}(t^n)\}$. Nous présenterons alors une dernière formulation proposée par [PSJ⁺00] et utilisée pendant cette thèse, et dans laquelle tous les termes discrets disparaissent des équations. Enfin nous décrirons notre technique pour décrire et transporter la phase solide.

2.3.1 Forme variationnelle en (\vec{u}, p) sur le domaine fluide Ω_f

Le problème que l'on résout ici sur Ω_f est un problème de Stokes incompressible. C'est un problème bien connu et nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de référence, pour le détail de la méthode. Nous introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$$\mathcal{V}^n = H^1(\Omega_f(t^n))^3 \quad \text{et} \quad \mathcal{P}^n = L^2(\Omega_f(t^n))$$

La formulation variationnelle de notre problème s'écrit alors :

■ Formulation variationnelle sur $\mathcal{V}^n \times \mathcal{P}^n$:

- trouver $(\vec{u}(t^n), p(t^n)) \in \mathcal{V}^n \times \mathcal{P}^n$ tel que pour tout $(\vec{v}, q) \in \mathcal{V}^n \times \mathcal{P}^n$ on ait :

$$\begin{aligned} 0 &= 2\eta_f \int_{\Omega_f(t^n)} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega_f(t^n)} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\ &+ \int_{\partial\Omega_f(t^n) \cap \partial\Omega_{Ne}} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \cdot \vec{v} d\Gamma \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$0 = \int_{\Omega_f(t^n)} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega \quad (2.10)$$

$$\vec{u}(t^n) = \vec{u}_\Gamma \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) \quad (2.11)$$

$$\vec{u}(t^n) = \vec{U}(t^{n-1}) + \vec{\omega}(t^{n-1}) \times (\vec{x} - \vec{X}(t^n)) \quad \text{si } \vec{x} \in \partial\Omega_s(t^n) \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) \quad (2.12)$$

Elle peut ensuite être discrétisée à l'aide d'une méthode d'éléments finis mixte. Nous ne rentrons pas dans le détail de la discrétisation pour cette formulation car elle n'est pas utilisée telle quelle.

2.3.2 Extension des équations au domaine total Ω

Pour adopter une démarche eulérienne, nous devons étendre la forme variationnelle précédente au domaine Ω entier. Pour cela nous devons :

- étendre la définition des champs (\vec{u}, p) et les espaces fonctionnels associés à tout Ω
- étendre les intégrales sur Ω_f des équations (2.9) et (2.10) à Ω
- faire disparaître les termes aux interfaces $\partial\Omega_s$.

2.3.2.1 Extension des champs (\vec{u}, p) au domaine solide

On peut étendre sans aucune condition la définition de la pression p à Ω . L'espace \mathcal{P}^n est simplement étendu à Ω entier. Lorsque l'on étend la définition du champ de vitesse fluide, il est impératif de prendre en compte toutes les spécificités du mouvement des particules dans sa définition. Pour le champ de vitesse dans les particules, on doit retenir la condition de mouvement de corps rigide, exprimée cette fois-ci pour tout point de la particule :

$$\vec{u}(\vec{x}, t^n) = \vec{U}(t^n) + \vec{\omega}(t^n) \times (\vec{x} - \vec{X}(t^n)) \quad \text{sur } \Omega_s \quad (2.13)$$

A ce stade de la reformulation, nous incorporons la condition (2.13) à l'espace fonctionnel du champ de vitesse. Nous allons donc écrire notre formulation sur les espaces suivants :

$$\mathcal{W}^n = \{ \vec{v} \in \mathcal{V}^n \mid \vec{v}(\vec{x}) = \vec{U}_i(t^n) + \vec{\omega}_i(t^n) \times (\vec{x} - \vec{X}_i(t^n)) \quad \forall \vec{x} \in \Omega_s^i(t^n) \}$$

$$\mathcal{Q} = L^2(\Omega)$$

où maintenant $\mathcal{V}^n = H^1(\Omega(t^n))^3$

2.3.2.2 Extension des intégrales à Ω

Nous devons à présent reformuler les équations (2.9)-(2.12) pour écrire la forme variationnelle du problème en vitesse-pression sur Ω entier. En pratique, on doit étendre les intégrales des équations (2.9)-(2.12), définies sur Ω_f (respectivement $\partial\Omega_f$) à Ω_s entier (respectivement Γ). Nous allons utiliser un résultat de mécanique qui affirme que la condition de mouvement de corps rigide (2.13) est équivalente à la condition d'indéformabilité :

■ **Proposition 1 :**

Soit Ω_s un sous-domaine de \mathbb{R}^3 sur lequel nous définissons un champ vectoriel \vec{v} de classe \mathcal{C}^2 . Alors il y a équivalence entre la condition de mouvement de corps rigide et la condition d'indéformabilité :

$$\exists (\vec{U}, \vec{\omega}) \in (\mathbb{R}^3)^2 \text{ et } \vec{X} \in \Omega_s \text{ tq } \forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \vec{v}(\vec{x}) = \vec{U} + \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X}) \iff \forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) = 0$$

Démonstration :

Dans le sens direct, la démonstration est triviale. Donnons nous un repère orthonormé muni d'une base cartésienne $(0, \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$. Notons respectivement $\vec{x} = (x, y, z)$, $\vec{X} = (X, Y, Z)$ les coordonnées des vecteurs position d'un point quelconque de Ω_s et du barycentre. De même nous notons $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ la vitesse en un point de Ω_s , ainsi que $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z)$ et $\vec{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ les champs dont nous supposons l'existence. On a alors :

$$v_x = U_x + \omega_y(z - Z) - \omega_z(y - Y) \quad (A.1)$$

$$v_y = U_y + \omega_z(x - X) - \omega_x(z - Z) \quad (A.2)$$

$$v_z = U_z + \omega_x(y - Y) - \omega_y(x - X) \quad (A.3)$$

Pour tout couple $(i, j) \in \{x, y, z\}$ nous avons $\dot{\epsilon}_{ij}(\vec{v}(\vec{x})) = 0$. Par exemple, pour $i = x$ et $j = z$, nous avons :

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{xz}(\vec{v}(\vec{x})) &= \frac{1}{2}(\partial_x v_z + \partial_z v_x) \\ &= \frac{1}{2}(-\omega_y + \omega_y) \\ &= 0 \end{aligned}$$

D'où le résultat.

Pour le sens indirect, nous cherchons à priori v_x, v_y et v_z comme des fonctions de (x, y, z) . La condition $\dot{\epsilon}(\vec{v}) = 0$ impose :

$$\dot{\epsilon}_{xx} = 0 \implies \partial_x v_x = 0$$

$$\dot{\epsilon}_{yy} = 0 \implies \partial_y v_y = 0$$

$$\dot{\epsilon}_{zz} = 0 \implies \partial_z v_z = 0$$

v_x ne dépend donc pas de x et nous cherchons maintenant v_x sous la forme $v_x(y, z)$. De même nous avons $v_y(x, z)$ et $v_z(x, y)$. Nous avons de plus :

$$\dot{\epsilon}_{xy} = 0 \implies \partial_y v_x(y, z) = -\partial_x v_y(x, z)$$

Nous avons donc une fonction de (y, z) qui est égale à une fonction de (x, z) . Par suite ces deux fonctions ne dépendent que de z . Il existe donc une fonction $\alpha(z)$ telle que :

$$\partial_y v_x(y, z) = -\partial_x v_y(x, z) = \alpha(z)$$

Il existe donc 2 autres fonctions de z $F(z)$ et $G(z)$ telles que :

$$\forall (x, y, z) \begin{cases} v_x(y, z) = \alpha(z)y + F(z) \\ v_y(x, z) = -\alpha(z)x + G(z) \end{cases}$$

De même, nous avons :

$$\dot{\epsilon}_{xz} = 0 \implies \partial_z v_x(y, z) = -\partial_x v_z(x, y) = \frac{d\alpha}{dz}y + \frac{dF}{dz}$$

Par suite, les deux dérivées ne dépendent que de y et il existe donc deux constantes β et λ telles que :

$$\frac{d\alpha}{dz} = \beta \quad \text{et} \quad \frac{dF}{dz} = \lambda$$

Il existe donc deux autres constantes γ et δ telles que :

$$\forall z \begin{cases} \alpha(z) = \beta z + \delta \\ F(z) = \lambda z + \gamma \end{cases}$$

On en déduit alors l'existence d'une fonction de y $H(y)$ telle que :

$$\forall (x, y, z) \begin{cases} v_x(y, z) = \beta y z + \delta y + \lambda z + \gamma \\ v_y(x, z) = -\beta x z - \delta x + G(z) \\ v_z(x, y) = -\beta x y - \lambda x + H(y) \end{cases}$$

Enfin, nous avons :

$$\dot{\epsilon}_{yz} = 0 \implies \partial_z v_y(x, z) = -\partial_y v_z(x, y) = \text{fonction de } x$$

Ce qui se réécrit :

$$-\beta x + \frac{dG}{dz} = \beta x - \frac{dH}{dy}$$

Soit :

$$\forall x \quad 2\beta x - \left(\frac{dH}{dy} + \frac{dG}{dz} \right) = 0$$

D'où l'on tire $\beta = 0$ et l'existence d'une autre constante μ telle que :

$$\frac{dH}{dy} = -\frac{dG}{dz} = \mu$$

On introduit enfin les constantes κ et η et nous avons :

$$\forall (y, z) \quad \begin{cases} G(z) &= -\mu z + \kappa \\ H(y) &= \mu y + \eta \end{cases}$$

Finalement, nous avons :

$$\forall (x, y, z) \quad \begin{cases} v_x(y, z) &= \delta y + \lambda z + \gamma & (A.4) \\ v_y(x, z) &= -\delta x - \mu z + \kappa & (A.5) \\ v_z(x, y) &= -\lambda x + \mu y + \eta & (A.6) \end{cases}$$

Or nous cherchons trois champs vectoriels constants \vec{U}, \vec{w} et $\vec{X} \in \Omega_s$ vérifiant les équations (A.1)-(A.3). Or, en réécrivant ces équations sous la forme suivante :

$$\forall (x, y, z) \quad \begin{cases} v_x &= \omega_y z - \omega_z y + (U_x - \omega_y Z + \omega_z Y) & (A.1) \\ v_y &= \omega_z x - \omega_x z + (U_y - \omega_z X + \omega_x Z) & (A.2) \\ v_z &= \omega_x y - \omega_y x + (U_z - \omega_x Y + \omega_y X) & (A.3) \end{cases}$$

On pose alors $\vec{\omega} = (\mu, \lambda, -\delta)$ et il nous reste à trouver \vec{U} et \vec{X} tels que :

$$\begin{cases} \gamma &= (U_x - \omega_y Z + \omega_z Y) \\ \kappa &= (U_y - \omega_z X + \omega_x Z) \\ \eta &= (U_z - \omega_x Y + \omega_y X) \end{cases}$$

Nous avons six inconnues et trois équations linéaires, donc notre problème est à première vue sous-contraint. Par contre nous avons la condition $\vec{X} \in \Omega_s$ qui est limitante. On choisit \vec{X} barycentre du sous domaine Ω_s . Par convexité du sous-domaine, il est clair que $\vec{X} \in \Omega_s$. \vec{X} vérifie :

$$\int_{\vec{x} \in \Omega_s} (\vec{X} - \vec{x}) d\Omega_s = 0$$

On pose alors \vec{U} tel que :

$$\begin{cases} U_x &= \gamma + \omega_y Z - \omega_z Y \\ U_y &= \kappa + \omega_z X - \omega_x Z \\ U_z &= \eta + \omega_x Y - \omega_y X \end{cases}$$

Ce qui termine la démonstration. \square

Ainsi, nous pouvons remplacer la condition (2.13) par la condition suivante :

$$\forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \dot{\epsilon}(\vec{u}(\vec{x}, t^n)) = 0 \tag{2.14}$$

Par suite, nous avons :

$$\forall \vec{v} \in \mathcal{W}^n \quad 2\eta_f \int_{\Omega_f(t^n)} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega = 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega \quad (2.15)$$

La proposition 2 regroupe plusieurs résultats qui découlent de la propriété d'indéformabilité des particules :

■ **Proposition 2 :**

Soit un sous-domaine Ω_s convexe et \vec{v} un champ vectoriel de classe \mathcal{C}^2 vérifiant la condition d'indéformabilité. \vec{U} , $\vec{\omega}$ et \vec{X} désignent les champs introduits à la proposition 1. Alors :

a - \vec{v} est incompressible sur Ω_s

b - $\text{rot}(\vec{v}) = \text{Constante} = 2 \vec{\omega}$ sur Ω_s

c - \vec{X} barycentre de $\Omega_s \Rightarrow \vec{v}(\vec{X}) = \vec{U}$ et $\vec{U} = \frac{1}{|\Omega_s|} \int_{\Omega_s} \vec{v}(\vec{x}) d\Omega_s$

Démonstration :

a - le résultat est direct : on a pour tout $\vec{x} \in \Omega_s$: $\partial_x v_x = \dot{\epsilon}_{xx} = 0$, ainsi que $\partial_y v_y = \partial_z v_z = 0$ d'où $\text{div} \vec{v} = 0$ □.

b - En prenant pour tout $\vec{x} \in \Omega_s$ le rotationnel de la condition de mouvement de corps rigide, il vient :

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{v} &= \vec{0} + \text{rot}(\vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X})) \\ &= \text{rot}(\vec{\omega} \times \vec{x}) \\ &= \vec{\omega} \cdot \text{div}(\vec{x}) - (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla}) \vec{x} \\ &= 2\vec{\omega} \end{aligned}$$

Cela signifie que la vitesse de rotation instantanée du solide occupant l'espace Ω_s est égale à la vorticit  de son champ de vitesse, qui est une constante sur Ω_s .□.

c - La condition de mouvement de corps rigide pour $\vec{x} = \vec{X}$ donne directement :

$$\vec{v}(\vec{X}) = \vec{U} + \vec{\omega} \times \vec{0} = \vec{U}$$

En int grant la condition de mouvement de corps rigide sur Ω_s , il vient :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_s} \vec{v}(\vec{x}) d\Omega_s &= \int_{\Omega_s} \vec{U} d\Omega_s + \int_{\Omega_s} \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X}) d\Omega_s \\ &= |\Omega_s| \cdot \vec{U} + \vec{\omega} \times \underbrace{\int_{\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) d\Omega_s}_{=\vec{0}} \end{aligned}$$

D'o  le r sultat. □

D'apr s la proposition 2- a, la condition de mouvement de corps rigide sur Ω_s entra ne l'incompressibilit . Nous avons alors :

$$\vec{u}(t^n) \in \mathcal{W}^n \Rightarrow \forall q \in \mathcal{Q} \quad \int_{\Omega_f(t^n)} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega \quad (2.16)$$

et pour tout $\vec{v} \in \mathcal{W}^n$:

$$\int_{\Omega_f(t^n)} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega = \int_{\Omega} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \quad (2.17)$$

2.3.2.3 Le terme à l'interface $\partial\Omega_s$

Il reste alors à reformuler les conditions limites pour que les termes définis sur $\partial\Omega_s$ n'apparaissent plus dans l'équation (2.9). Pour cela, on introduit la condition limite (2.12) sont simplement éliminés dans l'intégrale de surface sur $\partial\Omega_s$ car cette condition est prise en compte dans la définition de l'espace \mathcal{W}^n . Pour tout $\vec{v} \in \mathcal{W}^n$ nous avons :

$$\begin{aligned}
 \int_{\partial\Omega_s(t^n)} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \cdot \vec{v} d\Gamma &= \int_{\partial\Omega_s(t^n)} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \cdot (\vec{U}(t^{n-1}) + \vec{\omega}(t^{n-1}) \times (\vec{x} - \vec{X}(t^n))) d\Gamma \\
 &= \vec{U}(t^n) \cdot \int_{\partial\Omega_s(t^n)} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext} d\Gamma \\
 &\quad + \vec{\omega}(t^n) \cdot \int_{\partial\Omega_s(t^n)} (\vec{x} - \vec{X}(t^n)) \times (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) d\Gamma \\
 &= \vec{U}(t^n) \cdot \vec{F}_h(t^n) + \vec{\omega}(t^n) \cdot \vec{\Gamma}_h(t^n)
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Si on néglige les termes d'inertie et de gravité, on a $\vec{\Gamma}_h, \vec{F}_h \approx \vec{0}$ et ce terme s'annule.

2.3.2.4 Forme variationnelle sur $\mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$

Nous obtenons donc le problème variationnel suivant formulé sur le domaine fictif Ω tout entier :

■ Formulation variationnelle sur $\mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{W}^n &= \{ \vec{v} \in \mathcal{V}^n \mid \vec{v}(\vec{x}) = \vec{U}(t^{n-1}) + \vec{\omega}(t^{n-1}) \times (\vec{x} - \vec{X}(t^n)) \quad \forall \vec{x} \in \Omega_s(t^n) \} \\
 \mathcal{Q} &= L^2(\Omega)
 \end{aligned}$$

- trouver $(\vec{u}(t^n), p(t^n)) \in \mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$ tels que pour tout $(\vec{v}, q) \in \mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$ on ait :

$$\begin{aligned}
 0 &= 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\
 &\quad + \int_{\Gamma \cap \partial\Omega_{Ne}(t^n)} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \cdot \vec{v} d\Gamma
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega \tag{2.20}$$

$$\vec{u}(t^n) = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) \tag{2.21}$$

Cette formulation mérite quelques remarques :

- Les équations (2.19)-(2.21) correspondent à la résolution d'un problème de Stokes sur Ω tout entier. La particularité de notre problème (à savoir l'existence d'un sous-domaine Ω_s obéissant à un mouvement de corps rigide) apparaît seulement au niveau de l'espace fonctionnel (\mathcal{W}^n pour notre problème, au lieu de $H^1(\Omega)^3$ pour un problème de Stokes incompressible sur Ω).
- Bien que les équations auxquelles nous nous sommes ramenées soient simples et bien connues, leur résolution numérique n'est pas évidente. En effet, pour assurer l'existence et l'unicité de la solution sur $\mathcal{W}^n \times \mathcal{Q}$, nous devons vérifier que \mathcal{W}^n est bien un espace de Hilbert, ce qui n'est pas évident. Ensuite, au moment de la discrétisation du problème, nous devons construire un espace de dimension finie \mathcal{W}_h^n approchant l'espace infini \mathcal{W}^n . Il est alors nécessaire de se donner une base de cet espace, et c'est à ce niveau que réside la difficulté : d'une part il n'est pas évident de construire une base de \mathcal{W}_h^n à cause de la condition de rigidité, et d'autre part, cette base évolue à chaque instant (car Ω_s évolue).

2.3.3 Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda}, \vec{U}, \vec{w})$ sur Ω

L'espace \mathcal{W}^n ne convenant pas, il est nécessaire de reformuler notre problème sur un autre espace fonctionnel. Cela revient à sortir la condition de rigidité de l'espace et à la traiter comme une contrainte. La formulation variationnelle que l'on obtient, équivalente à la précédente, a été proposée pour la première fois par [GPP94]. En régime hydrodynamique, elle s'écrit :

■ Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s(t^n))^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^6$:

• trouver $(\vec{u}(t^n), \vec{\lambda}(t^n), p(t^n), \vec{U}(t^n), \vec{\omega}(t^n)) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s(t^n))^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^6$ tels que pour tout $(\vec{v}, \vec{\mu}, q, \vec{V}, \vec{\zeta}) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s(t^n))^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^6$ on ait :

$$\begin{aligned} 0 &= 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\ &+ \vec{U}(t^n) \cdot \vec{F}_h(t^n) + \vec{\omega}(t^n) \cdot \vec{\Gamma}_h(t^n) \\ &+ \int_{\Omega_s(t^n)} \vec{\lambda}(t^n) \cdot [\vec{v} - \vec{V} - \vec{\zeta} \times (\vec{x} - \vec{X})] d\Omega \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega \quad (2.23)$$

$$0 = \int_{\Omega_s(t^n)} \vec{\mu}(t^n) \cdot [\vec{u} - \vec{U} - \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X})] d\Omega \quad (2.24)$$

$$\vec{u}(t^n) = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n) \quad (2.25)$$

L'équivalence entre les deux formulations est justifiée par le théorème 2 de l'annexe A. Les espaces fonctionnels sur lesquels nous formulons notre problème ont les propriétés nécessaires pour assurer l'existence et l'unicité de la solution.

En contrepartie, nous avons rajouté plusieurs inconnues au problème variationnel : les champs cinétiques discrets $\{\vec{U}, \vec{\omega}\}$ et le multiplicateur de Lagrange $\vec{\lambda}$ défini sur $H^1(\Omega_s(t^n))^3$. En fait on peut étendre sa définition à $H^1(\Omega)^3$, en le prenant simplement nul sur $\Omega \setminus \Omega_s(t^n)$.

La force \vec{F}_h et le couple $\vec{\Gamma}_h$ des forces hydrodynamiques peuvent être éliminés en utilisant les relations (2.4) et (2.5). Si on néglige l'inertie et la gravité cette contribution disparaît.

On peut remarquer que maintenant on obtient à la même étape le champ de vitesse dans le fluide et dans la particule. Par conséquent, par souci de simplicité, on va enlever dans la suite l'indicateur du pas de temps n .

La résolution directe de la forme discrétisée de ce problème n'est pas évidente, et les différents auteurs qui l'utilisent ont recours à des méthodes à pas fractionnés, qui deviennent très vite compliquées et difficiles à manier.

C'est pourquoi d'autres auteurs, principalement [PSJ⁺00] et [DGMN03], ont reformulé le problème en faisant disparaître les inconnues discrètes $\{\vec{U}, \vec{\omega}\}$.

2.3.4 Forme variationnelle en $\{\vec{u}, p, \vec{\lambda}\}$ sur Ω

Il est possible d'aller plus loin dans l'approche par domaines fictifs en faisant disparaître les inconnues discrètes du problème variationnel précédent. Les termes à reformuler sont

ceux qui portent sur la condition de mouvement de corps rigides.

2.3.4.1 Contrainte d'indéformabilité de Ω_s

Pour faire disparaître les termes discrets, nous utilisons la contrainte d'indéformabilité au lieu de la contrainte de mouvement de corps rigide. Pour être imposée, cette contrainte nécessite l'utilisation d'un multiplicateur de Lagrange ayant la dimension d'un tenseur. En pratique, nous utilisons plutôt la condition d'indéformabilité équivalente :

$$\underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \Omega_s \quad \iff \quad \nabla \cdot (\underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u})) = \vec{0} \quad \forall \vec{x} \in \Omega_s \text{ et } \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u}) \cdot \vec{n} = \vec{0} \quad \text{sur } \partial\Omega_s \quad (2.26)$$

Ainsi, nous pouvons travailler avec un multiplicateur de lagrange $\vec{\lambda}$ qui a la dimension d'un vecteur, et la forme faible de cette condition est donc :

$$\int_{\Omega_s(t^n)} \vec{\lambda} \nabla \cdot (\underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v})) d\Omega = - \int_{\Omega_s(t^n)} \underline{\nabla \vec{\lambda}} : \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v}) d\Omega + \underbrace{\int_{\partial\Omega_s(t^n)} \vec{\lambda} \cdot (\underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v}) \cdot \vec{n}) d\Gamma}_{=0} \quad (2.27)$$

De plus, les propriétés de symétrie des tenseurs en jeu impliquent :

$$\int_{\Omega_s(t^n)} \underline{\nabla \vec{\lambda}} : \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v}) d\Omega = \int_{\Omega_s(t^n)} \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{\lambda}) : \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{v}) d\Omega \quad (2.28)$$

2.3.4.2 Formulation forte continue équivalente pour un corps solide

L'idée est de passer de la formulation discrète (2.4) et (2.5) à une formulation continue sur Ω_s . Pour cela on considère que le corps solide est un fluide qui satisfait la contrainte d'indéformabilité (2.26) et la phase solide Ω_s est alors régie par les équations suivantes :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.30)$$

$$\nabla \cdot (\underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u})) = \vec{0} \quad \text{dans } \Omega_s \quad \text{et} \quad \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{u}) \cdot \vec{n} = \vec{0} \quad \text{sur } \partial\Omega_s \quad (2.31)$$

auxquelles il faut ajouter les relations de continuité des vitesses et des contraintes normales, $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}$, à l'interface $\partial\Omega_s$.

Finalement la contrainte dans la particule est donnée par

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + \underline{\dot{\epsilon}}(\vec{\lambda}) \quad (2.32)$$

où l'on voit que le multiplicateur de Lagrange $\vec{\lambda}$ donne la contrainte qu'il faut appliquer au domaine Ω_s pour qu'il ne se déforme pas.

2.3.4.3 Formulation faible continue équivalente

On obtient une nouvelle (et dernière) formulation variationnelle, sans les inconnues discrètes $\{\vec{U}, \vec{\omega}\}$:

■ Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$:

• trouver $(\vec{u}, \vec{\lambda}, p) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ tels que pour tout $(\vec{v}, \vec{\mu}, q) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ on ait :

$$0 = 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) \, d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} \, d\Omega + \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) \, d\Omega \quad (2.33)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} \, d\Omega \quad (2.34)$$

$$0 = \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\mu}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \, d\Omega \quad (2.35)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir} \quad (2.36)$$

Nous pouvons faire les constatations suivantes :

- les deux premiers termes de (2.33) sont étendus au domaine Ω , car la contrainte d'informabilité implique le tenseur des déformations est nul dans Ω_s .
- La forme variationnelle obtenue peut-être résolue directement. La taille du système linéaire discret obtenu est alors considérablement augmenté du fait du multiplicateur de Lagrange. En effet, le multiplicateur de Lagrange est défini par $3N$ inconnues, soit autant que le champ de vitesse. La résolution directe conduit ainsi à un système linéaire comprenant $7N$ inconnues au lieu de $4N$. Pour éviter d'augmenter le nombre d'inconnues, il est d'usage de recourir à une méthode approchée pour imposer la contrainte de rigidité. La première méthode consiste à simplement pénaliser le lagrangien. La seconde, plus précise, consiste à calculer le multiplicateur de Lagrange par une méthode itérative. L'algorithme d'Uzawa, que l'on utilise, nécessite le rajout d'un terme de pénalisation dans le lagrangien pour converger. On parle alors de méthode de lagrangien augmenté.
- toutes les intégrales sont exprimées sur Ω entier, sauf l'intégrale du terme de rigidité, exprimée sur Ω_s . Il est néanmoins possible de se ramener à une intégrale sur le domaine Ω entier en introduisant une fonction caractéristique \mathbb{I}_{Ω_s} , définie par :

$$\mathbb{I}_{\Omega_s}(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_s \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.37)$$

Le calcul et le transport de cette fonction seront abordés dans la section suivante.

2.3.5 Forme variationnelle en (\vec{u}, p) sur Ω

Nous présentons ici les deux formulations en (\vec{u}, p) que nous avons utilisées. La première méthode consiste à pénaliser les déformations de la phase solide Ω_s dans le lagrangien du problème. C'est la méthode qui a été utilisée dans la thèse de A. Megally [Meg05]. Nous l'avons remplacé par une méthode de lagrangien augmenté, plus robuste et plus précise.

2.3.5.1 Méthode de pénalisation du lagrangien

La méthode de pénalisation est une méthode approchée pour déterminer la solution d'un problème de minimisation de fonctionnelle sous contrainte. Nous rappelons les principaux résultats sur les méthodes de pénalisation dans le théorème 3 de l'annexe A. On ajoute à la fonctionnelle sans contrainte un terme strictement positif, qui dans notre cas, s'écrit :

$$\mathcal{L}_{\eta_s}(\vec{v}, q) = \mathcal{L}(\vec{v}, q) + \eta_s \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(v) d\Omega$$

\mathcal{L}_{η_s} est le lagrangien pénalisé de notre problème. La solution $(\vec{u}_{\eta_s}, p_{\eta_s})$ qui minimise \mathcal{L}_{η_s} est une solution approchée du problème contraint. la solution $(\vec{u}_{\eta_s}, p_{\eta_s})$ est d'autant plus proche de la solution exacte que la constante η_s est grande. Avec une méthode de pénalisation, nous avons la formulation variationnelle suivante :

■ Lagrangien pénalisé : Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$:

- trouver $(\vec{u}, p) \in H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ tels que pour tout $(\vec{v}, q) \in H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ on ait :

$$\begin{aligned} 0 &= 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\ &+ 2\eta_s \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} d\Omega \quad (2.39)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir} \quad (2.40)$$

Le facteur de pénalisation, η_s , peut-être interprété comme une viscosité "solide", et le problème résolu est simplement un problème de Stokes multi-domaine incompressible,

avec comme viscosité multi-domaines :

$$\eta = \eta_s \mathbb{I}_{\Omega_s} + \eta_f (\mathbb{I} - \mathbb{I}_{\Omega_s}) \quad (2.41)$$

Ainsi, cette approche revient à remplacer les solides par des fluides très visqueux occupant le même domaine. On prend en général, une viscosité solide de 100 à 1000 fois plus grande que la viscosité fluide. En pratique cette méthode fonctionne bien lorsque il y a peu de particules. Avec un grand nombre de particules, la résolution du problème par éléments finis n'est possible qu'avec un facteur de pénalisation faible. En effet, l'utilisation d'un facteur de pénalisation trop grand détériore le conditionnement du système discret que l'on résout. L'indéformabilité des particules n'est alors pas bien imposée, et la solution obtenue est trop loin de la solution du problème avec contrainte. Pour palier à ce problème, nous sommes revenus à la formulation avec multiplicateur de Lagrange, que nous calculons par une méthode itérative.

2.3.5.2 Calcul du multiplicateur de Lagrange $\vec{\lambda}$ par un algorithme d'Uzawa

Pour trouver un point selle du lagrangien de notre problème, on peut utiliser une méthode itérative pour calculer le multiplicateur, et se ramener ainsi, à chaque itération, à la résolution d'un problème en vitesse-pression standard. L'algorithme que nous avons utilisé est un algorithme d'Uzawa. Il est rappelé en annexe A. Malheureusement, il est impossible de garantir la convergence de cet algorithme en utilisant le lagrangien tel que nous l'avons présenté. Il est nécessaire de combiner l'algorithme d'Uzawa avec la pénalisation du lagrangien : on parle alors de méthode de lagrangien augmenté.

2.3.5.3 Méthode de lagrangien augmenté

La méthode de lagrangien augmenté est réexpliquée en annexe A. Dans notre cas, une méthode de lagrangien augmentée résolue par un algorithme d'Uzawa s'écrit à tout instant t^n :

- Initialisation : on se donne $\vec{\lambda}_0 \in H^1(\Omega)^3$ arbitrairement fixé. En pratique nous prenons $\vec{\lambda}_0 = \vec{0}$.
- Incrément : Connaissant $\vec{\lambda}_k$ on calcule (\vec{u}_k, p_k) solution de la forme variationnelle suivante avec η qui suit la loi de mélange (2.41) :

■ Lagrangien augmenté : Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$:

• trouver $(\vec{u}_k, p_k) \in H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ tels que pour tout $(\vec{v}, q) \in H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ on ait :

$$-\int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}_k) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega = 2 \int_{\Omega} \eta (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_k) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v})) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \quad (2.42)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}_k d\Omega \quad (2.43)$$

$$\vec{u}_k = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir} \quad (2.44)$$

$$\vec{\lambda}_{k+1} = \vec{\lambda}_k + \rho \mathbb{I}_{\Omega_s} \vec{u}_k \quad 0 < \rho < 4\eta_s \quad (2.45)$$

• Critère d'arrêt : lorsque

$$\int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_k) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_k) d\Omega < \epsilon \quad \text{avec } \epsilon \ll 1.$$

Ainsi, à chaque pas de temps, on résout une succession de problèmes en vitesse-pression, jusqu'à ce que la solution obtenue soit suffisamment proche de la solution cherchée.

2.3.6 Discrétisation du problème en (\vec{u}, p) sur Ω

Nous discrétisons le problème (2.42)-(2.44) à l'aide d'une méthode d'éléments finis. Ceci consiste à définir des espaces fonctionnels de dimensions finies \mathcal{V}_h et \mathcal{Q}_h proches de $H^1(\Omega)^3$ et \mathcal{Q} de dimensions infinies. La solution (\vec{u}_k, p_k) du problème (2.42)-(2.44) est ainsi approchée par $(\vec{u}_k^h, p_k^h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h$.

Le domaine Ω est discrétisé. Nous introduisons un maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$, formé d'un ensemble de noeuds et d'éléments disjoints. La réunion des éléments K du maillage constitue le domaine discret Ω_h :

$$\Omega_h = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h(\Omega)} K$$

Nous désignons par $\mathbb{I}_{\Omega_s}^h$ la fonction définie sur le maillage qui approche \mathbb{I}_{Ω_s} . Le problème discret s'écrit alors (à t^n et k donnés) :

• trouver $(\vec{u}_k^h(t^n), p_k^h(t^n)) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h$ tels que pour tout $(\vec{v}^h, q^h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h$ on ait :

$$\begin{aligned}
0 &= 2\eta_f \int_{\Omega_h} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_k^h(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}^h) d\Omega - \int_{\Omega_h} p_k^h(t^n) \nabla \cdot \vec{v}^h d\Omega \\
&+ \int_{\Omega_h} \mathbb{I}_{\Omega_s}^h \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}_k^h(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}^h) d\Omega + 2\eta_s \int_{\Omega_h} \mathbb{I}_{\Omega_s}^h \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_k^h(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}^h) d\Omega \\
0 &= \int_{\Omega} q^h \nabla \cdot \vec{u}_k^h(t^n) d\Omega \\
\vec{u}_k^h(t^n) &= \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir}(t^n)
\end{aligned}$$

Ces équations sont résolues sur le le MINI-élément P_1^+/P_1 [CM97, PC98] qui présente la particularité de vérifier les conditions de Brezzi-Babuska ou conditions "inf-sup" [ZT00]. De plus il requiert le moins de ressources mémoires et il est bien adapté à l'utilisation de solveurs itératifs qui sont nécessaires quand on doit résoudre des problèmes en 3D.

2.4 Description et transport de la phase solide

Nous avons introduit dans la section précédente la fonction caractéristique $\mathbb{I}_{\Omega_s(t^n)}$. Cette fonction permet d'étendre les intégrales définies sur $\Omega_s(t^n)$ à Ω entier en remarquant que pour tout champ w (scalaire, vectoriel ou tensoriel) nous avons :

$$\int_{\Omega_s(t^n)} w d\Omega = \int_{\Omega} \mathbb{I}_{\Omega_s(t^n)} w d\Omega \quad (2.46)$$

Elle permet de se ramener à une formulation variationnelle sur Ω entier. Dans notre méthode d'éléments finis, nous pouvons ainsi réaliser l'assemblage de la matrice de raideur sur Ω entier, et ce quel que soit l'espace occupé par Ω_s . En contrepartie, nous devons être en mesure de calculer cette fonction caractéristique à un instant donné, et de la transporter aux instants suivants.

Pour le calcul de la fonction caractéristique nous pouvons utiliser deux méthodes différentes. Une méthode de type "Volume of Fluid", qui permet de calculer une fonction P_0 (c'est-à-dire constante par élément). Cette méthode a été développée et utilisée durant la thèse d'A. Megally [Meg05]. Pour notre thèse, nous lui avons préféré une méthode de type courbe de niveau, ou "level set", qui conduit à une approximation P_1 (linéaire par élément) plus précise.

Pour transporter $\mathbb{I}_{\Omega_s(t^n)}$, nous utilisons une méthode particulière : à chaque instant, nous mettons à jour les positions et orientations discrètes des particules puis nous recalculons la fonction caractéristique à l'aide d'une fonction distance signée ("level-set").

2.4.1 Méthode de level-set pour la définition du domaine solide

La méthode "level set" permet de calculer une fonction caractéristique P_1 . Cela se fait en deux temps : dans un premier temps on calcule la fonction "level-set" associée au

sous-domaine Ω_s , puis on en déduit simplement la fonction caractéristique.

2.4.1.1 Définition de la fonction "level set"

On considère que $\partial\Omega_s \subset \Omega_s$. Il est possible de décrire le contours $\partial\Omega_s$ à l'aide d'une représentation implicite, en utilisant une courbe de niveau, donnée par la fonction scalaire $\alpha_s(\vec{x})$. La définition la plus générale pour une courbe de niveau décrivant $\partial\Omega_s$ est la suivante :

$$\forall \vec{x} \in \Omega \quad \begin{cases} \alpha_s(\vec{x}) = 0 & \text{si } \vec{x} \in \partial\Omega_s \\ \alpha_s(\vec{x}) > 0 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_s \setminus \partial\Omega_s \\ \alpha_s(\vec{x}) < 0 & \text{si } \vec{x} \in \Omega \setminus \Omega_s \end{cases} \quad (2.47)$$

L'interface est donc donnée par l'isovaleur nulle de la fonction $\alpha_s(\vec{x})$, et c'est la principale caractéristique de la fonction level-set. On voit par ailleurs que la définition d'une fonction courbe de niveau n'est pas unique. La définition de α_s se fait de manière à ce que son calcul soit simple, et que α_s soit aussi régulière que possible.

Nous décrivons maintenant les fonctions α_s que nous avons utilisé pour décrire les différents objets géométriques considérés dans nos exemples numériques. En général on choisit une courbe de niveau linéaire, de sorte que la fonction α soit P_1 (linéaire par élément). Dans notre application, dans la mesure où cette fonction n'est pas directement utilisée, il n'est pas nécessaire de la prendre linéaire.

2.4.1.2 Sphère

On considère une sphère de rayon R . On obtient une définition très simple de la fonction level-set. En effet, la frontière $\partial\Omega_{S(\vec{X},R)}$ d'une sphère de centre \vec{X} et de rayon R est définie par :

$$\partial\Omega_{S(\vec{X},R)} = \{ \vec{x} \in \Omega \mid d_{\vec{X}}(\vec{x}) = R \} \quad (2.48)$$

Avec $d_{\vec{X}}(\vec{x})$ la fonction distance au point \vec{X} :

$$\forall \vec{x} \in \Omega \quad d_{\vec{X}}(\vec{x}) = \|\vec{x} - \vec{X}\|^2 \quad (2.49)$$

Nous pouvons alors simplement définir une fonction level-set vérifiant la définition (2.47) en posant :

$$\forall \vec{x} \in \Omega \quad \alpha_s(\vec{x}) = R - d_{\vec{X}}(\vec{x}) \quad (2.50)$$

Nous avons représenté sur la figure 2.3 la fonction level-set ainsi définie, ainsi que l'isovaleur nulle ($\alpha_s = 0$) pour un disque (cas 2D).

2.4.1.3 Cylindre de révolution

Pour modéliser les fibres, de rayon R , de longueur L , de centre \vec{X} et d'orientation unitaire \vec{p} nous avons utilisé essentiellement une géométrie cylindrique de révolution, à

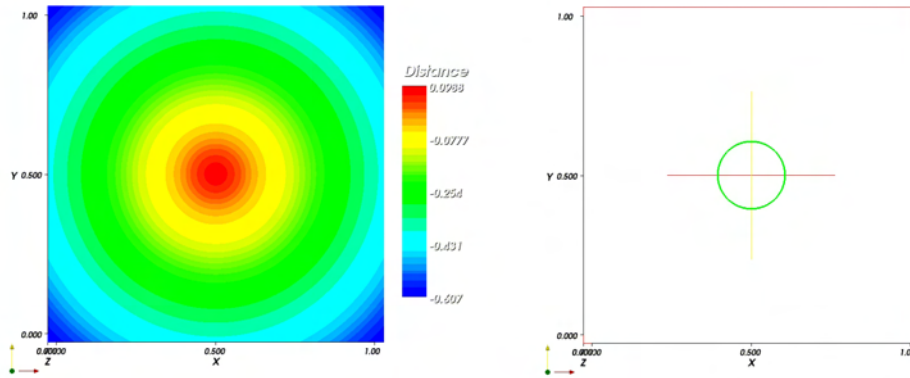


FIGURE 2.3 – fonction levelset α_s pour une sphere de rayon 0.05. A gauche : la valeur de α_s ; à droite : la surface d'équation $\alpha_s = 0$.

bouts arrondis. Nous avons utilisé la courbe de niveau suivante :

$$\alpha_s(\vec{x}) = \begin{cases} R - \|\vec{x} - (\vec{X} + \frac{L}{2}\vec{p})\| & (\vec{x}\cdot\vec{p}) > \frac{L}{2} \\ R - \|\vec{x} - (\vec{X} + (\vec{x}\cdot\vec{p})\vec{p})\| & -\frac{L}{2} < (\vec{x}\cdot\vec{p}) < \frac{L}{2} \\ R - \|\vec{x} - (\vec{X} - \frac{L}{2}\vec{p})\| & (\vec{x}\cdot\vec{p}) < -\frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.51)$$

Nous avons représenté sur la figure 2.4 la fonction level-set et l'isovaleur nulle pour un bâtonnet de Longueur 0.4 et de rayon 0.05 (en 2D et 3D) :

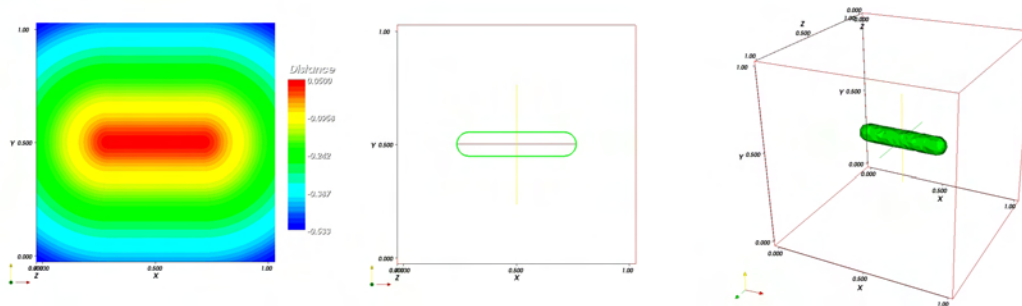


FIGURE 2.4 – fonction levelset α_s pour un bâtonnet de rayon 0.05 de longueur 0.4. A gauche : valeur de α_s (en 2D) ; surface d'équation $\alpha_s = 0$ en 2D (au milieu) et 3D (à droite).

2.4.1.4 Ellipsoïde

Nous avons également considéré des particules ellipsoïdales de révolution, d'orientation \vec{p} , de demi-grand axe $L/2$ et de demi-petit axe R (pour être cohérent avec les

dimensions des bâtonnets). Pour une telle particule, nous définissons la fonction level-set suivante :

$$\forall \vec{x} \in \Omega \quad \alpha_s(\vec{x}) = \frac{L}{2} - \sqrt{|(\vec{x} - \vec{X}) \cdot \vec{p}|^2 + \frac{L^2 |\vec{x}_\perp|^2}{4R^2}} \quad (2.52)$$

avec :

$$\vec{x}_\perp = \vec{x} - \vec{X} - ((\vec{x} - \vec{X}) \cdot \vec{p}) \vec{p} \quad (2.53)$$

L'isovaleur nulle de cette fonction a bien l'allure d'un ellipsoïde, comme nous pouvons le constater sur la figure 2.5 :

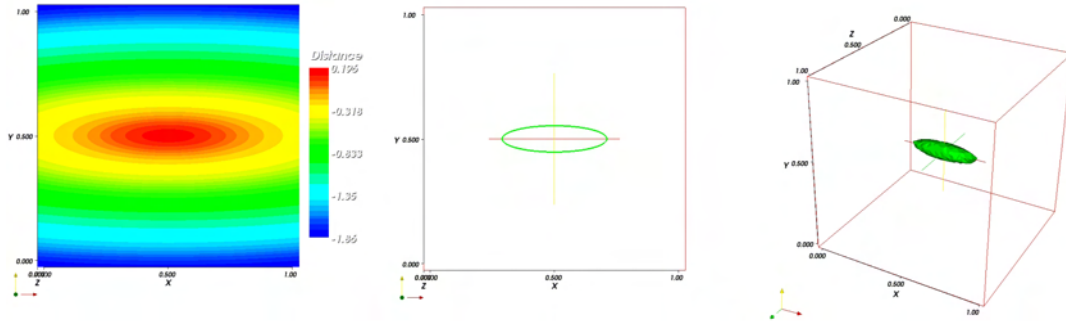


FIGURE 2.5 – fonction levelset α_s pour un ellipsoïde de rayon 0.05 de demi-grand axe 0.2. A gauche : valeur de α_s (en 2D) ; surface d'équation $\alpha_s = 0$ en 2D (au milieu) et 3D (à droite).

2.4.1.5 Calcul de la fonction caractéristique $\mathbb{I}_{\Omega_s}(t^n)$

Ayant calculé une fonction level-set nous pouvons définir une fonction caractéristique selon :

$$\text{pour tout noeud } \vec{x}_i \quad \mathbb{I}_{\Omega_s}(t^n)(\vec{x}_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha_s(\vec{x}_i) > 0 \\ 0 & \text{si } \alpha_s(\vec{x}_i) < 0 \end{cases} \quad (2.54)$$

Avec la définition précédente, et compte tenu de la discrétisation, on peut avoir sur un élément une transition raide entre une viscosité solide et une viscosité fluide à cause de la loi de mélange (2.41). Cela peut entraîner des problèmes de convergence lors du calcul du champ de vitesse. Pour s'en affranchir, il est nécessaire de faire cette transition sur plusieurs éléments du maillage. Si on veut une transition plus régulière et fixer la taille e de la zone de transition entre le domaine solide et fluide, nous pouvons considérer la fonction

$$\mathbb{I}_{\Omega_s,e}(t^n)(\vec{x}_i) = \begin{cases} = 1 & \text{si } \alpha_s(\vec{x}_i) > e \\ = \frac{\alpha_s(\vec{x}_i)}{e} & \text{si } 0 < \alpha_s(\vec{x}_i) < e \\ = 0 & \text{si } \alpha_s(\vec{x}_i) < 0 \end{cases} \quad (2.55)$$

La fonction (2.55) est définie de sorte que cette zone de transition soit à l'intérieur de la particule afin de ne pas augmenter artificiellement le volume de la phase solide. De plus

il faut que l'épaisseur e soit compatible avec la taille de maille des éléments autour de l'interface. En pratique, cette zone de transition doit contenir au moins deux éléments, pour éviter la déformation des isovaleurs de la fonction caractéristique.

Nous avons représenté sur la figure 2.6 les fonctions caractéristiques pour trois particules que nous avons décrites à l'aide de courbes de niveau.

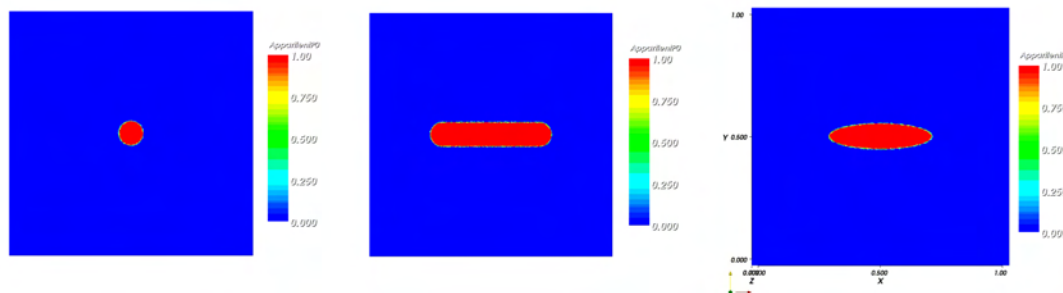


FIGURE 2.6 – Fonction caractéristiques en 2D pour la sphère (à gauche), le bâtonnet et l'ellipse.

2.4.2 Le transport de la fonction distance signée α_s

Pour transporter le domaine Ω_s , il faut mettre à jour à chaque instant la fonction level set α_s (et donc la fonction caractéristique) en fonction du temps et du champ de vitesse calculé. L'approche par domaine fictif permet de calculer le champ de vitesse en tout point du domaine, fluide ou solide. Si on veut rester dans un cadre d'une résolution éléments finis, nous pouvons utiliser une équation de transport pour déplacer les isovaleurs de la fonction distance α_s et résoudre une équation de la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \alpha_s = 0 \\ \alpha_s(\vec{x}, 0) = \alpha_0 \quad \text{dans } \Omega \\ \alpha_s(\vec{x}, t) = g \quad \text{sur } \partial\Omega^- \end{cases} \quad (2.56)$$

où $\partial\Omega^-$ est un bord du domaine où le champ de vitesse est entrant. Cependant, nous avons montré [LBB⁺07, LVCed] que cette méthode nécessite un pas de temps relativement petit et un maillage très fin pour déplacer un corps solide sans le déformer.

On peut remarquer que pour une particule rigide, il suffit de déplacer quelques points (un seul pour une sphère, deux pour un solide axisymétrique, et trois pour un solide quelconque) pour connaître la nouvelle position du solide. Connaissant cette nouvelle position, il est alors possible de recalculer la nouvelle fonction level set sans avoir de déformation du domaine solide. C'est cette approche que l'on a utilisé.

Cependant, il faut un algorithme performant permettant d'interpoler la vitesse aux points choisis pour déplacer les solides (c'est à dire trouver à quels éléments appartiennent ces points). Cela peut être pénalisant avec de gros maillages ou un grand nombre de particules.

2.4.2.1 Méthode de transport particulaire explicite

Nous avons donc utilisé une méthode lagrangienne pour le transport des particules. Nous utilisons les relations de passage entre description eulérienne et lagrangienne pour calculer les vitesses barycentriques et de rotation de la particule à partir du champ de vitesse $\vec{u}(t^n)$.

Un schéma d'Euler explicite est ensuite utilisé pour mettre à jour les positions des particules. Enfin, connaissant les positions des particules à l'instant suivant t^{n+1} , nous recalculons la fonction level-set puis la fonction caractéristique selon les formules (2.50), (2.51), (2.52) et (2.55).

A tout instant t^n , la vitesse \vec{U}^n du barycentre $\vec{X}(t^n)$ de la particule s'obtient selon la relation :

$$\vec{U}^n = \vec{u}(\vec{X}(t^n), t^n) \quad (2.57)$$

La position du barycentre $\vec{X}(t^{n+1})$ à l'instant suivant est alors donné par :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + \vec{U}^n \Delta t \quad (2.58)$$

Pour mettre à jour l'orientation de la particule, nous allons utiliser la proposition suivante :

■ Proposition 3 :

Soit un sous-domaine Ω_s convexe et \vec{v} un champ vectoriel de classe \mathcal{C}^2 vérifiant la condition d'indéformabilité. \vec{U} , $\vec{\omega}$ et \vec{X} désignent les champs introduits à la proposition 1.

Soient \vec{X}_1 et \vec{X}_2 deux points quelconques de Ω_s et soit \vec{p} le vecteur unitaire défini par :

$$\vec{p} = \frac{\vec{X}_2 - \vec{X}_1}{\|\vec{X}_2 - \vec{X}_1\|}$$

Alors :

a - \vec{p} obéit à l'équation d'évolution : $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{p}$

b - Cette équation d'évolution peut également s'écrire :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\vec{X}) \cdot \vec{p}$$

où $\underline{\underline{\Omega}}$ désigne la partie antisymétrique du tenseur gradient de vitesse.

Démonstration :

a- La condition de mouvement de corps rigide écrite en \vec{X}_1 et \vec{X}_2 conduit à :

$$\begin{cases} \frac{d\vec{X}_1}{dt} = \vec{U} + \vec{\omega} \times (\vec{X}_1 - \vec{X}) \\ \frac{d\vec{X}_2}{dt} = \vec{U} + \vec{\omega} \times (\vec{X}_2 - \vec{X}) \end{cases}$$

En faisant la différence entre ces 2 équations, il vient :

$$\frac{d}{dt}(\vec{X}_2 - \vec{X}_1) = \vec{\omega} \times (\vec{X}_2 - \vec{X}_1)$$

Et en divisant par $\|\vec{X}_2 - \vec{X}_1\|$ qui est une constante (les deux points du solide sont fixés, leur distance ne varie pas) on obtient l'équation d'évolution attendue. \square

b- la proposition 2.b implique pour tout $\vec{x} \in \Omega_s$:

$$\vec{\omega} = \frac{1}{2} \text{rot}(\vec{v}) = \begin{cases} \frac{1}{2}(\partial_y v_z - \partial_z v_y) \\ \frac{1}{2}(\partial_z v_x - \partial_x v_z) \\ \frac{1}{2}(\partial_x v_y - \partial_y v_x) \end{cases}$$

Le tenseur $\underline{\underline{\Omega}}$ est donc constant sur Ω_s et ne dépend que de $\vec{\omega}$:

$$\underline{\underline{\Omega}} = \left(\frac{1}{2}(\partial_j v_i - \partial_i v_j) \right)_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix}$$

Par suite, il est clair que :

$$\underline{\underline{\Omega}} \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} \omega_y p_z - \omega_z p_y \\ \omega_z p_x - \omega_x p_z \\ \omega_x p_y - \omega_y p_x \end{pmatrix} = \vec{\omega} \times \vec{p}$$

Ce qui achève la démonstration. \square

La variation $d\vec{p}$ du vecteur orientation pendant l'intervalle de temps Δt s'exprime donc en fonction de la vorticit  du champ de vitesse fictif au centre de la particule :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\vec{X}) \cdot \vec{p} \quad (2.59)$$

En discr tisant cette  quation toujours   l'aide d'un sch ma d'Euler explicite, nous obtenons :

$$\vec{p}^* = \vec{p}(t^n) + \underline{\underline{\Omega}}(\vec{X}(\vec{X}(t^n), t^n)) \cdot \vec{p}(t^n) \quad (2.60)$$

$$\vec{p}(t^{n+1}) = \frac{\vec{p}^*}{\|\vec{p}^*\|}$$

o  la deuxi me  tape permet de garantir que le vecteur orientation \vec{p} reste unitaire.

2.4.2.2 Sch ma implicite pour le d placement des particules

Le sch ma explicite (2.58) a l'avantage d' tre simple et rapide   impl menter. Cependant si on utilise cette relation, le d placement se fait suivant la tangente au champ de vitesse. Aussi, dans le cas d'un champ de vitesse rotationnel, la particule aura tendance   s' loigner peu   peu de sa trajectoire initiale. Le sch ma d'int gration en temps peut  tre am lior  [For01] en prenant en compte la vitesse de la particule   des temps ant rieurs avec par exemple un sch ma de type Adams- Bashfort [HHM04b] :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + \frac{\Delta t}{2} \left(3 \vec{u}(\vec{X}(t^n), t^n) - \vec{u}(\vec{X}(t^{n-1}), t^{n-1}) \right) \quad (2.61)$$

On peut aussi utiliser la relation implicite d'Adam-Moulton [Leb07b] :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + \frac{\Delta t}{2} \left(\vec{u}(\vec{X}(t^n), t^n) + \vec{u}(\vec{X}(t^{n+1}), t^{n+1}) \right) \quad (2.62)$$

Le principe du sch ma implicite associ    cette relation est pr sent  sur la figure 2.7. La solution   la relation (2.62) est obtenue de mani re it rative (k indice de boucle) :

– initialisation de la position : $\vec{X}^{k=0} = \vec{X}(t^n)$

– tant que $\|\vec{X}^{k+1} - \vec{X}^k\|$:

$$\vec{X}^{k+1} = \vec{X}(t^n) + \frac{1}{2} \left(\vec{u}(\vec{X}(t^n), t^n) + \vec{u}(\vec{X}^k, t^{n+1}) \right) \Delta t$$

On a convergence quand $\vec{X}^{k+1} = \vec{X}^k$ ce qui implique que $\vec{u}(\vec{X}^{k+1}, t^{n+1}) = \vec{u}(\vec{X}^k, t^{n+1})$.

Ce schéma reste assez couteux en temps de calcul, car pour calculer le terme $\vec{u}(\vec{X}^k, t^{n+1})$, il faut résoudre le problème aux éléments finis (2.42) - (2.44). En contrepartie, il pourrait être intéressant s'il permet d'utiliser un pas de temps plus grand. En général ce schéma converge en une ou deux itérations ce qui le rapproche d'un schéma d'Euler d'ordre 2 (prédicteur-correcteur).

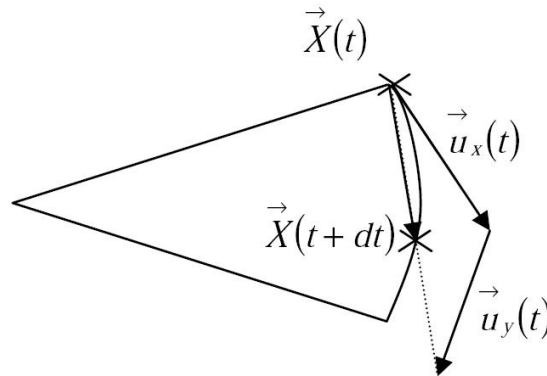


FIGURE 2.7 – Représentation du déplacement d'une particule par un schéma implicite.

Pour illustrer l'intérêt de ces schémas, nous avons étudié la l'évolution d'un point (le centre d'un cercle par exemple) dans un champs de vitesse de rotation. Le point est mis initialement au point (0.25,0.5) dans une cellule carré, de côté 1 (Le sommet en bas à gauche est l'origine du repère cartésien). Le champ de vitesse est fixe et est donné par

$$u_x = -2\pi(y - .5) \quad \text{et} \quad u_y = 2\pi(x - .5) \quad (2.63)$$

Le maillage utilisé est isotrope et compte 7 000 noeuds (le diamètre de chaque élément est environ .02). On compare la position du centre de la particule à $t = 1$ s (c'est à dire quand le centre de la particule a fait un tour complet). La particule est déplacée à l'aide d'un schéma de temps explicite (2.58) ou implicite(2.62) . Le tableau 2.1 donne l'erreur relative $\Delta r(t)$ de la distance r du centre de la particule au centre de la cavité, pour les deux pas de temps $\Delta t = .01$ et $.001$, avec les deux schémas. $\Delta r(t)$ est calculée de la façon suivante :

$$\Delta r(t) = \frac{\|r(t) - r(t=0)\|}{r(t=0)}$$

| Méthode | Δt | $\Delta r(t = 1)$ |
|-----------|------------|-------------------|
| Explicite | .01 | .22 |
| Explicite | .001 | .02 |
| Implicite | .01 | 10^{-6} |

TABLE 2.1 – Evolution de l’erreur relative pour $t = 1$ en fonction de la méthode d’intégration et du pas de temps.

Dans l’exemple précédent, la particule ne modifie pas le champ de vitesse (ce n’est qu’un point transporté à l’aide du champ de vitesse fluide). Pour mieux étudier la précision des schémas d’intégration en temps, nous avons considéré la rotation d’une particule non ponctuelle dans un écoulement de Couette-Taylor, où le champ de vitesse provient de la rotation de deux cylindres concentriques (voir figures 2.8). Les différentes coordon-

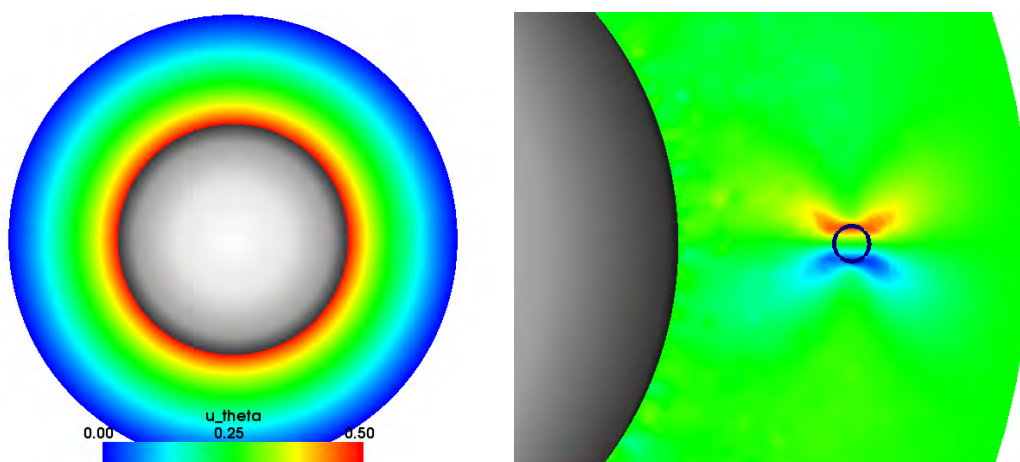


FIGURE 2.8 – Champ de vitesse pour le problème de Couette-Taylor : (a) isovaleur de la vitesse azimuthale u_θ ; (b) zoom sur l’isovaleur de la vitesse radiale u_r . Pour le cylindre intérieur : la vitesse angulaire $\omega_i = 1$; le rayon $R_i = .5$. Pour le cylindre extérieur : la vitesse angulaire $\omega_e = 0$; le rayon $R_e = 1$.

nées sont exprimées dans la base cylindrique naturellement associée à la géométrie du problème. Nous avons étudié l’évolution d’une particule de rayon $R = .025$, initialement à la position $(.75, 0)$ (voir figures 2.9 et le tableau 2.2). On peut remarquer qu’il n’y a pas de différence entre le schéma implicite et le schéma d’ordre 2. Le gain en précision lié à l’utilisation d’un schéma implicite au lieu du schéma explicite est moins significative que dans l’exemple précédent. Cela vient du calcul du champ de vitesse par la méthode des éléments finis qui donne une vitesse radiale qui n’est pas complètement nulle (on peut améliorer cela avec un maillage plus fin autour de la particule et un facteur de pénalisation η_s plus important).

La méthode implicite est donc plus précise pour un écoulement tournant, et l’erreur diminue avec le pas de temps pour le schéma explicite. Lorsque le pas de temps est petit, la différence entre les deux schémas devient négligeable. Nous avons donc utilisé le schéma implicite dans des simulations effectuées avec un grand pas de temps. En

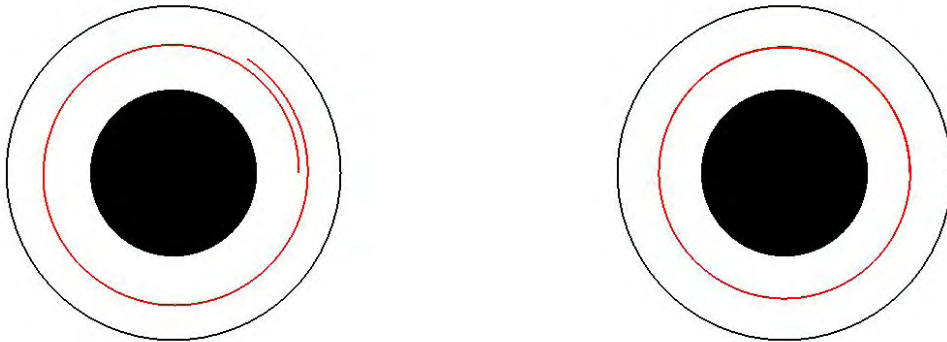


FIGURE 2.9 – Trajectoire du centre de la particule sphérique de rayon $R = .025$ placé initialement à $(.75, 0)$ pour un pas de temps $\Delta t = .1$ (les autres paramètres du calcul sont dans la figure 2.8) : (a) schéma explicite ; (b) schéma implicite.

| Méthode | Δt | $\Delta r(t = 25)$ |
|---------------|------------|--------------------|
| Explicite | .1 | .06 |
| Explicite | .01 | .008 |
| Implicite | .1 | .002 |
| Euler Ordre 2 | .1 | .003 |

TABLE 2.2 – Evolution de l'erreur relative à $t = 25$ en fonction de la méthode d'intégration et du pas de temps pour le problème de Couette-Taylor.

pratique, ce sont les écoulements impliquant un petit nombre de particules. En effet, lorsque la concentration en particules solides devient importante, il est nécessaire d'avoir un pas de temps très petit pour éviter la formation d'amas (voir chapitre suivant) et le recours au schéma implicite n'est plus primordial.

Par ailleurs, le schéma d'intégration (2.60) explicite est utilisé pour le calcul de la rotation de la particule (c'est à dire pour l'évolution de \vec{p}).

2.4.2.3 Relocalisation périodique

Lorsque la particule a une vitesse barycentrique non-nulle, elle est tôt ou tard amenée à quitter le domaine de calcul par l'un des bords. Dans les cas que nous abordons dans ce chapitre et le suivant, cette sortie se fait toujours par Γ_1 ou Γ_2 qui sont les parois du domaine dans la direction x . Pour suivre l'évolution de la particule sur des temps de simulation long, sans pour autant considérer un domaine spatial trop grand, nous avons utilisé une méthode de relocalisation périodique. Lorsque la particule quitte Ω par l'une des parois (Γ_1 ou Γ_2) elle est réinsérée dans Ω par l'autre (voir figure 2.10). On peut traduire ce déplacement par les relations suivantes si le domaine Ω a une longueur unité

dans la direction x :

$$\begin{aligned} &\text{si } (\vec{X}(t^{n+1}) \cdot \vec{e}_x) > 1 \text{ (resp. } < 0) \text{ alors :} \\ &\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^{n+1}) - \vec{e}_x \text{ (resp. } \vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^{n+1}) + \vec{e}_x) \end{aligned} \quad (2.64)$$

Ce déplacement est à effectuer après avoir déplacé les particules, et avant de passer à l'incrément suivant.

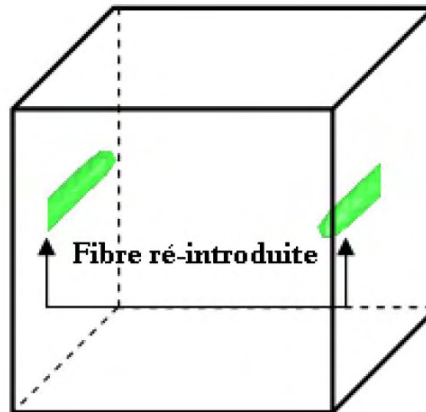


FIGURE 2.10 – Relocalisation périodique sur les plans Γ_1 et Γ_2 .

2.5 Description générale de la méthode de calcul : résumé

Le schéma suivant résume les étapes pour le calcul et le transport des particules solides :

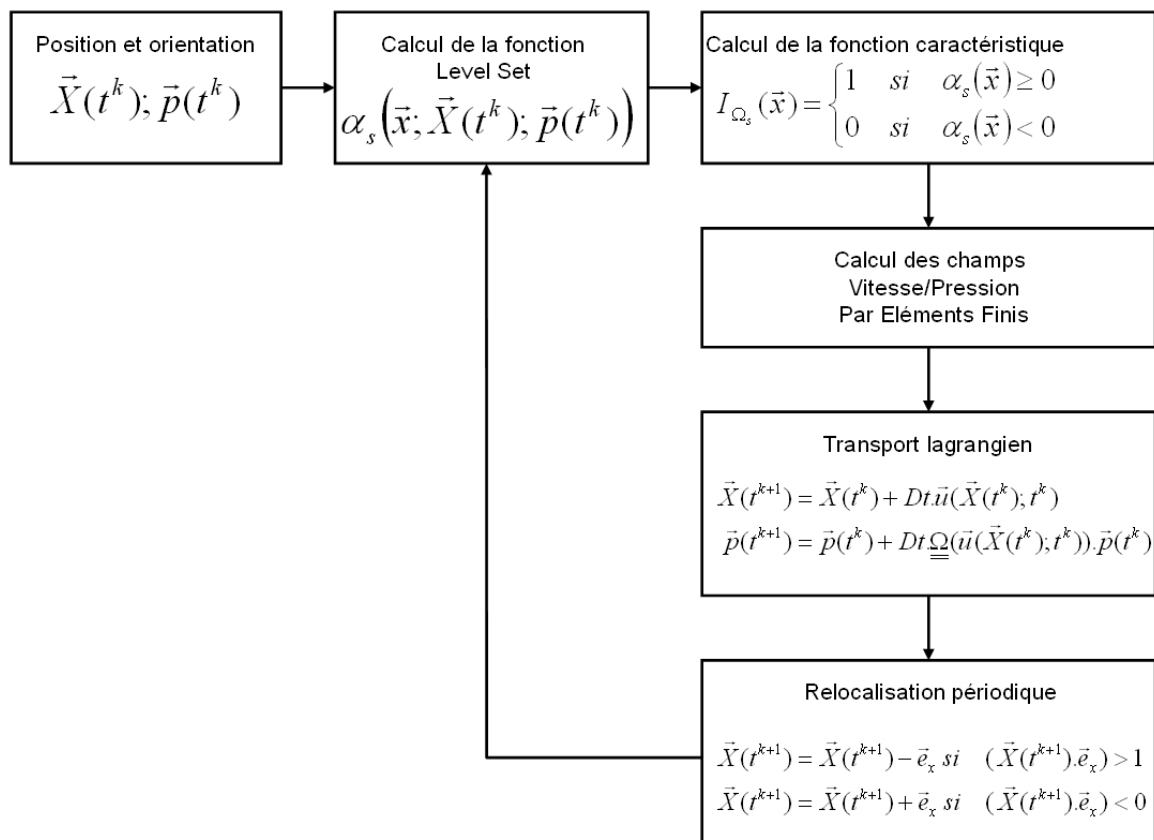


FIGURE 2.11 – Méthode pour déplacer un corps solide dans un écoulement.

2.6 Validations et premiers résultats numériques

Les calculs numériques sont effectués dans une géométrie carrée (ou cubique en 3D) unitaire (voir figure 2.1). Un écoulement de cisaillement simple est imposé en fixant la vitesse des parois supérieures et inférieures. Les conditions limites (avec un taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ fixé) sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u_y(\vec{x}) = u_z(\vec{x}) = 0 & \vec{x} \in \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_5 \cup \Gamma_6 \\ \vec{u} = -\frac{\dot{\gamma}}{2} \vec{e}_x & \vec{x} \in \Gamma_3 \\ \vec{u} = \frac{\dot{\gamma}}{2} \vec{e}_x & \vec{x} \in \Gamma_4 \end{array} \right. \quad (2.65)$$

La particule est placée au centre de la cavité et a donc une vitesse barycentrique nulle.

2.6.1 Un sphère dans un champ de cisaillement

Pour valider notre approche, nous considérons le cas simple d'une sphère dans un champ de cisaillement pour lequel il existe une solution analytique [BG72b]. Les formules analytiques pour une sphère de rayon R dans un champ de cisaillement $(\dot{\gamma} y, 0, 0)$ sont en coordonnées cartésiennes (ayant pour origine le centre de la sphère) pour l'écoulement à l'extérieur de la sphère :

$$\begin{aligned} u_x &= \dot{\gamma} \frac{x^2 y}{r^2} A - \frac{\gamma}{2} y \left(\frac{R}{r} \right)^5 + \gamma y & ; & \quad u_y = \dot{\gamma} \frac{xy^2}{r^2} A - \frac{\gamma}{2} x \left(\frac{R}{r} \right)^5 \\ u_z &= \dot{\gamma} \frac{xyz}{r^2} A & ; & \quad p = p_0 - 5 \eta \gamma \frac{xy}{r^2} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \end{aligned} \quad (2.66)$$

avec

$$A = -\frac{5}{2} \left(\frac{R}{r} \right)^3 + \frac{5}{2} \left(\frac{R}{r} \right)^5 .$$

La sphère elle-même a un mouvement de rotation uniforme de période

$$T = \frac{4\pi}{\dot{\gamma}} \quad (2.67)$$

ce qui donne un champ de vitesse à l'intérieur de la particule

$$u_x = \frac{\dot{\gamma}}{2} y ; u_y = -\frac{\dot{\gamma}}{2} x ; u_z = 0 . \quad (2.68)$$

Ce qui se traduit par la relation

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\vec{X}) \vec{p} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\Omega}} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ -\dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

On peut remarquer que la relation (2.67) et l'équation (2.69) correspondent à l'équation de Jeffery (1.29) pour un rapport de forme $\beta = 1$ et un champ de vitesse macroscopique $\vec{u} = (\dot{\gamma} y, 0, 0)$.

La comparaison entre les résultats numériques 2D et 3D et les formules analytiques se trouvent sur la figure 2.12. Les résultats sont obtenues avec 5 itérations d'Uzawa et une pénalisation $\eta_s = 10^2 \eta_f$. On constate une différence entre les calculs 2D et 3D. En effet, en dimension deux, le calcul correspond plutôt à un écoulement autour d'un cylindre en 3D. On peut remarquer qu'il y a un bon accord entre la solution 3D et la solution analytique. La période de rotation de la particule s'obtient en calculant les composantes du tenseur de rotation $\underline{\underline{\Omega}}(\vec{X})$, évalué au barycentre de la particule \vec{X} . Les valeurs données dans le tableau 2.3 confirment un meilleur accord avec la théorie pour le calcul 3D.

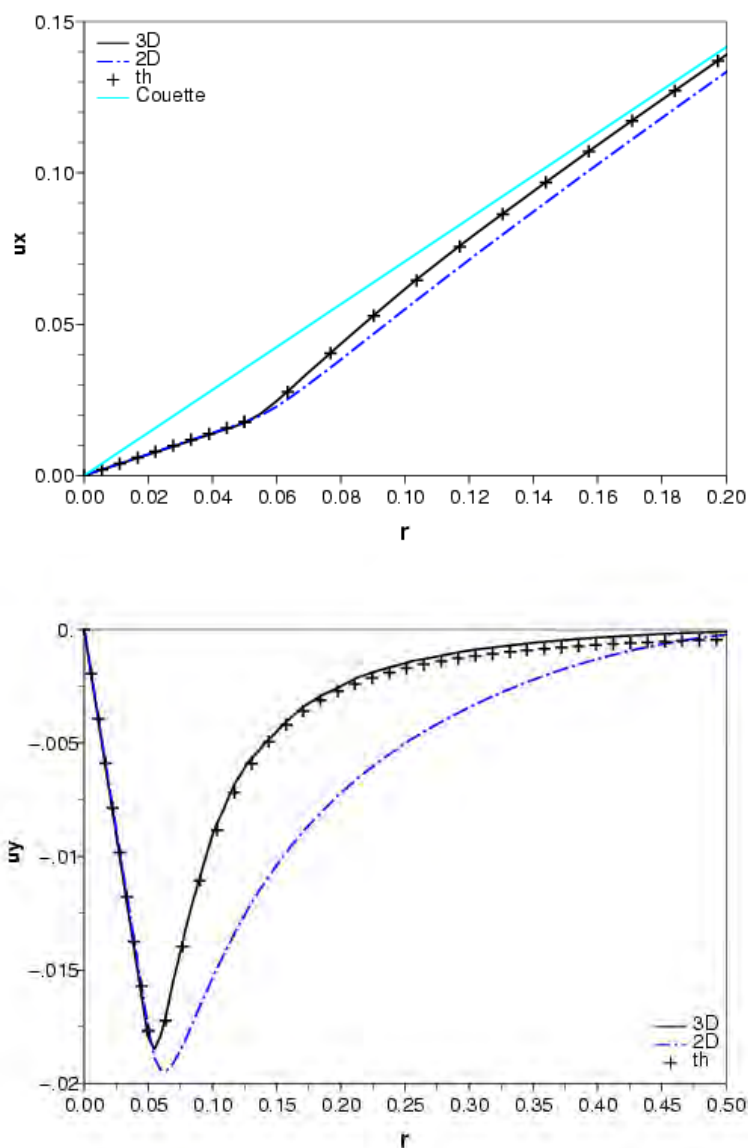


FIGURE 2.12 – Comparaison entre les solutions calculées 2D et 3D et les formules analytiques pour $\dot{\gamma} = 1$, $\eta = 1$ et $R = .05$. La vitesse est tracée le long de la ligne $z = 1$, $x = .5 + r \cos \pi/4$ et $y = .5 + r \cos \pi/4$

| | | | |
|---------------------------------------|-----------|------|------|
| | Théorique | 2D | 3D |
| $\underline{\underline{\Omega}}_{xy}$ | .5 | .466 | .494 |

TABLE 2.3 – Composante $\underline{\underline{\Omega}}_{xy}(\vec{X})$ pour le cas 2D et 3D pour $\dot{\gamma} = 1$.

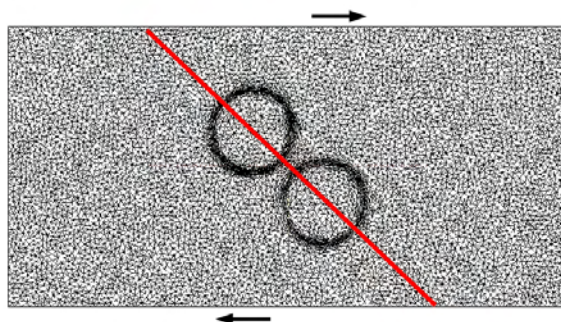
2.6.1.1 Influence du maillage et du facteur de pénalisation

L'influence du facteur de pénalisation sur la vitesse de convergence de l'algorithme a été testée sur une cellule 2D rectangulaire (de dimension 2×1 unité, et ayant pour origine le coin en bas à gauche) contenant deux disques de rayon $R = 0.15$, respectivement localisés aux points de coordonnées $(0.873, 0.627)$ et $(1.127, 0.373)$.

| Maillage | Nbre elts. | Nbre Noeuds | taille moyenne |
|----------|------------|-------------|----------------|
| M_1 | 12 161 | 6 218 | 0.02 |
| M_2 | 50 506 | 25 543 | 0.01 |
| M_3 | 201 922 | 101 097 | 0.005 |
| M_h | 14 116 | 7 196 | |

TABLE 2.4 – Caractéristiques des maillages utilisés

On va faire le calcul du champs de vitesse pour les différents maillages détaillés dans le Tableau 2.4. Les trois premiers maillages sont isotropes tandis que le maillage M_h a été construit à partir de M_1 en augmentant le nombre d'éléments autour des sphères (voir figure 2.13). Ce raffinement se fait en faisant un maillage anisotrope par rapport à la direction donnée par le gradient, $\nabla\alpha_s$, de la fonction level-set [GC05].

FIGURE 2.13 – Géométrie du calcul et le maillage M_h ; on trace les champs de vitesse et de pression le long de la ligne rouge.

Pour étudier l'influence du facteur de pénalisation et du nombre d'itération d'Uzawa, nous avons utilisé le maillage M_2 , et pris comme valeurs $\eta_f = 1$ et $\dot{\gamma} = 1$. Sur la figure 2.14, nous avons tracé l'évolution de $\|\mathbb{I}_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u})\|$ en fonction du nombre d'itérations, et

pour différentes valeurs du facteur de pénalisation. On montre que pour chaque facteur de pénalisation, la norme de la contrainte de rigidité décroît rapidement jusqu'à $k = 10$. Après la réduction est plus lente car la valeur limite dépend de la zone de mélange dans laquelle le facteur de pénalisation décroît linéairement vers η_f .

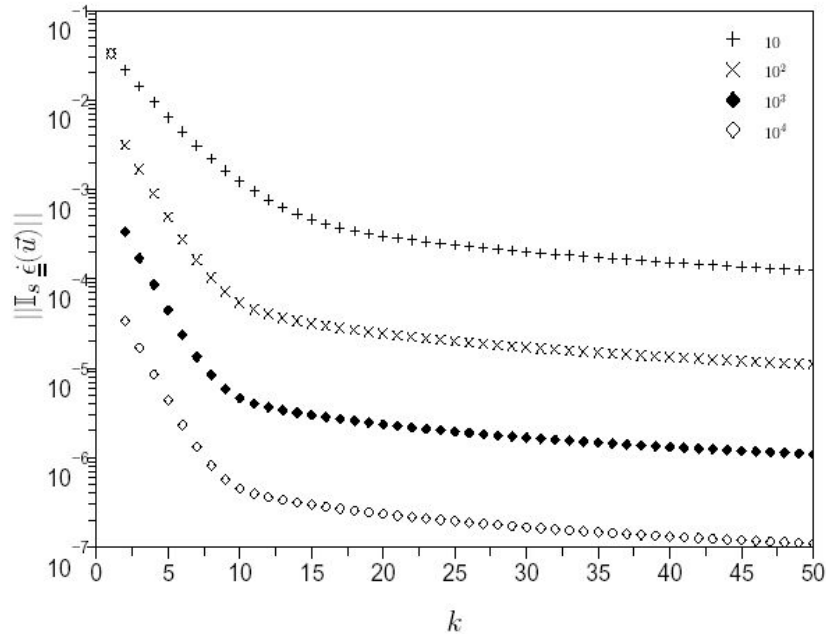


FIGURE 2.14 – Influence du facteur de pénalisation η_s et du nombre d'itération d'Uzawa k sur la condition de rigidité $\|\mathbb{I}_s \underline{\underline{\epsilon}}(\vec{u}_h^k)\|$.

La vitesse, la pression et le taux de cisaillement sur la diagonale qui passe par le centre des particules sont tracés sur la figure 2.15. Les calculs ont été faits pour un facteur de pénalisation $\eta_s = 10^2 \eta_f$ et 6 itérations d'Uzawa. Les maillages M_2 , M_3 et M_h donnent des résultats assez comparables. Plus précisément, les figures 2.15 montrent que :

- la condition de rigidité est très bien vérifiée à l'intérieur des sphères car $\|\underline{\underline{\epsilon}}(\vec{u})\| < 10^{-4}$.
- le calcul de la pression est moins précis.
- le champ de vitesse au centre de la particule est moins sensible au maillage que dans la zone de transition.
- la transition de la région solide au fluide va dépendre de la taille des éléments (frontière "floue").

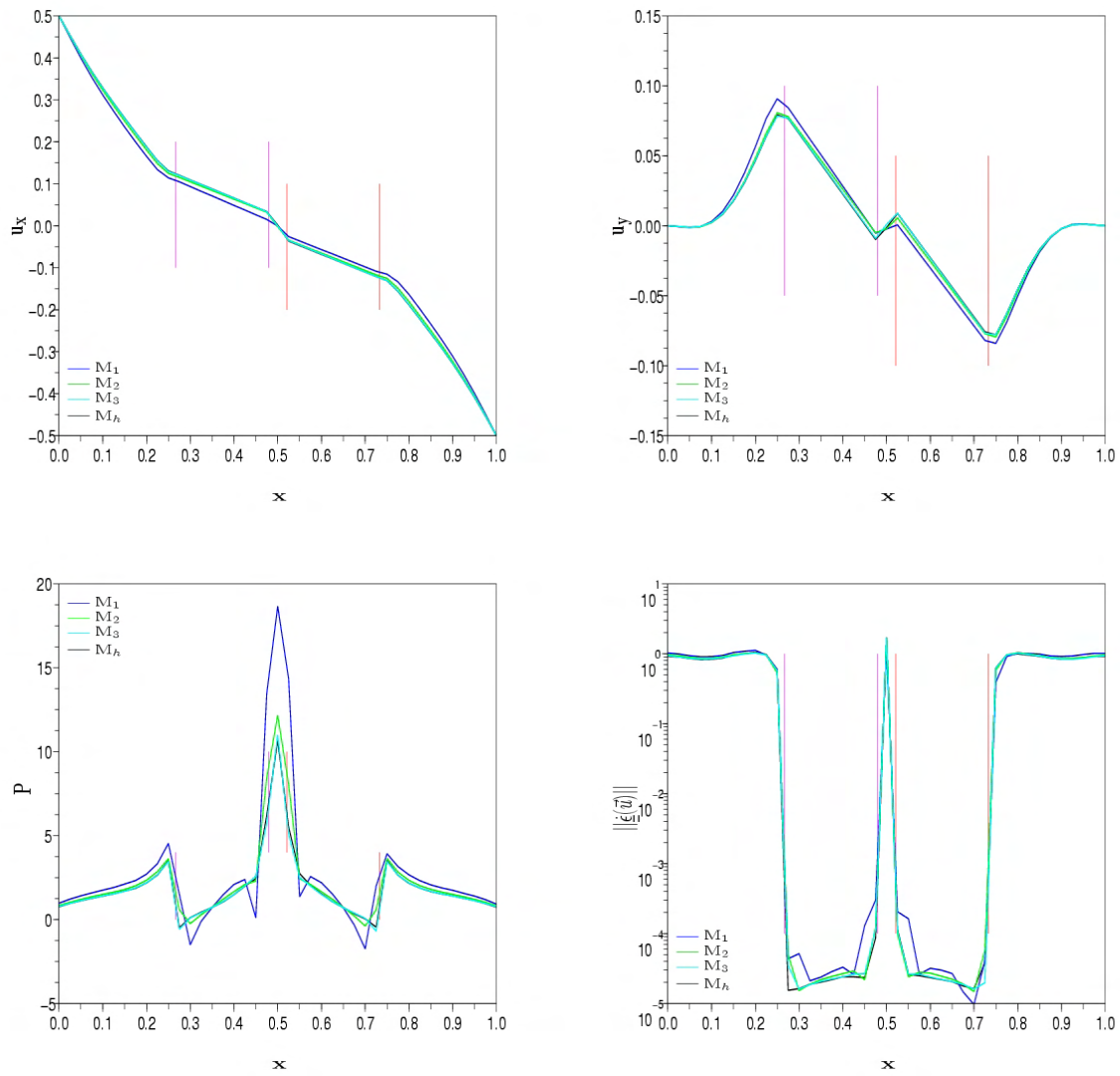


FIGURE 2.15 – Comparaison de la vitesse, la pression et du taux de cisaillement le long de la diagonale qui traverse les sphères : influence du maillage. Les traits verticaux marquent les limites des sphères.

2.6.1.2 Etude de la rotation d'une sphère dans un écoulement de Couette

Avec le schéma d'intégration (2.60), nous avons étudié la rotation de la sphère dans l'écoulement de Couette. L'évolution de l'orientation d'une particule dans un écoulement est prévue par l'équation de Jeffery (1.29). Pour nos calculs, nous avons choisi de prendre des tenseurs de vortacité et de cisaillement homogénéisés sur le domaine de calcul Ω . Dans le cas d'une sphère, cela s'écrit simplement :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \langle \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}) \rangle \vec{p} \quad (2.70)$$

où le tenseur $\langle \underline{\underline{\Omega}} \rangle$ désigne le tenseur de vortacité moyen subie par la particule. Numériquement, nous le calculons comme la valeur moyenne du tenseur de vortacité sur le domaine Ω :

$$\langle \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}) \rangle = \int_{\Omega} \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}) d\Omega \quad (2.71)$$

$\langle \underline{\underline{\Omega}} \rangle$ dans l'équation de Jeffery ne doit pas être confondu avec le tenseur dans l'équation (2.57), qui est un tenseur local, interpolé au barycentre de la particule (ou en tout point de la particule puisqu'il y est constant).

Numériquement, nous calculons \vec{p} et $\langle \underline{\underline{\Omega}} \rangle$ à tout instant. Nous pouvons donc comparer l'orientation \vec{p}^{num} calculée et la valeur théorique \vec{p}^{th} que nous avons calculée selon le schéma suivant :

$$\vec{p}^{th}(t^{n+1}) = \vec{p}^{th}(t^n) + \Delta t \langle \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}^{num}(t^n)) \rangle \cdot \vec{p}^{th}(t^n) \quad (2.72)$$

en prenant $\vec{p}^{th}(t^0) = \vec{p}^{num}(t^0) = (0, 1, 0)$. Nous avons effectué une simulation d'une durée totale de 20 s avec un pas de temps de 0.02 secondes et un cisaillement macroscopique de 1. Les résultats sont présentés sur la figure 2.16.

Nous retrouvons bien le mouvement de rotation périodique attendu, avec une période très légèrement supérieure à sa valeur théorique (comme les résultats du tableau 2.3 pouvaient le laisser supposer). On peut expliquer cette différence par le fait que d'un point de vue numérique, la sphère n'est plus rigoureusement "sphérique" du fait de la discrétisation. On aurait un meilleur accord avec un maillage plus fin.

2.6.2 Un particule allongée dans un champ de cisaillement

2.6.2.1 La solution de l'équation de Jeffery

Afin d'analyser et valider nos résultats numériques, nous rappelons la solution analytique de l'équation de Jeffery. On suppose que les gradients de vitesse autour de la fibre sont uniformes et ne sont pas modifiés par sa présence [Jef22]. Alors l'équation d'évolution pour une fibre seule s'écrit :

$$\frac{d\vec{p}}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}} \vec{p} + \lambda \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \vec{p} - \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : [\vec{p} \otimes \vec{p}] \right) \vec{p} \right) \quad (2.73)$$

avec

$$\lambda = \frac{\beta^2 - 1}{\beta^2 + 1} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{\text{longueur}}{\text{diamètre}} \quad (2.74)$$

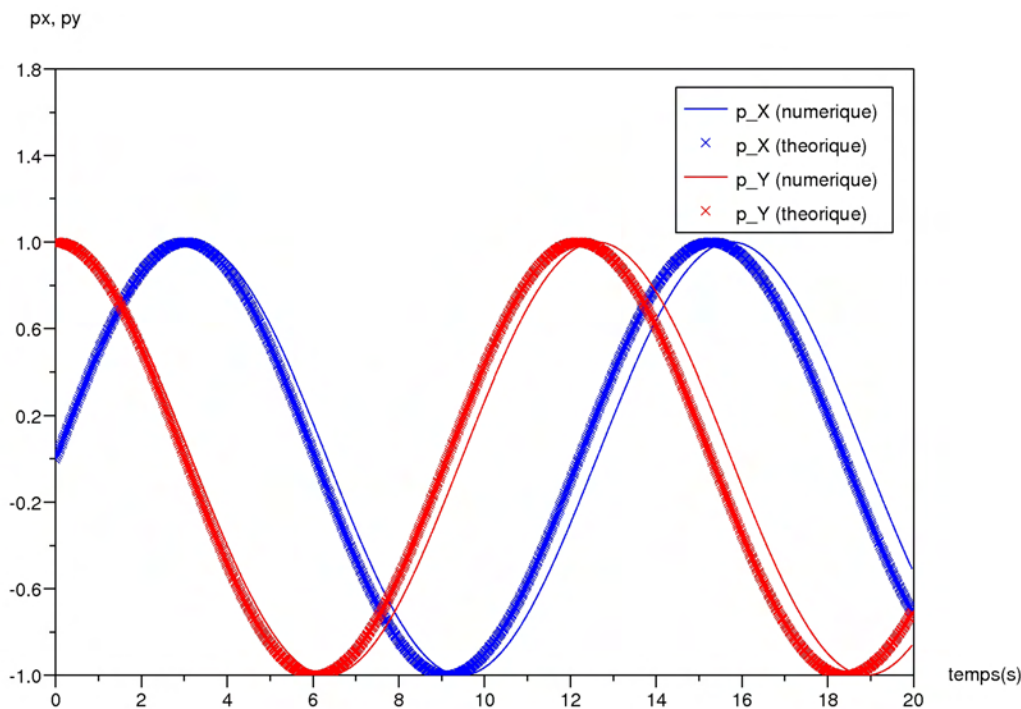


FIGURE 2.16 – Rotation d’une sphère dans un écoulement de Couette. Comparaison entre les valeurs numériques (trait continu) et théoriques (croix) des composantes de l’orientation unitaire \vec{p} .

Le vecteur orientation s’écrit en coordonnées sphériques (voir figure 1.4)

$$\vec{p} = (\cos(\varphi) \sin(\theta), \sin(\varphi) \sin(\theta), \cos(\theta)) \quad (2.75)$$

Pour un cisaillement simple $\vec{u} = (\dot{\gamma}y, 0, 0)$, on obtient la solution suivante pour les deux angles φ et θ :

$$\dot{\varphi} = -\dot{\gamma} \left(\frac{\lambda + 1}{2} - \lambda \cos(\varphi)^2 \right) \quad (2.76)$$

$$\dot{\theta} = \dot{\gamma} \lambda \cos(\theta) \sin(\theta) \cos(\varphi) \sin(\varphi) \quad (2.77)$$

On peut intégrer ces équations ce qui donne

$$\tan(\varphi) = \frac{1}{\beta} \tan \left(C_\varphi - \frac{2\pi t}{T} \right) \quad (2.78)$$

$$\tan(\theta) = \frac{C_\theta}{\sqrt{\cos^2(\varphi) + \beta^2 \sin^2(\varphi)}} \quad (2.79)$$

avec

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}} \left(\beta + \frac{1}{\beta} \right) \quad (2.80)$$

$$C_\varphi = \arctan(\beta \tan(\varphi_0)) \quad \text{et} \quad C_\theta = \tan(\theta_0) \sqrt{\cos^2(\varphi_0) + \beta^2 \sin^2(\varphi_0)} \quad (2.81)$$

où φ_0 et θ_0 étant les valeurs des angles à l'instant initial. Si $\theta_0 = \pi/2$, la fibre reste dans le plan du cisaillement (oxy). Des exemples de solutions des équations (2.78) - (2.79) sont montrés sur les figures 2.17.

L'équation de Jeffery (2.73), a été obtenue pour des ellipsoïdes. Les observations expérimentales [SKC92, BA94, MAR01] ont montré que les fibres réelles avaient le même type de mouvement périodique mais avec une période différente de celle donnée par la relation (2.80). A partir de la période de rotation calculée (expérimentalement ou numériquement), on peut définir pour la fibre un rapport de forme équivalent β_e qui sera solution de l'équation (2.80). Avec cette valeur, on montre ([MAR01, MLC04, Meg05]) que la trajectoire numérique ou expérimentale coïncide avec les courbes théoriques (2.78)-(2.79). Les simulations qui suivent nous ont permis de confirmer ce résultat.

2.6.2.2 Rotation d'un ellipsoïde dans un écoulement de Couette

Nous avons ensuite considéré l'évolution d'un ellipsoïde de révolution dans le même écoulement. Avec un rapport de forme différent de 1, l'équation de Jeffery contient des termes supplémentaires. Elle s'écrit :

$$\frac{D\vec{p}}{Dt} = \langle \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}) \rangle \vec{p} + \lambda (\langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \rangle \vec{p} - (\langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \rangle : \vec{p} \otimes \vec{p}) \vec{p}) \quad (2.82)$$

Nous comparons les valeurs numériques p_x^{num} , p_y^{num} de \vec{p} avec les valeurs théoriques calculées selon les équations suivantes :

$$p_i^{th}(t^{n+1}) = p_i^{th}(t^n) + \Delta t \left[(\underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}) \vec{p}^{th}(t^n))_i + \lambda \left(((\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \vec{p}^{th}(t^n))_i - (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \vec{p} \otimes \vec{p})(t^n) p_i^{th}(t^n)) \right) \right] \quad (2.83)$$

sur les trois composantes, $i = x, y, z$.

Les calculs ont été menés pendant une durée de 20 secondes pour un ellipsoïde de révolution de demi-grand axe de 0.2 et de rayon 0.05 (soit un rapport de forme $\beta = 4$ et $\lambda \approx 0.88$). La valeur initiale est $\vec{p}^{th}(t^0) = \vec{p}^{num}(t^0) = (0, 1, 0)$. Les résultats sont présentés sur la figure 2.18. Ici encore nous avons une bonne correspondance entre le résultat numérique et théorique. La période de rotation est là même. Nous constatons une légère différence entre les valeurs théorique et numérique de la vitesse de rotation de la particule.

2.6.2.3 Rotation d'un bâtonnet dans un écoulement de Couette

Notre méthode numérique a été développée pour prédire à terme le comportement de composites lors de la phase d'écoulement. La plupart de ces composites contiennent des fibres, c'est-à-dire des particules très allongées avec un grand rapport de forme. Pour modéliser ces fibres nous utilisons des bâtonnets, c'est-à-dire des cylindres de révolution à bout arrondis. De la même manière que pour les ellipsoïdes, nous pouvons définir un rapport de forme β ainsi qu'un facteur adimensionnel λ en fonction du rayon et de la longueur du bâtonnet. Pour prédire l'évolution d'un bâtonnet dans un écoulement fluide,

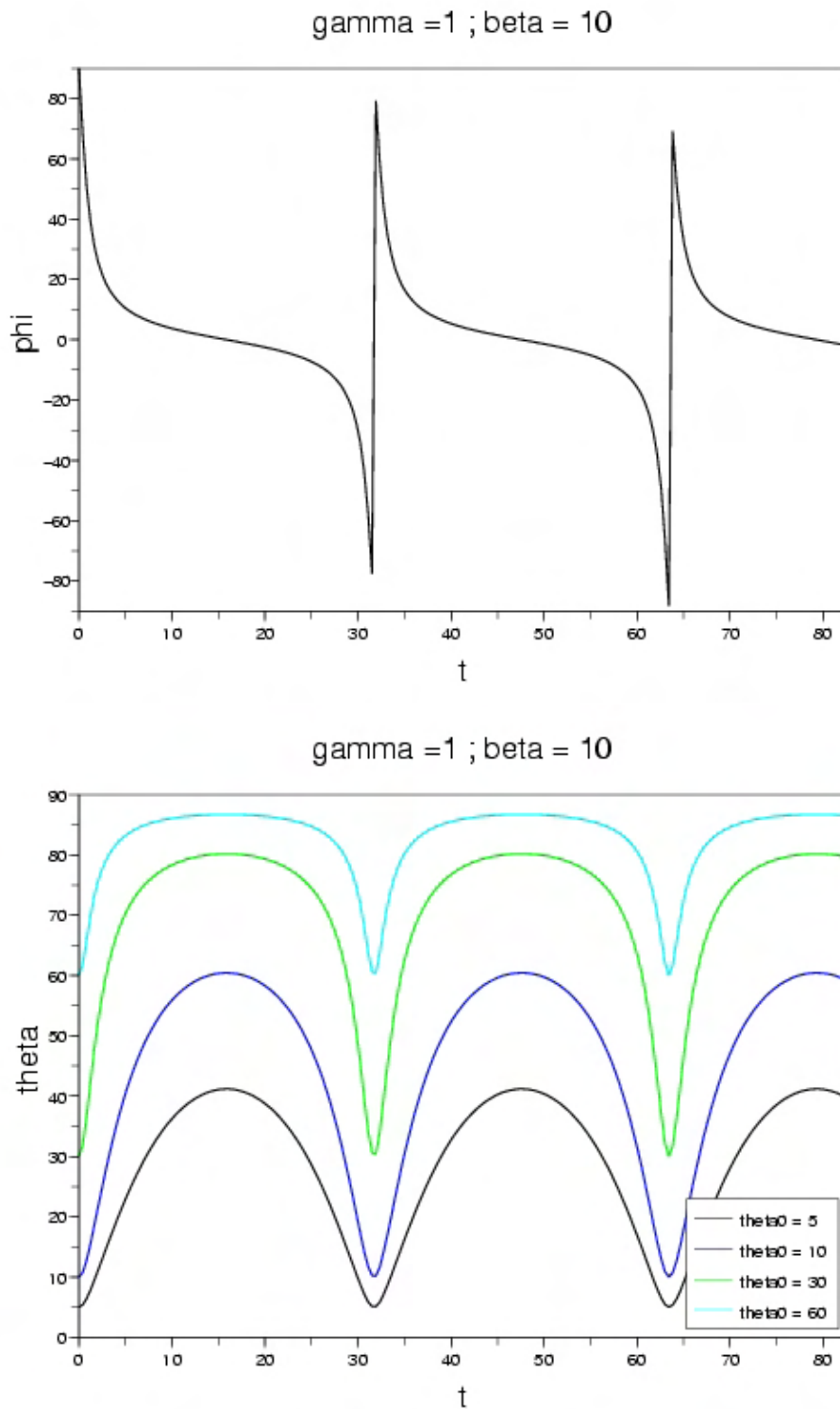


FIGURE 2.17 – Evolution des angles φ , θ pour différentes valeurs initiales θ_0 ; $\dot{\gamma} = 1$ et $\beta = 10$.

tel-00416435, version 1 - 14 Sep 2009

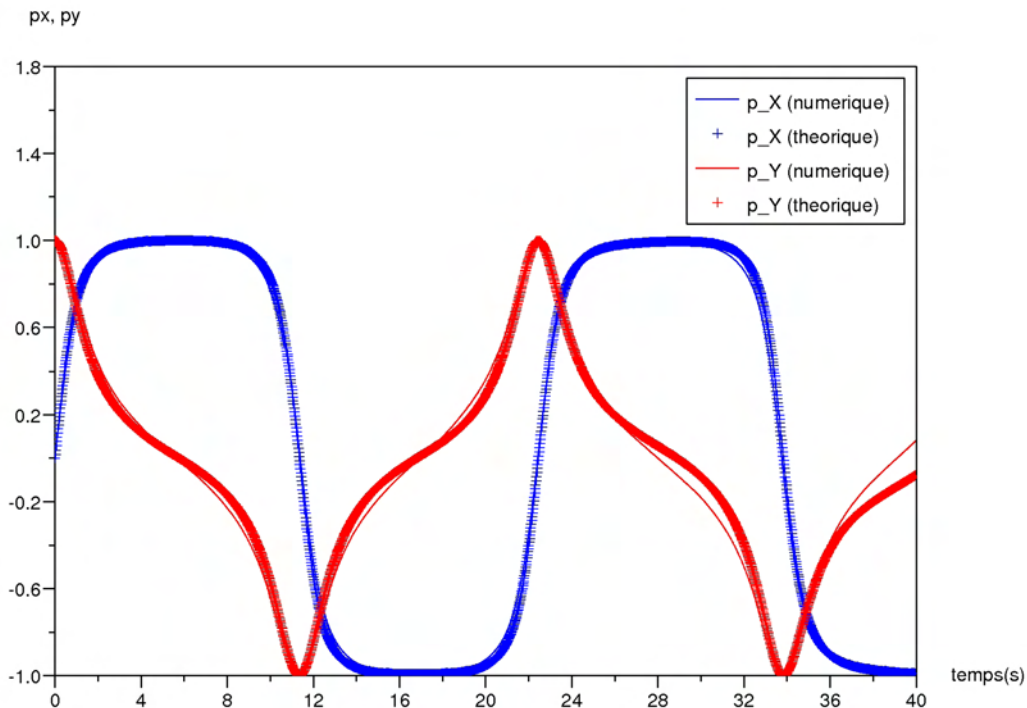


FIGURE 2.18 – Rotation d'un ellipsoïde dans un écoulement de Couette. Comparaison entre les valeurs numériques (trait continu) et théoriques (croix) des composantes de l'orientation unitaire \vec{p}

il est d'usage de recourir à l'équation de Jeffery. C'est une approximation car cette équation n'est valable que pour des particules ellipsoïdale. Nous avons cherché à vérifier cette hypothèse en étudiant la rotation d'un bâtonnet dans un écoulement de Couette. Nous avons utilisé les mêmes formules théoriques que pour l'ellipsoïde, en prenant comme rapport de forme $\beta = (L + 2R)/2R$.

Fibre dans le plan de l'écoulement

Nous avons effectué une première simulation avec les mêmes conditions initiales que pour l'ellipsoïde (fibre dans le plan Oxy). On constate une légère divergence entre le résultat numérique obtenu et celui prévu par la théorie. On peut chercher un rapport de forme "équivalent" (du fait de la non ellipticité de la particule) par dichotomie entre la solution numérique et celle obtenue par l'équation de Jeffery discrétisée (2.83). On trouve un rapport de forme optimal d'environ 4.6. La comparaison entre les différentes courbes obtenues est faite sur la figure 2.19 :

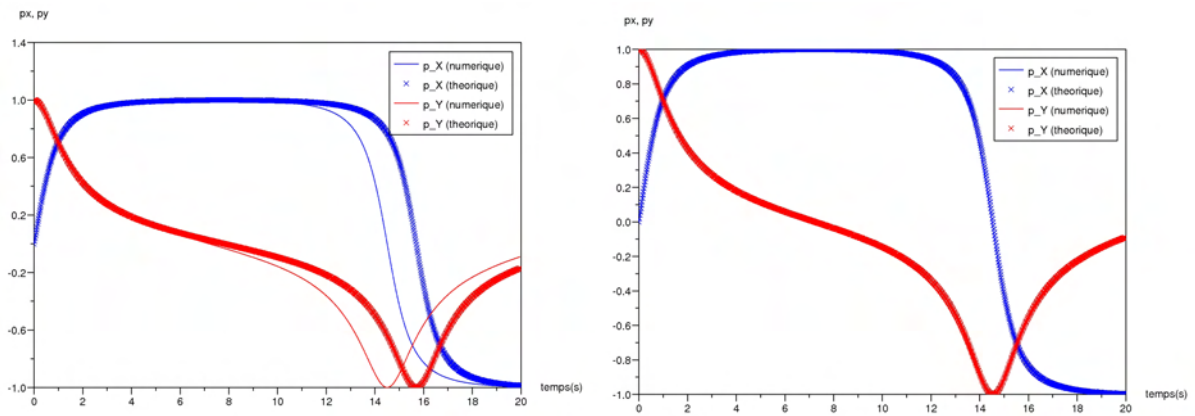


FIGURE 2.19 – Comparaison entre résultat numérique et prévision théorique avec $\beta = 5$ (à gauche) et $\beta = 4.6$ (à droite)

Fibre en travers : phénomène de "kayaking"

Nous avons effectué une simulation avec des conditions initiales légèrement différentes. La fibre est initialement dans le plan Oyz mais pas dans le plan Oxz . Elle est légèrement inclinée par rapport à ce dernier, comme le montre la figure 2.20 :

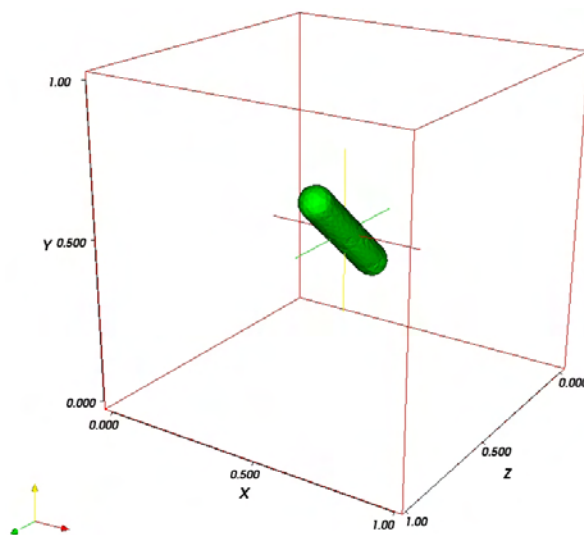


FIGURE 2.20 – Position initiale de du bâtonnet

Le mouvement d'une telle fibre est aussi bien connu. La fibre a toujours un mouvement de rotation sous l'effet du cisaillement, mais tout en restant en travers. On peut s'imaginer un tel mouvement en le comparant au mouvement de la rame effectué par un rameur en kayak (d'où le nom de "kayaking"). On retrouve bien ce mouvement caractéristique au cours de la simulation (voir figures 2.21 et 2.22). On peut remarquer que la rapport de forme équivalent n'est pas le même quand on compare la solution numérique avec la solution de l'équation de Jeffery discrétisée (avec un schéma d'Euler explicite) et la solution analytique (2.78) -(2.79). Pour obtenir le rapport de forme équivalent donnant la solution analytique, on utilise la relation (2.78) avec la période de la solution numérique et nous obtenons $\beta = 4.37$. L'erreur provenant du schéma numérique est compensée en modifiant le rapport de forme équivalent de la particule allongée.

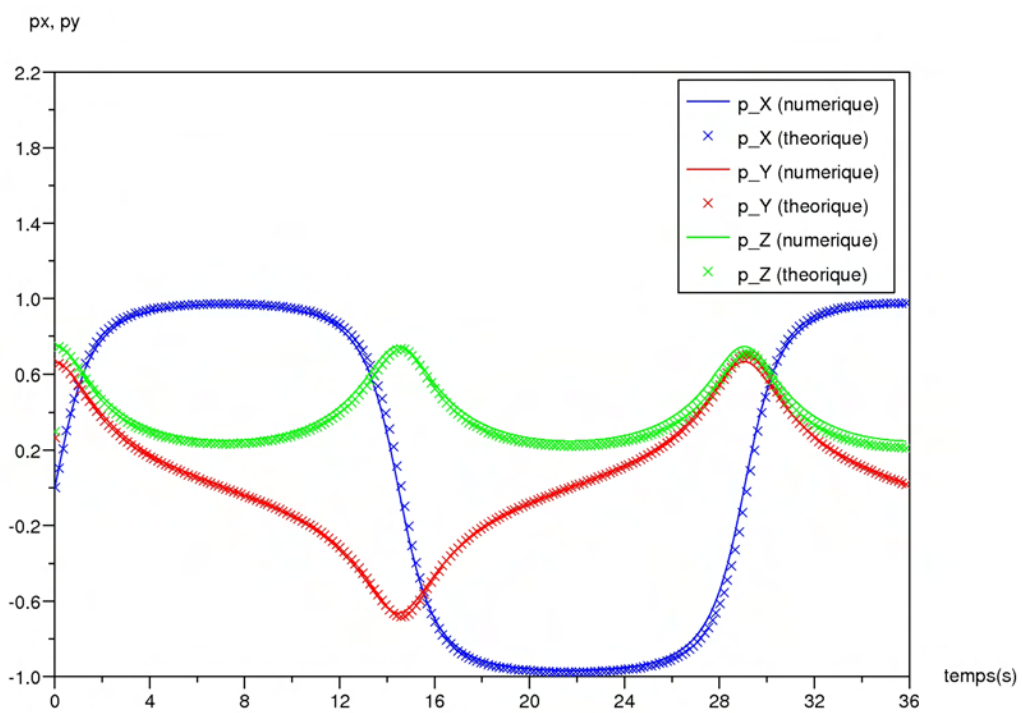


FIGURE 2.21 – Comparaison entre résultat numérique et ceux de l'équation de Jeffery homogénéisé (2.83) avec $\beta = 4.6$

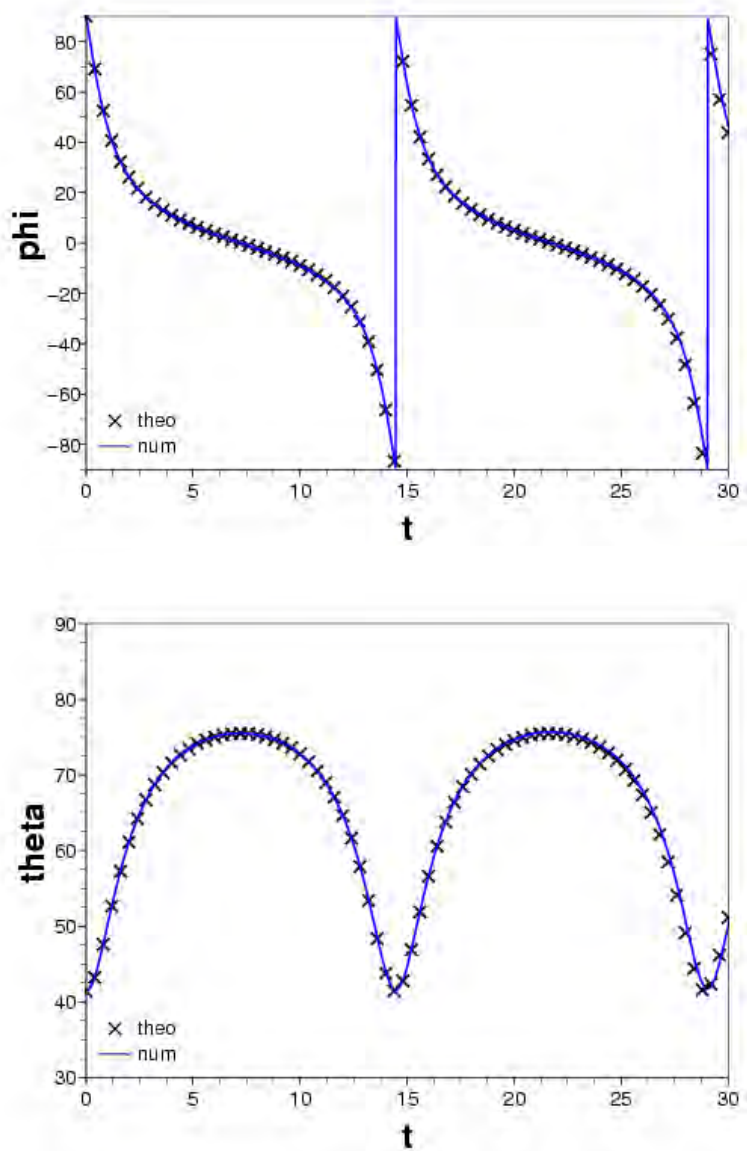


FIGURE 2.22 – Comparaison entre résultat numérique et les solutions théoriques (2.78)-(2.79) avec $\beta = 4.37$

2.7 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode de simulation numérique directe pour l'écoulement d'un fluide contenant une particule. La méthode numérique est de type eulérienne. La particule solide est décrite comme une phase fluide à laquelle nous imposons d'être indéformable. La formulation variationnelle du système obtenu est discrétisé par élément fini P_1^+/P_1 . La phase solide est décrite à l'aide d'une fonction caractéristique, elle-même calculée à partir d'une méthode de level-set. Elle est transportée par une méthode particulaire.

Nous sommes en mesure de calculer la vitesse, et donc le taux de déformation et de vorticit  en tout point de l' coulement.

Nous avons valid  notre m thode sur la rotation d'une particule dans un  coulement de Couette. Les r sultats sont en tr s bon accord avec la th orie pr vue.

Chapitre 3

Evolution d'un ensemble de particules solides dans une matrice fluide

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une méthode d'éléments finis pour simuler l'évolution d'une particule solide dans un écoulement de fluide newtonien. Dans ce chapitre, nous étendons la méthodologie à l'écoulement d'un fluide comportant un grand nombre de particules. De nouveaux points techniques doivent être abordés. Il y en a essentiellement quatre :

1. La nouvelle formulation variationnelle du problème.
2. Le calcul de la fonction caractéristique du domaine solide formé de plusieurs particules, à partir de leurs positions et orientations.
3. La gestion des interactions entre particules : les particules peuvent exercer des forces de contact les unes sur les autres. Ces forces doivent être prises en compte dans le calcul. Par ailleurs, dans notre approche multi-domaine, nous devons empêcher les sous-domaines occupés par chacune des particules de se recouvrir les uns les autres.
4. La génération des positions et orientations initiales des particules. Nous avons développé un logiciel permettant de les générer automatiquement dans des cas complexes (mélange de fibres et de sphères ; les fibres pouvant avoir des orientations aléatoires).

3.2 Interactions particulières

3.2.1 Interactions hydrodynamiques et non-hydrodynamiques

Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, notre méthode numérique se généralise aisément à un ensemble de particules. Il existe néanmoins un phénomène physique

qui n'est pas directement pris en compte dans la formulation du deuxième chapitre. Ce sont les interactions non-hydrodynamiques.

Lorsque plusieurs particules sont présentes dans le fluide, elles peuvent se rapprocher les unes des autres sous l'effet de l'écoulement. Leur dynamique va alors dépendre des efforts qu'elles exercent les unes sur les autres. Ces interactions sont de deux types :

- les interactions hydrodynamiques : ce sont des interactions interparticulaires véhiculées par le fluide. En effet, la présence d'une seconde particule à proximité d'une première va perturber l'écoulement du fluide autour de celle-ci. Cette perturbation sera d'autant plus importante que les deux particules seront proches. Tant qu'il existe toujours une mince couche de fluide entre les particules, ce sont les seuls efforts interparticulaires existants. C'est le cas lorsque la concentration solide volumique reste modérée.
- lorsque la concentration solide devient plus importante, les interactions hydrodynamiques ne sont plus suffisantes pour maintenir une couche fluide entre les particules. Ces dernières peuvent donc entrer en contact, de manière collisionnelle ou frictionnelle. On est alors en régime non-hydrodynamique.

Dans notre formulation, les interactions hydrodynamiques sont implicitement prises en compte. En effet, l'écoulement du fluide tient compte de la présence de particules. Ce n'est pas le cas des interactions non-hydrodynamiques.

3.2.2 Régime d'écoulement théorique et numérique

En théorie, la concentration limite au-delà de laquelle on passe en régime non-hydrodynamique est très élevée. Elle est d'autant plus grande que la granulométrie de la suspension est variée.

Mais en pratique, dans les simulations, les interactions hydrodynamiques calculées ne suffisent pas toujours à maintenir une mince couche de fluide entre deux particules. Ce phénomène est dû à la discrétisation en temps et à la finesse du maillage. Pour illustrer ceci, il suffit de considérer deux particules sphériques, qui se rapprochent l'une de l'autre. Supposons que la distance entre ces sphères à un instant t soit $D(t)$ et que l'une des sphères se rapproche de l'autre à la vitesse $V(t)$. Si on a un pas de temps dt suffisamment petit (c'est-à-dire $dt \ll D(t)/V(t)$) alors au fur et à mesure que les particules se rapprochent l'une de l'autre, la vitesse relative $V(t)$, recalculée à chaque pas de temps, va diminuer, et les particules ne rentreront pas "en collision". En pratique, cela signifie que nous avons toujours au moins deux éléments de fluide entre les particules se rapprochant l'une de l'autre. En revanche, si le pas de temps est trop grand, alors les efforts hydrodynamiques peuvent ne pas avoir le temps de prendre naissance et de repousser les particules, et elles s'interpénètrent (voir figure 3.1). De plus si le maillage n'est pas assez fin et si il n'y a pas assez d'éléments entre deux particules, ces deux particules sont considérées comme un corps solide unique.

Dans notre approche, la proximité entre les particules entraîne la formation d'amas numériques. En effet, lorsque deux particules se touchent (c'est-à-dire qu'elles ont au

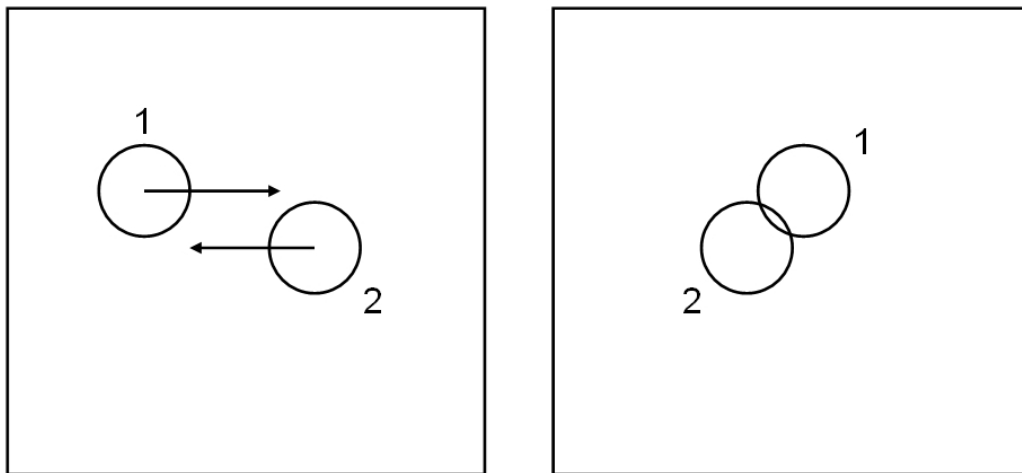


FIGURE 3.1 – Lorsque le pas de temps est trop grand, le transport des particules peut conduire à des chevauchements

moins un noeud en commun) alors elles se comportent comme un seul et même corps indéformable. C'est la conséquence naturelle de la contrainte d'indéformabilité que nous imposons au domaine solide. Ce phénomène fausse les calculs de rhéologie et d'orientation dans la suspension.

Pour remédier à ce problème, nous avons essayé de réduire le pas de temps utilisé et d'augmenter la précision du maillage. Dans les cas simples, c'est généralement suffisant pour prévenir le recouvrement. Les interactions hydrodynamiques sont suffisamment réactualisées et correctement calculées pour empêcher le contact. Mais en présence d'un très grand nombre de particules, le pas de temps que l'on doit utiliser doit devenir très petit, ce qui rend la simulation extrêmement longue. Nous avons dû envisager une alternative pour que les temps de calcul restent raisonnables.

Nous avons ajouté des forces de répulsion qui agissent de façon à maintenir une certaine distance entre les particules. Cette distance est fonction de la taille des éléments de notre maillage. Elle agit en quelque sorte quand notre maillage ou la position des particules ne permet plus de calculer correctement les forces de répulsion de type hydrodynamique. L'ajout de ces forces est un premier pas vers la modélisation des régimes non purement hydrodynamiques où l'on doit prendre en compte les forces de friction ou les forces de gravité (la sédimentation). Dans notre cas, la forme de cette force s'inspire de l'expression des forces de courte portée provenant par la théorie de la lubrification. Si nous voulions prendre en compte la collision élastique entre particules, nous pourrions utiliser le même type de force. Ces forces de répulsion seront prises en compte lors de la résolution éléments finis et du déplacement Lagrangien.

3.2.3 Expressions des forces interparticulaires

On trouve dans la littérature de nombreuses expressions pour les forces inter-particulaires. Ces forces dépendent systématiquement des positions relatives des particules, et éventuellement de leurs vitesses relatives. Ce sont des expressions empiriques, car il est très difficile d'avoir des expressions théoriques des forces exercées entre particules de formes quelconques dans un écoulement. Néanmoins, on constate qu'en régime concentré les expressions de ces forces (et les valeurs des paramètres de ces forces) influent peu sur la dynamique globale des particules. Seul le paramètre permettant de contrôler la distance minimale entre deux particules a une réelle influence. En pratique, ces forces permettent d'empêcher les particules de s'interpénétrer les unes les autres ; mais tant que le pas de temps et les distances minimales imposées restent raisonnable, c'est l'écoulement et les forces hydrodynamiques qui gouvernent encore l'écoulement dans les suspensions concentrées. En régime très concentré, on s'attendrait naturellement à ce que ce soit les interactions entre particules qui gouvernent la dynamique du système. Mais il est alors clair que la méthode retenue ici pour nos simulations n'est pas adaptée : une approche de type milieu granulaire serait plus pertinente. C'est à alors le mouvement des corps solides qui provoque le déplacement du fluide et il faut ordonner les calculs de manières différentes.

3.2.3.1 Forces entre sphères

Soient deux sphères i et j , de centres \vec{X}_i et \vec{X}_j , de rayons R_i et R_j (voir figure 3.2). On définit d_{ij} comme étant la distance entre les centres des sphères :

$$d_{ij} = \|\vec{X}_i - \vec{X}_j\|$$

La distance D_{ij} entre les deux sphères s'exprime aisément : $D_{ij} = d_{ij} - R_i - R_j$. La théorie de la lubrification pour deux particules sphériques dans un fluide newtonien permet d'exprimer la force de répulsion de courte portée de la manière suivante [YM95] :

$$\vec{F}_{j \rightarrow i} = 6 \eta \pi \left(\frac{R_i R_j}{R_i + R_j} \right)^2 \frac{(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \vec{n}_{j \rightarrow i}}{D_{ij}} \vec{n}_{j \rightarrow i} \quad (3.1)$$

où $\vec{F}_{j \rightarrow i}$ représente la force exercée par la sphère j sur la sphère i et $\vec{n}_{j \rightarrow i}$ désigne le vecteur unitaire selon $\overrightarrow{X_j X_i}$.

Dans la pratique, on introduit une distance limite d_{lim} en dessous de laquelle des forces entre particules apparaissent et la formule simplifiée suivante [GPH⁺01] :

$$\vec{F}_{j \rightarrow i} = \begin{cases} K \left(1 - \frac{D_{ij}}{d_{lim}}\right)^2 \vec{n}_{j \rightarrow i} & \text{si } D_{ij} < d_{lim} \\ \vec{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.2)$$

Cette force est continue, mais ne diverge pas en 0 comme la relation (3.1). Ce qui signifie que deux particules très proches ne seront pas repoussées avec des forces très intenses. Si cela s'avère nécessaire d'autres formes de forces divergentes peuvent être utilisées. Ces forces repousseront plus efficacement les particules lorsqu'elles sont très proches, mais agiront de la même manière pour des particules proches.

$$\vec{F}_{j \rightarrow i} = \begin{cases} K \left(\frac{1}{D_{ij}^2} - \frac{1}{d_{lim}^2} \right) \vec{n}_{j \rightarrow i} & \text{si } D_{ij} < d_{lim} \\ \vec{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.3)$$

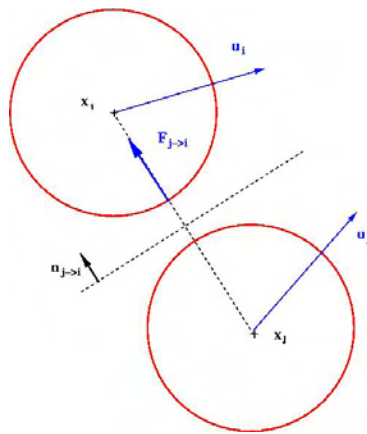


FIGURE 3.2 – Interaction entre deux sphères.

3.2.3.2 Forces entre fibres

Lorsque l'on veut modéliser des forces d'interactions à courte portée entre fibre, le problème est plus complexe, car il est nécessaire de tenir compte de l'orientation des fibres \vec{p}_i . Comme pour les sphères, il est possible d'utiliser la théorie de la lubrification pour obtenir une relation analogue à la relation (3.1). Dans le cas où les fibres ne sont pas dans le même plan [YKD94], on montre que cette force est colinéaire à $\vec{p}_i \times \vec{p}_j$ et dans la suite on va utiliser une forme simplifiée de cette force.

Outre la position \vec{X}_i du centre de la fibre i sa longueur L_i et \vec{p}_i son orientation, nous devons introduire un certain nombre de notations supplémentaires (voir figure 3.3). Nous appellerons :

- \vec{P}_{ij} = le point de l'axe de la fibre i le plus proche de la fibre j
- l_{ij} = distance du point \vec{P}_{ij} au centre \vec{X}_i de sa fibre.
- H_{ij} la distance entre les points de contacts $H_{ij} = |\overrightarrow{P_{ij}P_{ji}}|$
- $\vec{n}_{j \rightarrow i} = -\overrightarrow{P_{ij}P_{ji}}/H_{ij}$

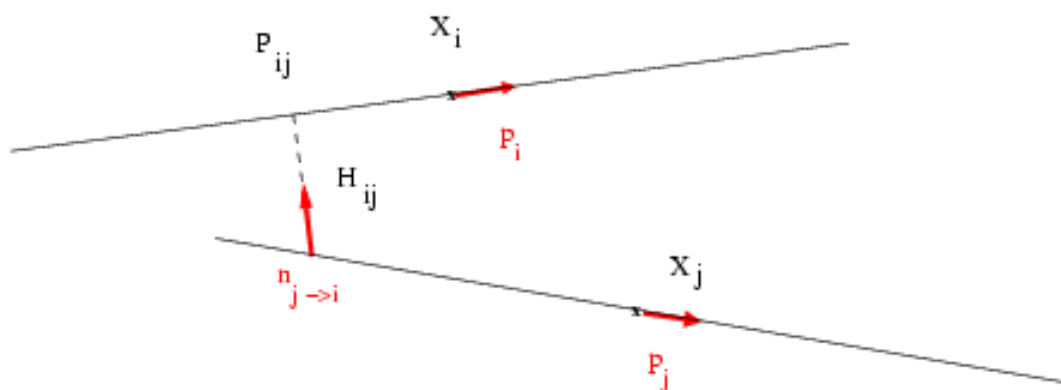


FIGURE 3.3 – Interaction entre deux fibres.

Plus précisément, l'ensemble $Axe(i)$ des points de l'axe de la fibre i (appartenant à la fibre) est donné par :

$$Axe(i) = \{\vec{X} \mid \exists \alpha \in [-\frac{L_i}{2}, \frac{L_i}{2}] \text{ tq } \vec{X} - \vec{X}_i = \alpha \vec{p}_i\}$$

Pour \vec{P}_{ij} , nous avons $\alpha = l_{ij}$. Formellement, on peut définir le couple $(\vec{P}_{ij}, \vec{P}_{ji})$ par la relation :

$$(\vec{P}_{ij}, \vec{P}_{ji}) = \min_{\vec{X} \in Axe(i)} \left\{ \min_{\vec{Y} \in Axe(j)} \|\vec{X} - \vec{Y}\|^2 \right\}$$

Connaissant \vec{P}_{ij} , et \vec{P}_{ji} , nous connaissons donc H_{ij} ainsi que $\vec{n}_{j \rightarrow i}$. Nous utilisons une expression analogue au cas des sphères pour calculer la force exercée par une fibre sur l'autre :

$$\vec{F}_{j \rightarrow i} = \begin{cases} K(1 - \frac{D_{ij}}{d_{lim}})^2 \vec{n}_{j \rightarrow i} & \text{si } D_{ij} < d_{lim} \\ \vec{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.4)$$

avec $D_{ij} = H_{ij} - R_i - R_j$. A cette force on associe également un couple $\vec{\Gamma}_{ij}$ exercé par la fibre j sur la fibre i . Par définition, nous avons :

$$\vec{\Gamma}_{ij} = l_{ij} \vec{p}_i \times \vec{F}_{ij} \quad (3.5)$$

En pratique, on peut calculer analytiquement l_{ij} en distinguant les différentes orientations et positions relatives des deux fibres. Ce calcul dépend également de la dimension du problème.

En dimension deux, les fibres peuvent être soit parallèles, soit sécantes, puisqu'elles sont dans le même plan.

Si elles sont sécantes, alors nécessairement au moins l'un des deux points P_{ij} ou P_{ji} est l'une des extrémités des deux fibres. Connaissant l'extrémité qui est impliquée dans l'interaction (nous supposons que c'est une des extrémités de la fibre i , qui coïncide donc avec \vec{P}_{ji}) on obtient facilement la position du point \vec{P}_{ji} par la relation :

$$\vec{P}_{ji} = \begin{cases} \vec{X}_j + (\overrightarrow{X_j P_{ij}} \cdot \vec{p}_j) \vec{p}_j & \text{si } |(\overrightarrow{X_j P_{ij}} \cdot \vec{p}_j)| \leq \frac{L_j}{2} \\ \vec{X}_j + \frac{L_j}{2} \frac{\overrightarrow{X_j P_{ij}} \cdot \vec{p}_j}{|\overrightarrow{X_j P_{ij}} \cdot \vec{p}_j|} \vec{p}_j & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.6)$$

Lorsque les fibres sont parallèles, il n'est pas nécessaire de calculer les positions des points $(\vec{P}_{ij}, \vec{P}_{ji})$, car le calcul de la distance entre les fibres et du vecteur donnant la direction du support de la force ne dépendant pas de ces points. La distance H_{ij} et le vecteur unitaire \vec{n}_{ij} sont directement donnés par

$$H_{ij} \vec{n}_{i \rightarrow j} = \overrightarrow{X_i X_j} - (\overrightarrow{X_i X_j} \cdot \vec{p}_i) \vec{p}_i \quad (3.7)$$

et aucun moment n'est exercé dans ce cas.

En dimension trois, les deux cas de figure précédents sont toujours possible, lorsque les axes des fibres sont dans le même plan, ce qui reste tout de même assez peu probable.

La plupart du temps, les axes des fibres sont dans deux plans parallèles, et leurs axes sont des droites gauches. On obtient alors une expression analytique pour l_{ij} , l_{ji} et H_{ij} :

$$\begin{cases} H_{ij} = \frac{|\overrightarrow{X_i X_j} \cdot (\vec{p}_i \times \vec{p}_j)|}{|\vec{p}_i \times \vec{p}_j|} \\ l_{ij} = \frac{\overrightarrow{X_i X_j} \cdot \vec{p}_i - (\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j)(\overrightarrow{X_i X_j} \cdot \vec{p}_j)}{1 - (\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j)^2} \\ l_{ji} = \frac{\overrightarrow{X_j X_i} \cdot \vec{p}_j - (\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j)(\overrightarrow{X_j X_i} \cdot \vec{p}_i)}{1 - (\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j)^2} \end{cases} \quad (3.8)$$

3.2.3.3 Force entre fibre et sphère

Nous avons modéliser les interactions entre fibres et sphères de la même manière. Nous exprimons la force de courte portée exercée par la sphère j sur la fibre i sous la forme :

$$\vec{F}_{j \rightarrow i} = \begin{cases} K(1 - \frac{D_{ij}}{d_{lim}})^2 \vec{n}_{j \rightarrow i} & \text{si } D_{ij} < d_{lim} \\ \vec{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.9)$$

La distance D_{ij} se calcule plus facilement dans ce cas :

$$\begin{aligned} D_{ij} &= H_{ij} - R_i - R_j \\ &= \|\overrightarrow{X_i X_j} - (\overrightarrow{X_i X_j} \cdot \vec{p}_i) \vec{p}_i\| - R_i - R_j \end{aligned} \quad (3.10)$$

où l'ensemble des paramètres sont définis sur la figure 3.4.

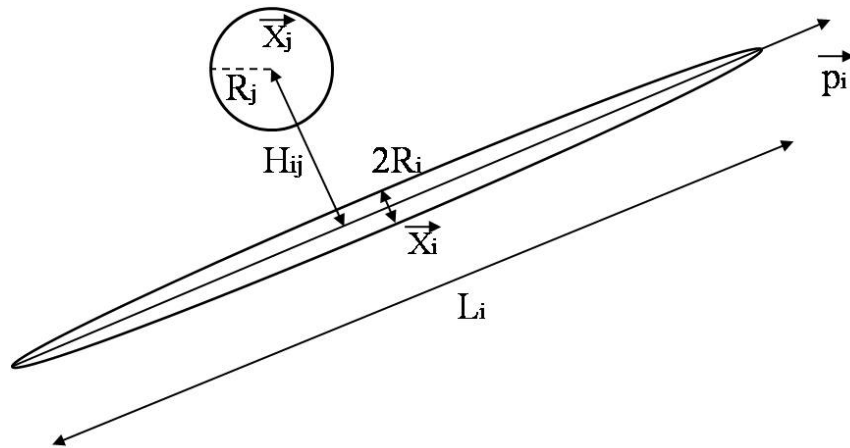


FIGURE 3.4 – Interaction entre une sphère et une fibre.

3.3 Equations mécaniques et formulations variationnelles

Désormais, nous considérons un domaine Ω contenant une matrice fluide contenant du fluide, occupant l'espace Ω_f , et N particules solides occupant chacune l'espace Ω_s^i

délimité par la frontière $\partial\Omega_s^i$ (voir figure 3.5).

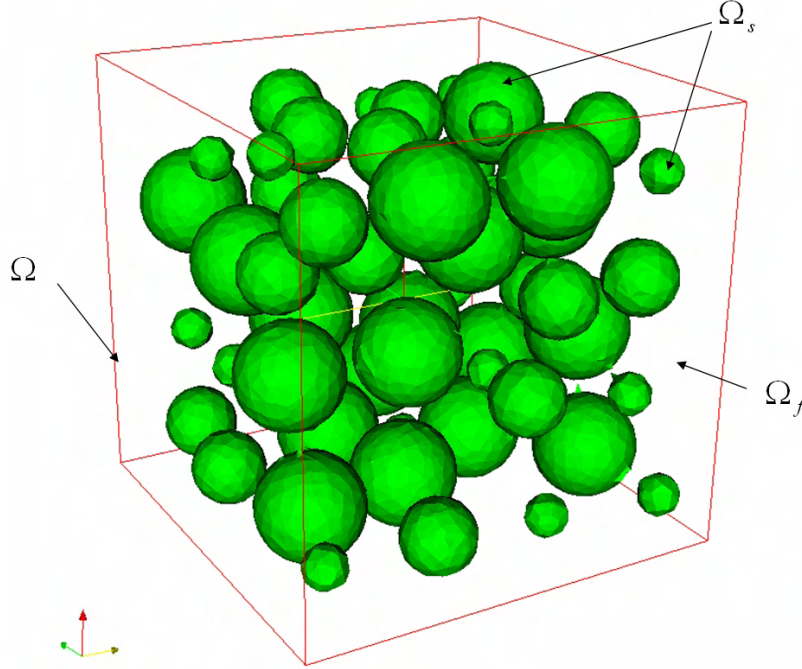


FIGURE 3.5 – Le domaine de calcul $\Omega = \Omega_f(t) \cup \Omega_s(t)$

Chaque particule est caractérisée par son barycentre \vec{X}_i , son orientation \vec{p}_i , sa vitesse \vec{U}_i , sa vitesse de rotation $\vec{\omega}_i$, sa masse M_i et son moment d'inertie \underline{J}_i . Nous notons Ω_s le domaine solide, de sorte que :

$$\Omega = \Omega_f \cup \left(\bigcup_{i=1}^N \Omega_s^i \right) \quad (3.11)$$

3.3.1 Prise en compte des forces d'interactions

En régime non-hydrodynamique, toute particule i subit un tenseur d'efforts non-hydrodynamiques, noté $\{\vec{F}_{nh}^i, \vec{\Gamma}_{nh}^i\}$. Lorsque ce tenseur est non nul, les équations (2.4) et (2.5) sont modifiées de la sorte :

$$M_i \frac{d^2 \vec{X}_i}{dt^2} = \vec{F}_h^i + \vec{F}_{nh}^i + M_i \vec{g} \quad (3.12)$$

$$J_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \vec{\Gamma}_h^i + \vec{\Gamma}_{nh}^i \quad (3.13)$$

Si on néglige l'inertie et la gravité, les relations (2.6) et (2.7) deviennent

$$\vec{F}_h^i = \int_{\partial\Omega_s^i} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext} d\Gamma = -\vec{F}_{nh}^i \quad (3.14)$$

$$\vec{\Gamma}_h^i = \int_{\partial\Omega_s^i} (\vec{x} - \vec{X}^i) \times (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) d\Gamma = -\vec{\Gamma}_{nh}^i \quad (3.15)$$

3.3.2 Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda}, \vec{U}, \vec{\omega})$ sur Ω

En présence de N particules la formulation (2.22)-(2.25) s'écrit directement en utilisant les relation (3.14) - 3.15) :

■ Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s)^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^{6N}$ avec un tenseur non-hydrodynamique :

• trouver $(\vec{u}, \vec{\lambda}, p, \{\vec{U}_i, \vec{\omega}_i\}_{i=1\dots N}) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s)^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^{6N}$ tels que pour tout $(\vec{v}, \vec{\mu}, q, \{\vec{V}_i, \vec{\zeta}_i\}_{i=1\dots N}) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega_s)^3 \times \mathcal{Q} \times \mathbb{R}^{6N}$ on ait :

$$\begin{aligned} 0 &= 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_s^i} \vec{\lambda} [\vec{v} - \vec{V}_i - \vec{\zeta}_i \times (\vec{x} - \vec{X}_i)] d\Omega \\ &- \sum_{i=1}^N \vec{F}_{nh}^i \cdot \vec{V}_i - \sum_{i=1}^N \vec{\Gamma}_{nh}^i \cdot \vec{\zeta}_i \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} d\Omega \quad (3.17)$$

$$0 = \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_s^i} \vec{\mu} \cdot [\vec{u} - \vec{U}_i - \vec{\omega}_i \times (\vec{x} - \vec{X}_i)] d\Omega \quad (3.18)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir} \quad (3.19)$$

C'est la formulation proposée par Glowinski [GPH⁺01].

3.3.3 Forme variationnelle en $(\vec{u}, p, \vec{\lambda})$ sur Ω

Si on veut modifier de la même façon la formulation variationnelle (2.33) - (2.36) pour prendre en compte le tenseur des forces non hydrodynamiques, $\{\vec{F}_{nh}^i, \vec{\Gamma}_{nh}^i\}$, il faut

introduire une force \vec{f}^i dans la formulation forte (2.29) sur le domaine Ω_s^i :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \vec{f}_{nh}^i = 0 \quad (3.20)$$

La difficulté est maintenant d'exprimer cette force \vec{f}_{nh}^i en fonction de $\{\vec{F}_{nh}^i, \vec{\Gamma}_{nh}^i\}$. Avec cette force continue, le problème variationnel devient relativement simple et s'écrit

■ Formulation variationnelle sur $H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ avec une force non-hydrodynamique :

• trouver $(\vec{u}, \vec{\lambda}, p) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ tels que pour tout $(\vec{v}, \vec{\mu}, q) \in H^1(\Omega)^3 \times H^1(\Omega)^3 \times \mathcal{Q}$ on ait :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_s} \vec{f}_{nh} \cdot \vec{v} d\Omega &= 2\eta_f \int_{\Omega} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} d\Omega \quad (3.22)$$

$$0 = \int_{\Omega_s} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\mu}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) d\Omega \quad (3.23)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_{\Gamma} \quad \text{sur } \Gamma \cap \partial\Omega_{Dir} \quad (3.24)$$

où le champ de force \vec{f}_{nh} représente toutes les forces \vec{f}_{nh}^i définies sur chaque domaines solides Ω_s^i :

$$\vec{f}_{nh}(\vec{x}, t^n) = \begin{cases} \vec{f}_{nh}^i(\vec{x}, t^n) & \text{si } \vec{x} \in \Omega_s^i(t^n) \\ \vec{0} & \text{si } \vec{x} \in \Omega_f(t^n) \end{cases} \quad (3.25)$$

On va résoudre le problème précédent par une méthode de Lagrangien augmenté et un algorithme d'Uzawa (equations (2.42) à (2.45)). A chaque étape le second membre sera la somme d'une force non-hydrodynamique et d'une force pour imposer la rigidité. Ces deux forces sont donc en compétition. En pratique, le critère d'arrêt dans l'algorithme d'Uzawa (ou le nombre d'incrément) va définir l'importance relative que nous accordons à la condition de rigidité par rapport aux interactions non-hydrodynamiques. En effet, lorsque k ou le terme de pénalisation η_s augmentent, le terme de rigidité devient prépondérant devant le terme d'interaction. Le critère d'arrêt de notre algorithme d'Uzawa résulte donc d'un compromis entre ces deux conditions.

3.3.4 Calcul de la force non hydrodynamique continue

Comme mentionné dans le paragraphe précédent, il faut exprimer \vec{f} en fonction de $\{\vec{F}, \vec{\Gamma}\}$ (on a enlevé les indices et les exposants nh et i pour simplifier). On doit avoir les relations suivantes :

$$\vec{F} = \int_{\Omega_s} \vec{f} d\Omega \quad (3.26)$$

$$\vec{\Gamma} = \int_{\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times \vec{f} d\Omega \quad (3.27)$$

On peut déjà remarquer qu'il n'y a pas une solution unique \vec{f} à ces équations. Si le torseur correspond à la force de gravité $\{\vec{F}, \vec{\Gamma}\} = \{M \vec{g}, 0\}$, il vient naturellement

$$\vec{f} = \rho_s \vec{g} \quad (3.28)$$

car par définition

$$M = \int_{\Omega_s} \rho_s d\Omega$$

En raisonnant de la même manière pour un solide homogène, la force \vec{F} va donner une contribution de la forme

$$\vec{f}_{\vec{F}} = \frac{\vec{F}}{|\Omega_s|} \quad (3.29)$$

qui vérifie la relation (3.26) et qui représente une densité de force.

Pour obtenir la contribution du couple $\vec{\Gamma}$, on a procédé par analogie avec l'expression du moment cinétique pour un solide soumis au vecteur rotation $\vec{\omega}$

$$\mathcal{M}_{\vec{X}} = \int_{\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times \rho_s \vec{u} d\Omega = \int_{\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times (\rho_s \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X})) d\Omega \quad (3.30)$$

Ce moment cinétique peut aussi s'exprimer à l'aide de la matrice d'inertie $\underline{\underline{J}}$ définie par

$$\underline{\underline{J}} = \int_{\Omega_s} (r^2 \underline{\underline{Id}} - \vec{r} \otimes \vec{r}) d\Omega \quad (3.31)$$

avec $\vec{r} = \vec{x} - \vec{X}$. Cela donne

$$\mathcal{M}_{\vec{X}} = \underline{\underline{J}} \vec{\omega} \quad (3.32)$$

En rapprochant les relations (3.30) et (3.32), nous obtenons :

$$\forall \vec{\omega} \in \mathbb{R}^d \quad \int_{\Omega_s} (\vec{x} - \vec{X}) \times (\rho_s \vec{\omega} \times (\vec{x} - \vec{X})) d\Omega = \underline{\underline{J}} \vec{\omega} \quad (3.33)$$

Et en prenant $\vec{\omega} = \underline{\underline{J}}^{-1} \vec{\Gamma}$, on obtient

$$\vec{f}_{\vec{\Gamma}} = (\rho_s \underline{\underline{J}}^{-1} \vec{\Gamma}) \times (\vec{x} - \vec{X}) \quad (3.34)$$

On pourrait aussi vérifier par un calcul direct que \vec{f}_F^i vérifie la relation (3.27). Finalement on obtient, une fonction continue $\vec{f}_{nh}^i(\vec{x}, t^n)$ qui est déduite du torseur discret $\{\vec{F}_{nh}^i, \vec{\Gamma}_{nh}^i\}$ par la relation

$$\vec{f}_{nh}^i(\vec{x}, t^n) = \frac{\vec{F}_{nh}^i(\vec{x}, t^n)}{|\Omega_s^i|} + (\rho_s \underline{\underline{J}}_i^{-1} \vec{\Gamma}_{nh}^i(\vec{x}, t^n)) \times (\vec{x} - \vec{X}_i) \quad (3.35)$$

où on a rajouté tous les indices et exposants afin de faire le lien avec la relation (3.25). Cette expression est à rapprocher à celle obtenue par [ACE99] et rappelée dans l'équation (1.18). La différence entre la relation (1.18) et notre formulation forte (3.20) dans le solide est que les forces hydrodynamiques apparaissent explicitement dans (1.18) tandis qu'elles interviennent au travers des conditions aux limites dans (3.20).

3.3.5 La matrice d'inertie

On peut rappeler ici, diverses formules permettant de calculer la matrice d'inertie. Dans le repère cartésien, la matrice d'inertie est une matrice symétrique de la forme

$$\underline{\underline{J}} = \begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{xy} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{xz} & I_{yz} & I_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad I_{ij} = \int_{\Omega_s} (r^2 \delta_{ij} - r_i r_j) d\Omega \quad (3.36)$$

où i, j sont égaux à x, y, z , r la distance au centre de gravité du solide et $\delta_{i,j}$ le symbole de Kronecker.

Comme cette matrice est symétrique et réelle, elle est diagonalisable et on exprime habituellement cette matrice dans la base de ses directions principales. Les particules considérées dans ce manuscrit ont un axe de symétrie \vec{p} qui est une des directions principales que l'on peut prendre dans la suite colinéaire à la direction x . Dans le cas général, si $\vec{p} = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta))$ avec les notations de la figure 1.4, on doit exprimer la matrice d'inertie dans le repère (O, x, y, z) à partir cette la matrice diagonale en utilisant la matrice de changement de base $\underline{\underline{P}}$:

$$\underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) & \sin(\theta) \sin(\phi) & \cos(\theta) \\ \cos(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) \sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

et on a

$$\underline{\underline{J}}_{x,y,z} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{J}} \underline{\underline{P}} \quad (3.38)$$

On peut donner les matrices d'inertie les plus courantes pour un solide de densité ρ_s :

- une sphère de rayon R

$$\underline{\underline{J}} = \rho_s \frac{4}{3} \pi R^3 \begin{bmatrix} \frac{2R^2}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2R^2}{5} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2R^2}{5} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

- une ellipsoïde de demi-grand axe $L/2$ (direction x) et demi-petits axes R (relations (2.52) - (2.53)) :

$$\underline{\underline{J}} = \rho_s \frac{4}{3} \pi R^2 \frac{L}{2} \begin{bmatrix} \frac{2R^2}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4R^2 + L^2}{20} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4R^2 + L^2}{20} \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

- un cylindre de révolution de hauteur L (axes x) et rayon R :

$$\underline{\underline{J}} = \rho_s \pi R^2 L \begin{bmatrix} \frac{R^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{(3R^2 + L^2)}{12} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(3R^2 + L^2)}{12} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

- la particule à bords arrondis de hauteur L et rayon R (relations (2.51)) :

$$\underline{\underline{J}} = J_{\text{cylindre}} + \rho_s \frac{4}{3} \pi R^3 \begin{bmatrix} \frac{2R^2}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2R^2}{5} + \frac{L^2}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2R^2}{5} + \frac{L^2}{4} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

Pour le cas 2D, la rotation s'effectue par rapport à la direction perpendiculaire z dans ce cas il suffit de calculer le moment d'inertie I_{zz} par rapport à cette direction :

- un disque de rayon R :

$$I_{zz} = \rho_s \pi R^2 \frac{R^2}{2} \quad (3.43)$$

qui peut être vu comme la limite pour $L \rightarrow 0$ d'un cylindre 3D .

- une ellipse de demi-grand axe $L/2$ et demi-petit axe R :

$$I_{zz} = \rho_s \pi R \frac{L}{2} \frac{R^2 + (L/2)^2}{4} \quad (3.44)$$

- un rectangle de longueur L et hauteur $2R$:

$$I_{zz} = \rho_s 2RL \frac{L^2 + (2R)^2}{12} \quad (3.45)$$

- la particule rectangulaire à bords arrondis

$$I_{zz} = I_{zz}(\text{rectangle}) + \rho_s \pi R^2 \left(\frac{L^2}{4} + \frac{R^2}{2} \right) \quad (3.46)$$

3.4 Description et transport de la phase solide à N particules

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté notre méthode générale pour décrire la phase solide à l'aide d'une fonction caractéristique, calculée à partir d'une fonction level-set, et transporter cette fonction. Nous présentons le calcul de ces fonctions lorsque le domaine solide est constitué de plusieurs particules, puis la méthode de corrections des positions et orientations des particules.

3.4.1 La fonction level-set pour N particules

La généralisation de la fonction level-set à un ensemble de particules $\Omega_s = \bigcup_{i=1}^N \Omega_s^i$ est direct. Si on désigne par α_s^i une fonction level-set associée à la particule Ω_s^i , alors on vérifie aisément que la fonction :

$$\forall \vec{x} \in \Omega \quad \alpha_s(\vec{x}) = \max_{i=1\dots N} \alpha_s^i(\vec{x}) \quad (3.47)$$

est bien une courbe de niveau pour le domaine Ω , et c'est la définition que nous avons retenue. Les fonctions level-set associée à chacune des particules sont calculées à l'aide des formules présentées dans le chapitre précédent. Le calcul de la fonction caractéristique se fait selon la formule (2.54). Nous avons représenté sur la figure 3.6 la valeur de α_s , de la fonction caractéristique, et l'isovaleur nulle de α_s :

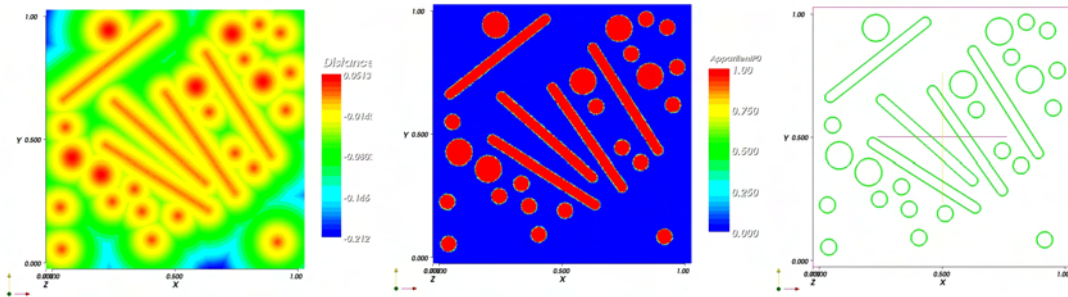


FIGURE 3.6 – fonction level set α_s , fonction caractéristique et isovaleur nulle de α_s pour un ensemble de particules

3.4.2 Gestion des collisions entre particules

Une stratégie pour empêcher la formation d'amas peut être mise en oeuvre lors de l'étape du transport Lagrangien. La mise à jour des positions des particules revient à déplacer N corps solides, dotées d'une vitesse uniforme, entre les instants t et $t + \Delta t$. En effet, on peut considérer que l'on a des particules ayant des vitesses, des vitesses angulaires et des masses ponctuelles qui se déplacent dans un milieu neutre (on néglige la présence du fluide). Pour éviter les recouvrements, et si la densité de ces particules n'est pas importante, on peut ajouter des chocs élastiques pour corriger les trajectoires

des particules. Dans ce contexte, le problème est relativement simple à résoudre. Entre le temps t et $t + \Delta t$, on regarde la trajectoire de chaque particule qui a un mouvement uniforme imposé par sa vitesse propre. Il suffit de détecter si elle rentre en collision avec une autre particule. Dans ce cas sa trajectoire va être modifiée et sa nouvelle vitesse et sa rotation après le choc va être donné par la conservation de la quantité de mouvement, du moment cinétique et de l'énergie cinétique. La détection de ces chocs peut se faire en regardant les valeurs des distances entre particules D_{ij} et H_{ij} définies dans les sections précédentes. Les méthodes mises en oeuvre pour regarder le déplacement de ces particules sont largement connues et sont utilisées par exemple pour faire des films d'animation [AG85, Bar89].

Dans notre cas le nombre de collisions est limité car le champ de vitesse calculé prend en compte la présence des autres particules. Comme on l'a mentionné dans l'introduction du chapitre ces collisions (ou recouvrements) ont lieu principalement car on prend un pas de temps trop grand pour le déplacement Lagrangien. De nombreux auteurs ont proposé des stratégies pour empêcher ce recouvrement, on peut regarder par exemple [Mau97, HPZ01, GPH⁺01]. Nous avons testé deux types d'approche qui reviennent à changer le champ de vitesse ou à ajouter des forces de répulsion.

3.4.2.1 Méthode par modification du champ de vitesse

Si la modification de la position d'une particule i est due à un choc élastique avec la particule j cela revient à déplacer le centre de la particule le long de la normale $\vec{n}_{i \rightarrow j}$ car c'est cette composante de la vitesse qui est modifiée lors du choc. Prendre en compte les chocs revient à modifier la vitesse $\vec{u}(\vec{X}_i)$ dans toutes les directions $\vec{n}_{i \rightarrow j}$ correspondant aux particules j qui vont rentrer en contact avec la particule i durant le temps Δt .

À partir de cette remarque, [LMC05] avait proposé une méthode rudimentaire permettant d'assurer l'existence d'une zone fluide entre deux fibres i et j qui vérifient le critère de collision :

$$H_{ij} < 2R + \delta \quad \text{et} \quad l_{ij} < L/2 + \delta \quad \text{et} \quad l_{ji} < L/2 + \delta \quad (3.48)$$

où δ définit la taille de la zone d'exclusion autour de la fibre et les longueurs H_{ij} , l_{ij} , l_{ji} sont définies par les relations (3.8). Cette taille dépend de la taille de maille et donc de la précision voulue dans notre calcul.

Cela revient à considérer qu'il y a eu un choc entre les deux fibres et qu'il y a une vitesse négative dans la direction $\vec{p}_i \times \vec{p}_j$ qui repousse la fibre i .

Après avoir calculer la nouvelle position des particules donnée par le champ de vitesse provenant de la résolution du problème de Stokes, la séquence de correction des positions est la suivante pour des fibres :

1. On fixe un numéro i
2. On calcule les H_{ij} , l_{ij} et l_{ji} pour $j \neq i$
3. On obtient un ensemble de j qui vérifient le critère (3.48) et on choisit le j qui correspond au plus petit H_{ij}
4. Pour ce couple de fibres, on note \vec{P}_{ij} le point de i qui est le plus proche de la fibre j ; les coordonnées de ce point sont données par la relation $\vec{P}_{ij} = \vec{X}_i + l_{ij} \vec{p}_i$. De la même façon, on définit le point P_{ji} qui appartient à l'axe de la fibre j par $P_{ji} = \vec{X}_j + l_{ji} \vec{p}_j$

(voir figure 3.3). Finalement, on note $\vec{n}_{i \rightarrow j}$ le vecteur normalisé qui est colinéaire à $\overrightarrow{P_{ij}P_{ji}}$ et on prend $H_{ij} = \|\overrightarrow{P_{ij}P_{ji}}\|$.

5. On déplace le point P_{ij} vers le point \vec{P}'_{ij} définie par $\overrightarrow{P_{ij}P'_{ij}} = -(2R + \delta - H_{ij})\vec{n}_{i \rightarrow j}$.
6. La nouvelle position du centre \vec{X}'_i et le nouveau vecteur orientation \vec{p}'_i sont calculés en prenant le point \vec{P}'_{ij} et le point de coordonnée $\vec{P} = \vec{X}_i - l_{ij}\vec{p}_i$:

$$\vec{X}'_i = \frac{\vec{P} + \vec{P}'_{ij}}{2} \quad \text{et} \quad \vec{p}'_i = \frac{\overrightarrow{PP'_{ij}}}{\|\overrightarrow{PP'_{ij}}\|}$$

Si $l_{ij} = l_{ji} = 0$, on a $\vec{P}'_{ij} = \vec{X}_i$ et $\vec{P}'_{ji} = \vec{X}_j$. Dans ce cas, on ne change pas \vec{p}_i et la nouvelle position de $\vec{X}'_i = P'_{ij}$.

On fait cela pour toute les particules i et on itère cette boucle jusqu'à qu'il n'y ait plus de collisions détectées (en général pas plus de deux, trois fois, si le pas de temps Δt est faible). Cet algorithme est le même pour des sphères et un mélange de sphères et de fibres. C'est le même type d'algorithme qui est utilisé pour créer des échantillons dans un VER tout en évitant les recouvrements.

Un exemple est montré sur la figure 3.7, et on peut voir que cette méthode évite la formation d'amas.

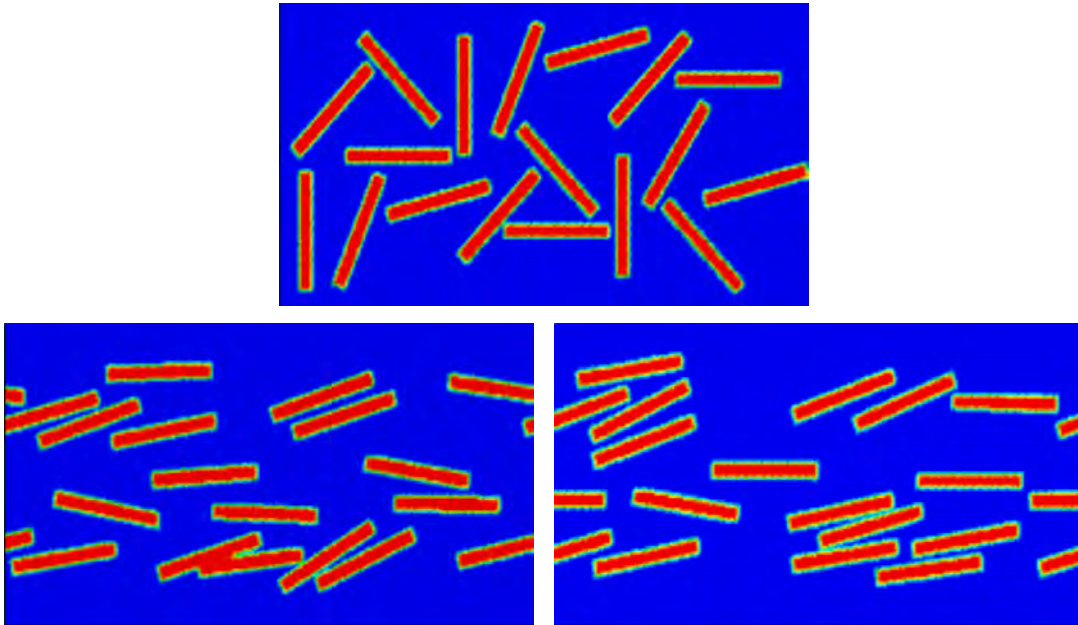


FIGURE 3.7 – Exemple de calcul avec une stratégie de collision $\delta = .005$ et $\Delta t = 0.02$: (a) positions des fibres à $t = 0$ avec un schéma d'Euler ; (b) position des fibres à $t = 10$; (c) position des fibres à $t = 10$ en utilisant la stratégie de gestion des collisions.

3.4.2.2 Méthode par modification des forces

Comme on a introduit des forces de répulsions dans le chapitre précédent, il est apparu naturel de les utiliser lors de la mise à jour de la position des particules. Le point de départ

est la relation fondamentale de la dynamique qui permet d'écrire

$$M \frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} = \vec{F}. \quad (3.49)$$

Si on fait un développement à l'ordre 2, la nouvelle position du centre de la particule est donnée par

$$\vec{X}(t + \Delta t) = \vec{X}(t) + \vec{u}(\vec{X})(t) \Delta t + \frac{\vec{F}}{2M} \Delta t^2 \quad (3.50)$$

où on voit apparaître un terme de correction d'ordre 2.

Par conséquent, pour éviter la formation d'amas numériques, nous avons adopté une stratégie de correction des positions et orientations des particules après leur transport Lagrangien. La mise à jour des positions et orientations de la particule i se fait selon les équations suivantes :

$$\vec{X}_i(t^{n+1}) = \vec{X}_i(t^n) + \vec{U}_i^n \Delta t + \delta \vec{X}_i(t^n) \quad (3.51)$$

$$\vec{p}_i(t^{n+1}) = \vec{p}_i(t^n) + \Delta t \underline{\underline{\Omega}}(\vec{u}(\vec{X}_i(t^n), t^n)) \cdot \vec{p}_i(t^n) + \delta \vec{p}_i(t^n) \quad (3.52)$$

où $\delta \vec{X}_i(t^n)$ et $\delta \vec{p}_i(t^n)$ désignent respectivement les corrections des positions et des orientations de la particule i . Elles sont prises comme des perturbations d'ordre 2 en temps :

$$\delta \vec{X}_i(t^n) = \frac{\vec{F}_i^{nh}(t^n)}{M_i} \Delta t^2 \quad (3.53)$$

$$\delta \vec{p}_i(t^n) = \Delta t^2 \left[\underline{\underline{J}}_i^{-1} \left(\vec{\Gamma}_i^{nh}(t^n) - \vec{\omega}(t^n) \times (\underline{\underline{J}}_i \vec{\omega}(t^n)) \right) \times \vec{p}_i(t^n) + \vec{\omega}(t^n) \times (\vec{\omega}(t^n) \times \vec{p}_i(t^n)) \right] \quad (3.54)$$

En 2D, la relation (3.54) se simplifie car $\vec{\omega}$ et $\vec{\Gamma}$ sont colinéaires à z et on a

$$\delta p_x = \Delta t^2 \left(-J_{zz}^{-1} \Gamma_z p_y - \omega_z^2 p_x \right) \quad (3.55)$$

$$\delta p_y = \Delta t^2 \left(J_{zz}^{-1} \Gamma_z p_x - \omega_z^2 p_y \right)$$

En pratique, on fait plusieurs fois cette correction en évaluant à chaque itération la force et le couple de répulsion jusqu'à que la distance entre les particules soit supérieure à la distance de sécurité imposée par la précision du maillage.

3.4.3 Raffinement de maillage et h -adaptation

Dans le cadre d'une formulation multi-domaine, la capture d'interface peut être optimisée en raffinant le maillage au voisinage de l'interface fluide/solide. En effet, l'adaptation des maillages est un moyen d'améliorer la précision des résultats numériques. Les outils développés dans l'équipe CIM permettent de raffiner le maillage dans la zone d'interface $\partial\Omega_s$ de manière anisotrope de façon à contrôler la couche d'éléments au niveau de l'interface et son orientation. Pour cela, une carte de métrique anisotrope est distribuée sur le maillage et cela va permettre de définir les tailles de maille dans chaque direction de l'espace [GC05, CDD00]. Cette métrique est représentée par un tenseur symétrique,

défini positif, d'ordre la dimension de l'espace et dont les vecteurs propres déterminent les directions d'allongements des éléments et les valeurs propres définissent l'inverse des valeurs des tailles de maille associées. Par exemple, la métrique M suivante,

$$M = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 20 \end{bmatrix}$$

donnera, dans un repère cartésien, des tailles de maille de 0.01 dans la direction x et de 0.0025 dans la direction y .

Notre interface étant décrite par la variation du gradient d'une fonction level set, la métrique développée dans [GC05] est la mieux adaptée à notre objectif. Elle est donnée par

$$M = m^2(\nabla\alpha \otimes \nabla\alpha^T) + \epsilon^2\mathbb{E}$$

où \mathbb{E} est le tenseur unité et la taille de maille dans les directions $\nabla\alpha$ et $\nabla\alpha^T$ sont respectivement $1/\sqrt{m^2|\nabla\alpha|^2 + \epsilon^2}$ et $1/\epsilon$.

La fonction α étant définie sur tout le domaine cette métrique est appliquée à toutes les lignes de niveaux, ce qui est inutile d'un point de vue de la pertinence de l'information puisque seule l'interface $\partial\Omega_s$ nous intéresse. Donc, si on ne désire remailler que sur une certaine épaisseur e autour de l'interface définie par $\alpha = 0$, la métrique finale est alors :

$$M = \begin{cases} \epsilon^2\mathbb{E} & \text{si } |\alpha| > e \\ \left(\frac{N}{e} - \epsilon^2\right) \frac{\nabla\alpha \otimes \nabla\alpha^T}{|\nabla\alpha|^2} + \epsilon^2\mathbb{E} & \text{si } |\alpha| < e \end{cases} \quad (3.56)$$

où N est le nombre de couches désiré sur l'épaisseur e , ϵ un paramètre définissant la taille de maille de fond. De cette manière dans l'épaisseur e et dans la direction de $\nabla\alpha$ on obtient bien N éléments de taille e/N et dans la direction de $\nabla\alpha^T$, nous avons une taille de maille égale à celle du maillage de fond. La figure 3.8 montre un exemple de raffinement isotrope et anisotrope autour de l'interface d'un disque de rayon .25 et situé au point (.5, .5).

Puisque les particules se déplacent, il faut donc raffiner le maillage autour des particules au cours du temps. Il faut mettre en balance le temps de calcul nécessaire au remaillage et le temps de calcul pour résoudre le problème éléments finis sur un maillage plus fin. Il y a aussi le problème provenant du transport des champs solutions sur le nouveau maillage. Dans notre cas, on résoud à chaque pas de temps un problème stationnaire (le problème de Stokes) et cette perte de précision n'intervient pas. Cela ne serait pas le cas si on prenait en compte les termes d'inertie.

Il y a aussi une petite contradiction avec un des arguments mis en avant pour utiliser une méthode de domaine fictif plutôt qu'une méthode ALE : comme on travaille sur un domaine fixe, il n'est pas nécessaire de remailler autour des particules quand elles bougent. Cet argument est correct en 2D, mais n'est plus possible en 3D. En effet seul le raffinement de maillage permet de faire des calculs 3D sur des maillages de taille raisonnable avec une bonne précision (cela est expliqué dans le chapitre suivant).

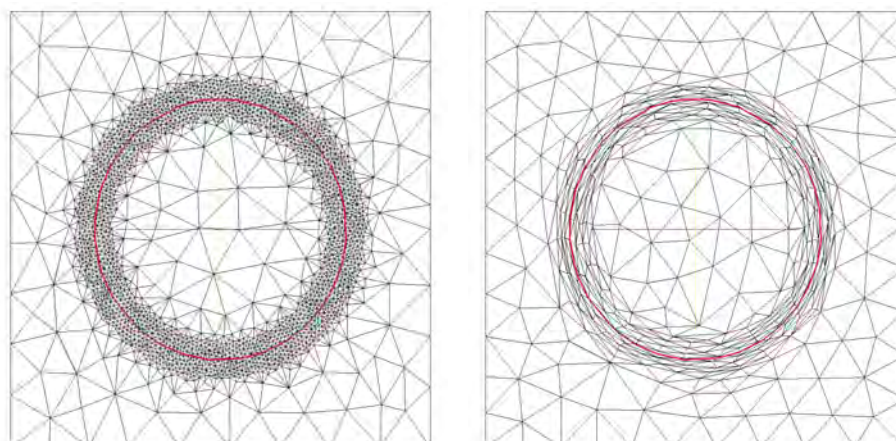


FIGURE 3.8 – Exemples de raffinement de maillage : (a) maillage isotrope avec $h = .01$ pour $|\alpha| < .05$; (b) maillage anisotrope avec $e = .1$ et $N = 10$.

3.5 Générateurs de positions et orientations de particules

Pour étudier l'écoulement d'une suspension, nous devons nous donner une description discrète de sa microstructure, c'est-à-dire un ensemble de particules solides, chacune caractérisée par une géométrie donnée (forme, rayon, rapport de forme), une position initiale, ainsi qu'une orientation. Lorsque seules quelques particules sont impliquées, comme c'est le cas dans ce chapitre et le chapitre précédent, cette description est facile.

Lorsque l'on considère des suspensions plus complexes, impliquant plusieurs populations de particules, et des concentrations plus grandes, cette description de la microstructure n'est plus aussi simple. Premièrement, se pose la question du nombre de particules. En effet, les paramètres que nous cherchons à imposer sont macroscopiques : concentration volumique solide, concentration par population, orientation moyenne. En fonction des valeurs de ces paramètres, nous devons calculer le nombre et la taille des particules à introduire dans la cellule élémentaire. Une fois le nombre de particules choisi, un second problème se pose : comment positionner ces particules au sein de la cellule ? Un positionnement aléatoire sans aucune autre contrainte entraîne de manière presque certaine l'apparition d'un recouvrement de particules, ce qui, comme nous l'avons vu auparavant, conduit à des calculs erronés.

Nous avons proposé une méthodologie qui est loin d'être optimale, mais s'est révélée suffisante pour les calculs que nous avons à effectuer. Pour cela, un programme a été écrit afin de générer automatiquement la microstructure. L'utilisateur renseigne dans une interface les principales caractéristiques macroscopiques de la suspension :

1. présence de sphères et (ou) de fibres
2. concentration en sphères et (ou) en fibres
3. caractéristiques des fibres : rayon, longueur, orientation (dans une direction ou quelconque)

4. caractéristiques des sphères : type de granulométrie (3 granulométries possibles : sphères identiques ; mélange bimodal de sphères ; mélange de sphères de rayon quelconque) puis, selon la granulométrie choisie :
 - sphères identiques : rayon R des sphères, et type d'arrangement des sphères (a. réseau cubique ; b. réseau cubique centré ; c. arrangement quelconque)
 - mélange bimodal : Rayon R_1 et rayon R_2 des petites et grandes sphères, et un rapport ϕ_1/ϕ_2 des concentrations respectives de chacune des sphères pour un mélange bimodal.
 - mélange de sphères : Rayon R_{min} et rayon R_{max} pour un mélange multimodal (avec N_m modes). En pratique le $k^{ième}$ mode sera caractérisé par un rayon $R_k = R_{min} + \frac{k}{N_m}(R_{max} - R_{min})$.
5. le choix d'une méthode d'ajustement des paramètres : ajustement en taille, ou ajustement en concentration.
6. une distance minimale ϵ entre particules
7. la présence de paroi ou non (l'absence de paroi correspond dans notre étude à une cellule périodique).

Une fois ces différents paramètres renseignés, le calcul se fait en 5 étapes :

- ajustement des paramètres renseignés, selon la méthode choisie.
- génération d'un réseau régulier qui servira de point de départ au positionnement des particules. Naturellement, le réseau contient plus de positions qu'il y a de particules à positionner.
- positionnement aléatoire des particules sur le réseau, avec des orientations aléatoires ou non (selon le type d'orientation choisi) pour les fibres.
- Première correction "aléatoire" des positions des particules
- Algorithme (élémentaire) de correction des positions des particules : tant que la distance entre chaque paire de particules n'est pas supérieure à la distance minimale choisie, on corrige les positions des particules violant cette condition.

Ces différentes étapes sont brièvement décrites ci-dessous et des exemples d'échantillons sont donnés dans les figures 3.9 et 3.10.

3.5.1 Ajustement de paramètres

3.5.1.1 Cas général

Les paramètres renseignés par l'utilisateur ne sont pas forcément directement exploitables, et nécessitent quelques ajustements. Ceci est dû au fait que ces paramètres sont macroscopiques, et qu'ils sont utilisés pour générer une microstructure discrète. En particulier, le nombre de particules impliquées doit être un entier. Illustrons ce phénomène par un exemple : supposons que l'on cherche à créer une microstructure, de concentration solide de 0.2, et constituée de sphères de rayon 0.1 (ces sphères étant insérées dans une cellule cubique d'arête unitaire). On doit donc insérer N_s sphères, avec N_s vérifiant :

$$N_s = \frac{0.2}{\left(\frac{4}{3}\pi(0.1)^3\right)} = 47.75 \approx 47 \quad (3.57)$$

Le nombre attendu de sphères étant entier, on l'arrondit au nombre inférieur le plus proche, donc 47. Un ajustement d'un des deux paramètres macroscopiques est alors nécessaire :

- ajustement de concentration : on insère 47 sphères de rayon 0.1. La concentration ajustée est donc :

$$\phi_{aj} = 47 \times \frac{4}{3}\pi \times (0.1)^3 = 0.197$$

- ajustement de rayon : pour obtenir une concentration de 0.2 avec 47 sphères dans un cube unité, le rayon ajusté des sphères doit être :

$$R = \left(\frac{0.2}{47 \times \frac{4}{3}\pi} \right)^{\frac{1}{3}} = 0.1005 \text{ unité}$$

Cette approche se généralise aisément aux autres cas de figures. Pour des fibres, le rapport de forme n'est pas ajusté ; le seul paramètre ajustable (autre que la concentration) est alors la rayon, comme pour les sphères. Pour des mélanges, chaque famille est caractérisée par une concentration et un rayon, donc la méthode d'ajustement est retenue pour chacun des modes.

3.5.1.2 Arrangement ordonné

Lorsque l'on veut créer une microstructure ordonnée et sans défaut, alors le choix du nombre de particules est plus contraignant. En effet :

- pour un réseau cubique (voir figure 3.10a) : le nombre N_s de sphères doit être le cube d'un autre nombre. En 3D, il existe un entier N_c tel que :

$$N_c^3 \leq N_s \leq (N_c + 1)^3$$

On remplace alors N_s par l'entier le plus proche entre N_c^3 et $(N_c+1)^3$, puis en ajuste en concentration ou en rayon. Dans l'exemple précédent, $N_s = 47$, et $N_c = 3$. On a alors le choix entre remplacer N_s par 27 ou 64. Dans ce cas on choisit 64.

- pour un réseau cubique centré (voir figure 3.10b), on cherche N_c tel que :

$$N_c^3 + (N_c - 1)^3 \leq N_s \leq (N_c + 1)^3 + N_c^3$$

et on remplace ensuite N_s par $N_c^3 + (N_c - 1)^3$ ou $(N_c + 1)^3 + N_c^3$.

3.5.2 Génération de réseau

Une fois le nombre de particules (et leurs tailles respectives) déterminé, il va falloir les positionner au sein de la cellule. Afin d'avoir une répartition aussi homogène que possible, nous avons choisi de les positionner dans un premier temps sur un réseau cubique ordonné, puis de perturber dans un second temps ce réseau initial. Pour déterminer la taille du réseau initial, on calcule le plus petit entier N_r tel que :

$$N_s \leq N_r^3$$

Un réseau régulier de N_r^3 points est ainsi créé dans la cellule unitaire.

Pour les arrangements cubique et cubique centré de sphères, la création de ce réseau n'est pas nécessaire, et les étapes qui suivent ne sont pas nécessaires.

3.5.3 Positionnement initial

A ce stade, nous avons N_s particules à positionner sur un réseau de N_r^3 points répartis dans la cellule. Ce positionnement se fait de manière aléatoire. La position de la particule k est tirée selon une loi uniforme parmi les $N_r^3 - k + 1$ positions libres restantes.

3.5.4 Perturbation du positionnement initial

Afin d'"homogénéiser" encore un peu plus notre microstructure, nous perturbons les positions initiales. Pour cela, nous déterminons un vecteur \vec{V}_ϵ de direction aléatoire et de norme ϵ . La position \vec{X}_k de la particule k est alors remplacée par $\vec{X}_k + \vec{V}_\epsilon$.

3.5.5 Algorithme de correction des positions

Le positionnement initial des particules et la perturbation de leur position se sont faites sans contrainte. A ce stade, il est tout à fait possible que des chevauchements de particules soient apparus. Nous utilisons la méthode itérative de correction des positions des particules présentée dans la partie 3.4.2.1. La méthode utilisée est la suivante : après l'itération i nous connaissons les positions \vec{X}_k^i des particules pour cette itération. Pour chaque particule k , nous regardons la distance qui la sépare des autres particules $j \neq k$. Si cette distance est supérieure à la distance minimale autorisée ϵ , alors nous ne faisons rien. Sinon, alors une correction $\delta\vec{X}_k^i(j)$ non nulle devra être appliquée. A chaque itération i et pour chaque particule k , nous calculons l'ensemble des corrections à lui appliquer de la façon suivante :

$$\delta\vec{X}_k(i) = \sum_{j \neq k} \delta\vec{X}_k^i(j)$$

Et la position des particules à l'itération suivante est :

$$\vec{X}_k^{i+1} = \vec{X}_k^i + \delta\vec{X}_k(i)$$

Ici les chevauchements peuvent être importants, aussi nous réitérons la phase de correction jusqu'à ce qu'il n'y ait plus aucun chevauchement dans la cellule. Rien ne garantit la convergence de cet algorithme, mais pour des valeurs raisonnables de paramètres renseignés par l'utilisateur, on converge vers une microstructure acceptable. Sur les figures 3.9 et 3.10, nous avons représenté quelques exemples de microstructures générées (en dimension deux et trois) à l'aide de cet outil.

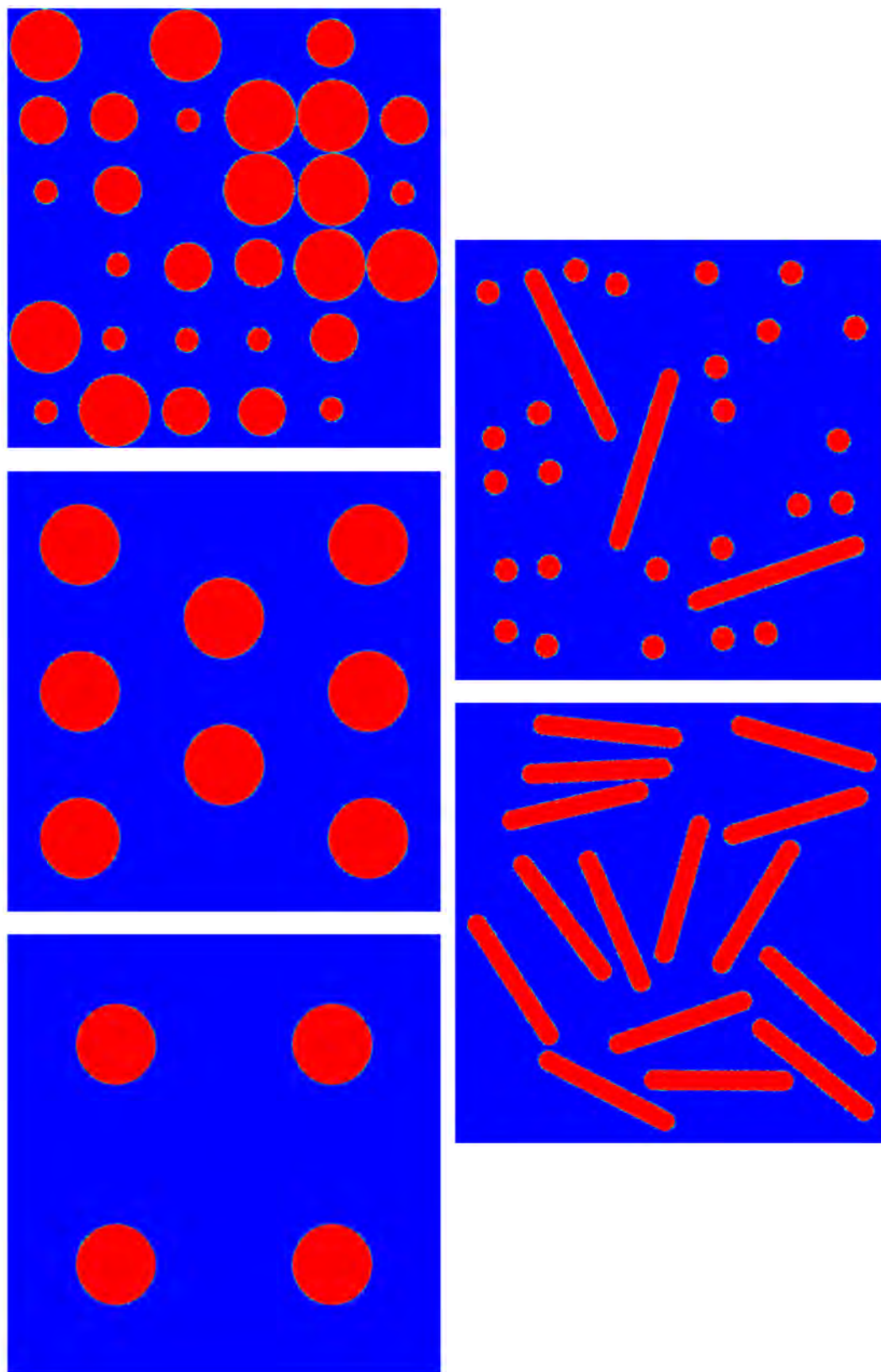


FIGURE 3.9 – Exemples d’arrangement en 2D : (a) sphères sur un réseau cubique; (b) sphères sur un réseau cubique centré; (c) mélange de sphères; (d) fibres aléatoires; (e) mélange de fibres et sphères

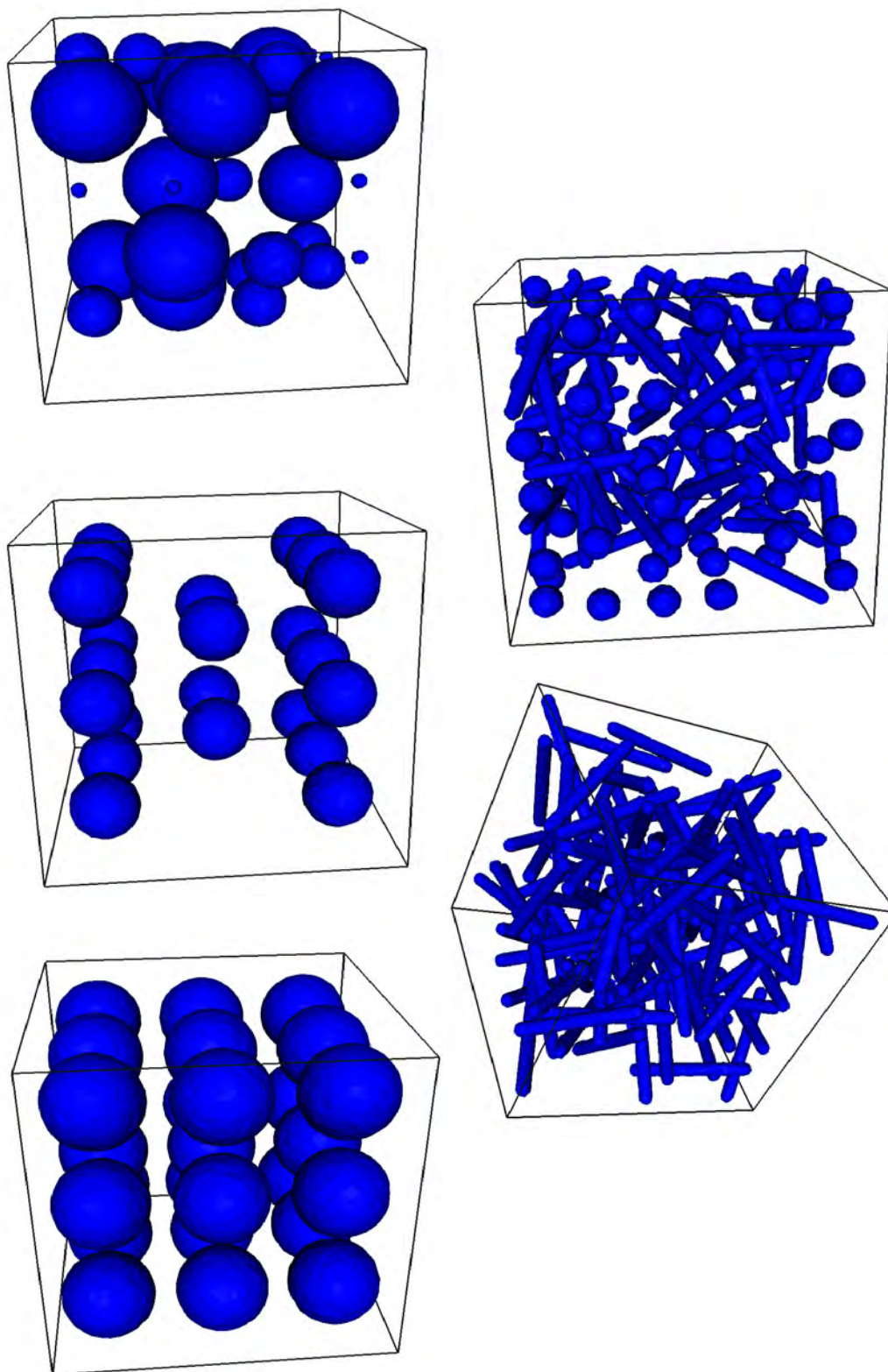


FIGURE 3.10 – Exemples d'arrangement en 3D : (a) sphères sur un réseau cubique; (b) sphères sur un réseau cubique centré; (c) mélange de sphères; (d) fibres aléatoires; (e) mélange de fibres et sphères

3.6 Premiers résultats numériques et expérimentaux

Nous avons étudié diverses situations mettant en jeu des interactions entre plusieurs corps solides.

3.6.1 Interactions de deux sphères dans un écoulement de Couette

On reprend la géométrie et les conditions aux limites du chapitre 2, c'est à dire une cavité de taille 2×1 et un taux de cisaillement $\dot{\gamma} = 1$. Le pas de temps est $\Delta t = .05$ et on ne fait pas intervenir de forces de répulsion additionnelles. Cet exemple est tiré de l'article [HHM04a]. La cellule contient du fluide et deux sphères de rayon $R = .12$ initialement placées aux points $(.5, .6)$ et $(1.5, .4)$. Les deux sphères vont se déplacer l'une vers l'autre, puis vont se repousser pour éviter de rentrer en collision à cause des forces d'interaction hydrodynamique. Enfin elles vont revenir à leurs hauteurs initiales. La trajectoire observée avec une méthode de déplacement Lagrangienne (relations (2.58) ou (2.62)) est tracée sur la figure 3.11.

Une sphère seule soumise à un écoulement de cisaillement uniforme crée un petit vortex (voir figure 3.12) car elle tourne sur elle-même en avançant. Mais si elles sont proches l'une de l'autre elles sont entraînées dans un mouvement de rotation global qui les empêche de rentrer en collision (voir figure 3.12).

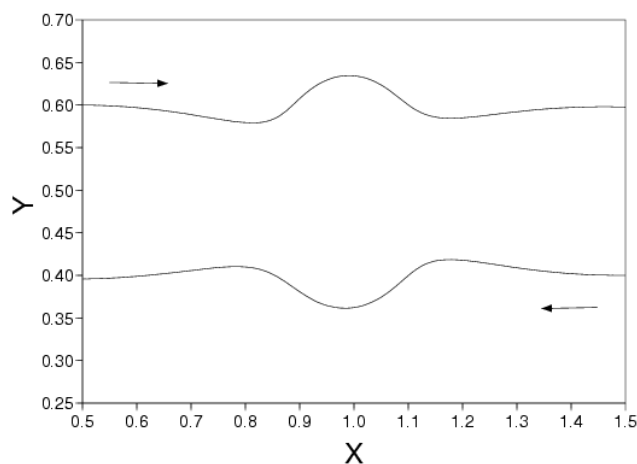


FIGURE 3.11 – Orbite des centres des particules si la distance initiale des particules par rapport à la ligne moyenne est .1

3.6.2 Calcul 2D pour une suspension fibre-sphères

Nous avons ensuite effectué un calcul sur un carré, contenant du fluide une fibre et plusieurs sphères. La concentration en corps solide est de 31.55 %. Sur la figure 3.13, nous avons représenté l'arrangement des particules à l'instant initial et pour $t = 5$ s. La figure 3.13 montre que l'on a toujours un mouvement de rotation de la fibre mais qui est plus rapide. Si on reprend la formule (2.80), on peut relier en première approximation

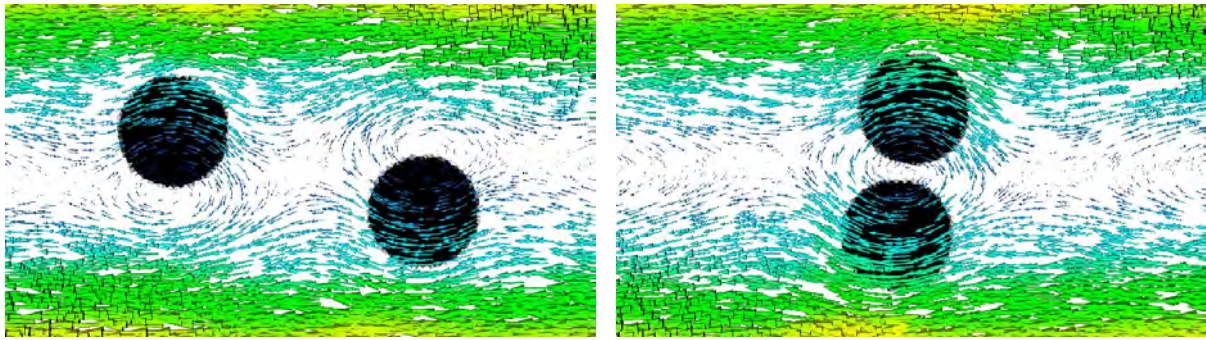


FIGURE 3.12 – Zoom sur le champ de vitesse autour des sphères : $t = 2.5$; $t = 6.5$

ce résultat à une augmentation du taux de cisaillement autour de la fibre à cause de la présence des sphères.

3.6.3 Calcul 3D pour une suspension fibre-sphères

On a regardé le comportement d'une suspension composée d'une fibre et de sphères. Les calculs ont été faits pour une concentration solide de 17.5 %. On montre sur les figures 3.14 que le mouvement de la fibre est modifié par la présence des sphères. Il faudrait continuer les calculs plus longtemps pour voir si la période de rotation de la fibre est modifiée.

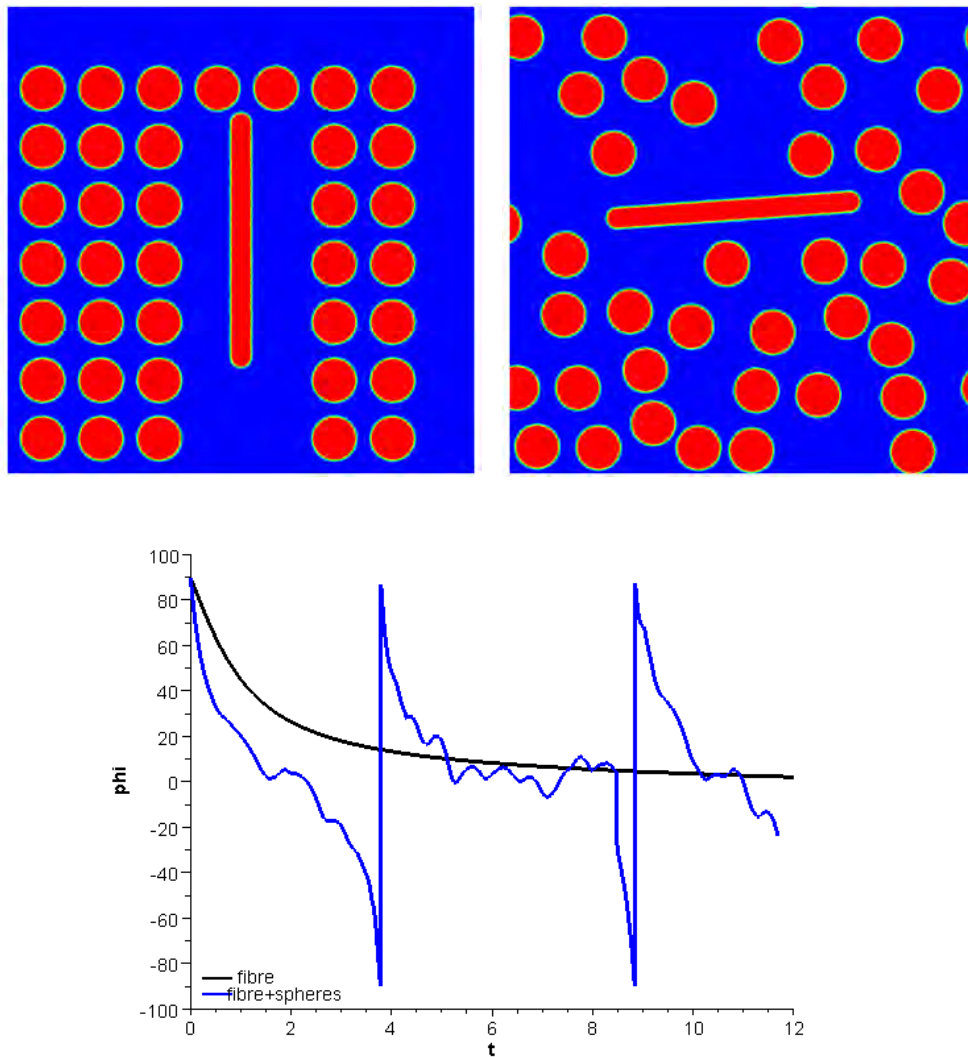


FIGURE 3.13 – Evolution de la suspension avec $\Phi = 31.55\%$, $\dot{\gamma} = 1 \text{ s}^{-1}$ et $\Delta t = .02$: (a) situation initiale ; (b) $t = 9.4 \text{ s}$; (c) comparaison entre l'évolution φ pour une fibre et une fibre et des sphères

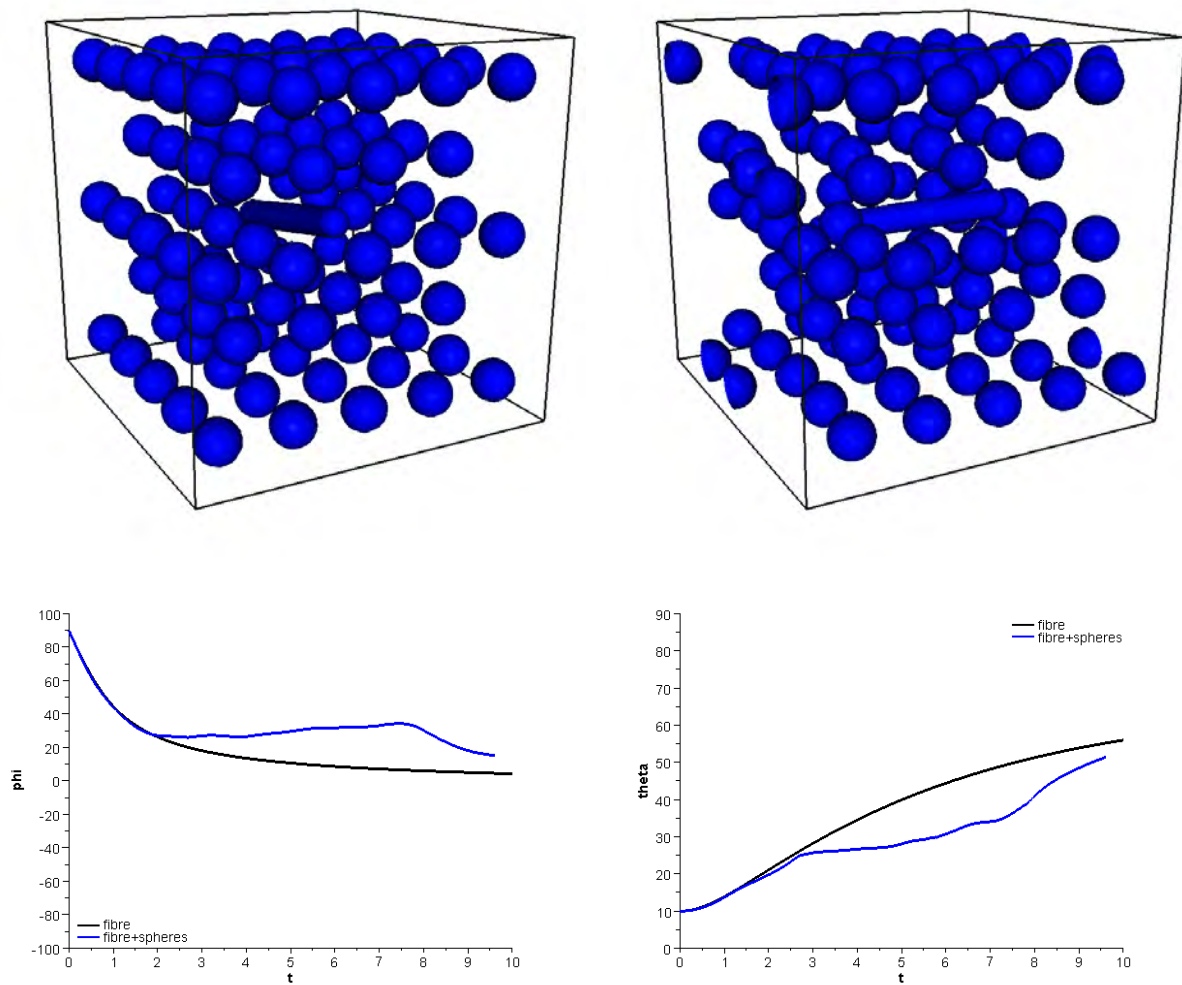


FIGURE 3.14 – Evolution de la suspension avec $\Phi = 17.5 \%$, $\dot{\gamma} = 1 \text{ s}^{-1}$ et $\Delta t = .01$: (a) situation initiale ; (b) $t = 9.6 \text{ s}$; comparaison entre l'évolution des angles φ et θ pour une fibre et une fibre et des sphères : (c) φ ; (d) θ

3.6.4 Observations expérimentales d' une suspension fibre-sphères

Une tentative utilisant des outils rhéo-optiques [Col04, Rou06] a été faite pour visualiser et comprendre le comportement d'une population d'objets solides sous l'effet d'un écoulement de cisaillement [Cha07]. Il faut remarquer que la configuration expérimentale ne correspond pas complètement aux calculs des paragraphes précédent car le cisaillement est imposé par deux plateaux en rotation et le taux de cisaillement n'est pas constant mais dépend de la position radiale.

3.6.4.1 Dispositif expérimental

Le rhéomètre contra-rotatif a été développé par le groupe PCP et il possède notamment un système optique constitué de deux plateaux en verre mobiles reliés à deux moteurs tournant indépendamment en sens opposé. Couplé à un microscope optique, ce dispositif permet d'observer en direct et en continu le comportement d'une charge en suspension dans une matrice fluide soumise à un cisaillement. Les observations sont faites à l'aide d'une caméra et d'un enregistreur DVD. Le schéma du dispositif complet est donné par la figure 3.15.

Cet appareil présente les avantages suivants :

- il permet d'immobiliser l'objet en suspension dans le repère du laboratoire. En effet, en jouant sur les vitesses des deux plateaux qui tournent en sens opposé, il est possible d'imposer à la zone dans laquelle se trouve l'objet, une vitesse de translation nulle ;
- il autorise les observations du comportement des objets in situ, grâce au système optique et aux plateaux transparents, ce que ne permet pas un mélangeur industriel ;
- des capteurs et un logiciel permettent d'enregistrer tout au long d'une manipulation les valeurs de l'entrefer, de la position de l'objet observé par rapport à l'axe de rotation des plateaux, ainsi que les vitesses respectives des deux plateaux. Chacune de ces valeurs peut varier au cours d'un essai et leur enregistrement en continu permet de connaître à tout moment la valeur du taux de cisaillement appliqué.

Dans nos expériences nous avons utilisé des particules sphériques et allongées (fibres) en verre dans une matrice de silicone qui est un fluide newtonien de forte viscosité (200 Pa.s). Le rayon des sphères est compris entre 100 μm et 150 μm et pour les fibres on a un rayon entre 20 et 14 μm et un rapport de forme de 5 à 30. On a préparé des échantillons ayant des concentrations de 0 %, 5%, 8% et 10 % de particules sphériques auxquels on a ajouté quelques fibres (voir figure 3.16) . Avec cette configuration on a principalement des interactions entre des sphères et une fibre isolée.

Le taux de cisaillement est donné par la formule

$$\dot{\gamma} = \frac{(\omega_{\text{inf}} + \omega_{\text{sup}}) r}{h} \quad (3.58)$$

où ω_{inf} et ω_{sup} sont respectivement les vitesses de rotation des plateaux inférieurs et supérieurs, r la position dans la direction radiale et h la distance entre les deux plateaux (lors des expériences $.6 \text{ mm} < h < 1 \text{ mm}$ et $0 < \dot{\gamma} < 4 \text{ s}^{-1}$).

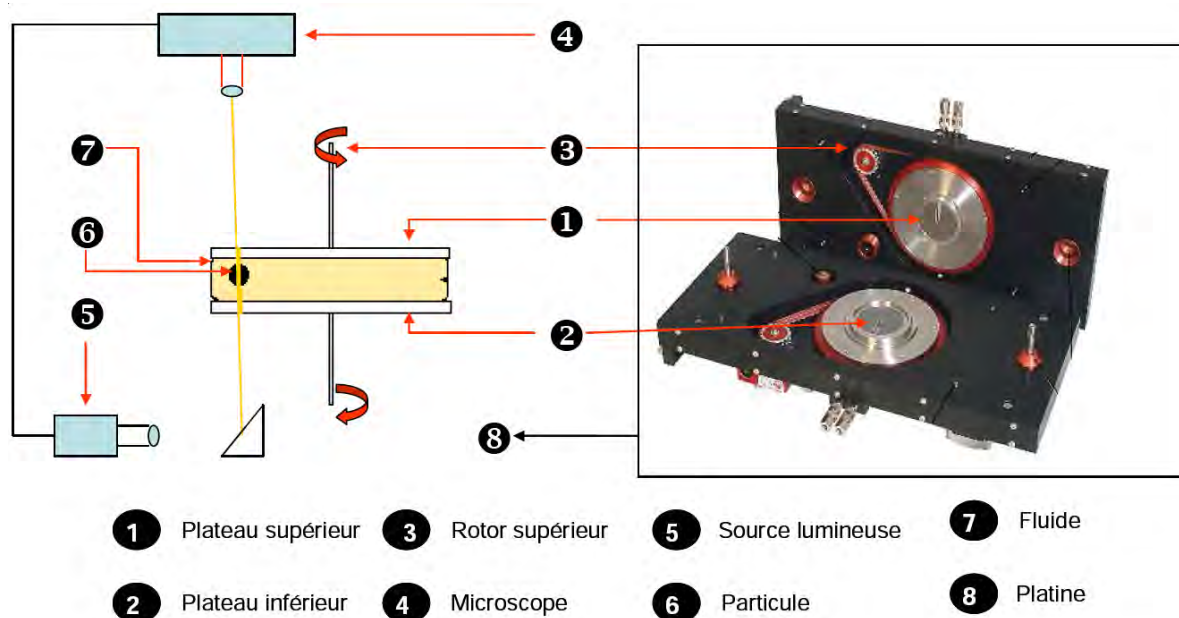
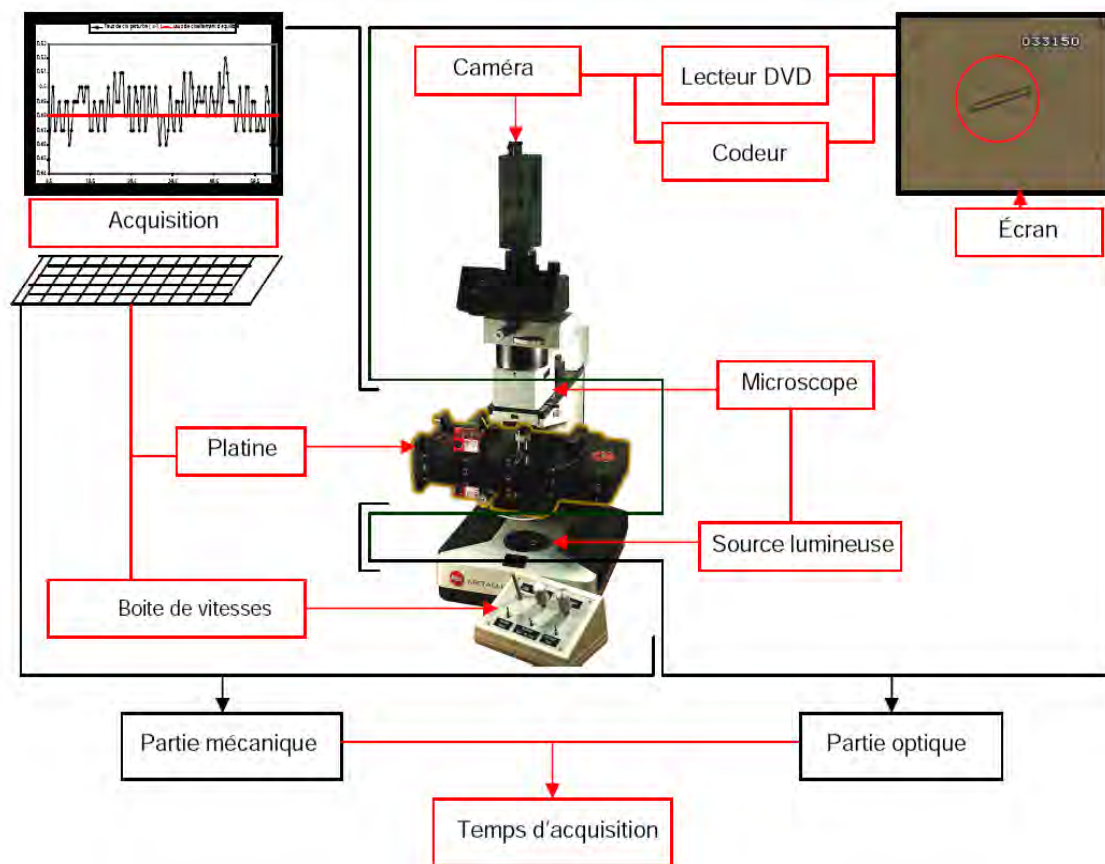


FIGURE 3.15 – Schéma du rhéomètre contra-rotatif : (a) description des parties mécaniques et optiques ; (b) zoom sur platine et la la cellule dans laquelle est placée la suspension

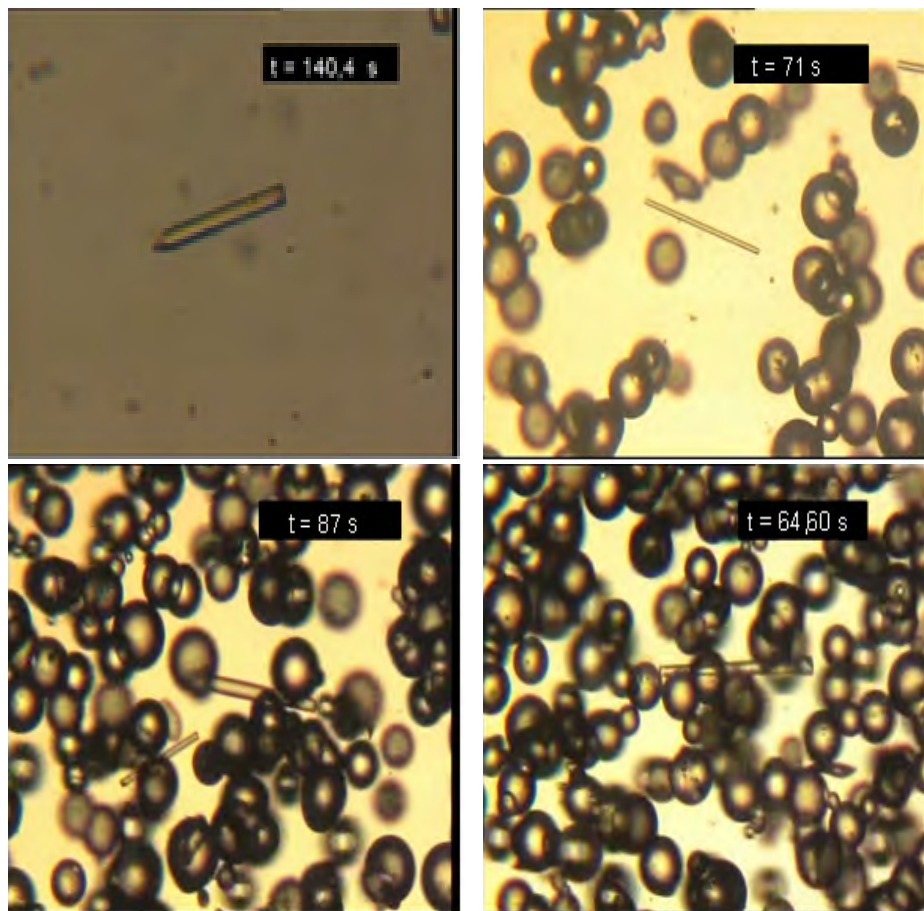


FIGURE 3.16 – Le système sphères-fibre pour différentes concentrations volumiques : (a) $\Phi = 0\%$; (b) $\Phi = 5\%$; (c) $\Phi = 8\%$; (d) $\Phi = 10\%$

3.6.4.2 Les mesures effectuées

A l'aide d'un calque, on a aussi mesuré sur l'écran l'évolution de l'angle apparent de la fibre avec la direction horizontale (figure 3.17). Il faut remarquer que la plupart des fibres sont orientées vers le centre des disques (c'est-à-dire perpendiculairement au plan du cisaillement). Afin de faire des comparaisons avec la théorie de Jeffery (equations 2.78)-(2.79), il faut obtenir l'expression de l'évolution de l'angle mesuré α dans le plan (x, z) . Après quelques manipulations trigonométriques, on obtient :

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) = C_\theta \cos\left(-\frac{2\pi t}{T} + C_\varphi\right) \quad (3.59)$$

A cause des interactions avec les sphères, la fibre se déplace en hauteur et ne reste pas à l'endroit où la vitesse est nulle. Pour éviter que la fibre sorte du champ de vision du microscope, on modifie au mieux la vitesse des plateaux pour garder la fibre visible et annuler sa vitesse de déplacement tout en gardant un taux de cisaillement constant.

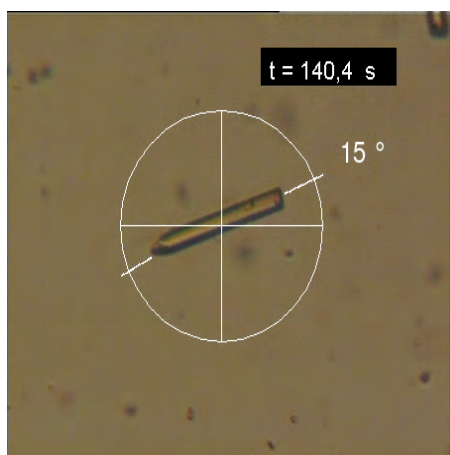


FIGURE 3.17 – Mesure de l’angle apparent pour une fibre sous un cisaillement

3.6.4.3 Analyse des résultats

Si on regarde l’évolution de l’angle α en fonction du temps pour $\Phi = 0\%$, on voit que l’on a toujours un mouvement périodique pour l’orientation de la fibre (figure 3.18a). Pour une concentration de 5% (figure 3.18b), on a toujours un mouvement oscillatoire autour de la position $\alpha = \pi/2$ tandis qu’il y a des situations où $\alpha = 0$ ou π pour des concentrations de 8 et 10% (figures 3.18c et d). Cela signifie que la fibre se trouve dans le plan du cisaillement et on l’a voit tourner sur elle-même. Par conséquent, la fibre passe alternativement d’un mouvement de « kayaking » à un mouvement de rotation dans le plan du cisaillement.

Sur les figures 3.18, on aussi tracé la solution de Jeffery (relation (3.59)) pour un rapport de forme équivalent déduit de la période expérimentale par la relation (2.80). La comparaison avec les résultats expérimentaux est bonne pour $\Phi = 0\%$, moins bonne pour $\Phi = 5\%$.

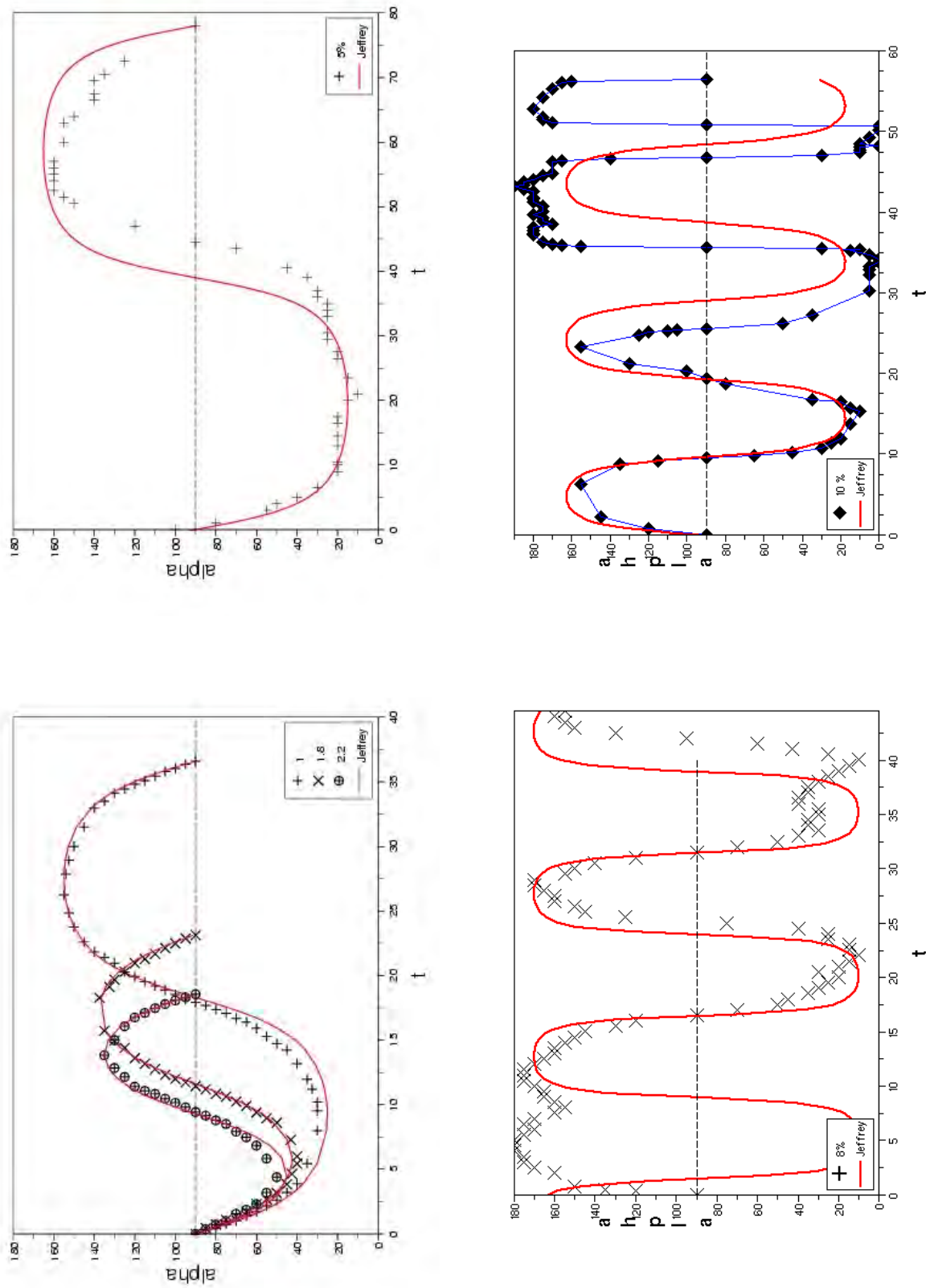


FIGURE 3.18 – Evolution de l'angle α pour : (a) $\Phi = 0\%$ et $\dot{\gamma} = 1$, 1.8, 2.2; (b) $\Phi = 5\%$ et $\dot{\gamma} = 0.88$; (c) $\Phi = 8\%$ et $\dot{\gamma} = 2.65$; (d) $\Phi = 10\%$ et $\dot{\gamma} = 3.6$;

3.7 Conclusion

On n'a pas mentionné dans ce chapitre le travail de programmation concernant la parallélisation du déplacement Lagrangien et l'ajout des solveurs spécifiques à notre formulation élément finis. Il y a aussi la difficulté de travailler avec deux maillages (le maillage du domaine et le maillage correspondant à la position des particules) et d'avoir un partitionnement optimal pour ces deux maillages. Ce travail a été fait dans le cadre de la bibliothèque scientifique développée par le groupe CIM où il existe déjà divers outils comme le remaillage ou le solveur de Stokes P_1^+/P_1 . D'autres outils comme le plongement d'un maillage dans un autre, l'algorithme d'Uzawa, le transport Lagrangien parallélisé ont été développés à l'occasion de cette thèse. De plus notre approche s'est résolument tournée vers le calcul pour des échantillons 3D et cela a imposé quelques contraintes. En particulier certaines méthodes de la littérature n'arrivent pas à passer le cap du calcul académique 2D pour quelques particules à un calcul massif 3D pour une centaine de particules (voir le chapitre suivant). La lourdeur des calculs (par exemple une semaine sur 22 processeurs pour le calcul 3D présenté dans ce chapitre) n'a pas permis d'explorer intensivement toutes les pistes proposées ici.

Dans cette section, nous avons introduit diverses stratégies permettant d'éviter la formation d'amas. Pour cela, on a ajouté une force de répulsion soit dans la formulation éléments finis ou lors du déplacement Lagrangien des particules. La direction de cette force est donnée par la théorie des lubrification qui décrit les forces d'interaction de courte portée entre particules. Cependant, l'intensité et le champ d'action de cette force sont fixés de façon un peu arbitraire. Comme on travaille en régime semi-dilué, le but est seulement d'éviter la formation d'amas et on ajuste donc cette force pour obtenir le comportement désiré. Cependant cette approche devrait encore être validée par des comparaisons avec des observations expérimentales [Cha07].

Si la formulation continue donne de bon résultats si on n'a pas beaucoup de particules, on a remarqué que le solveur de Stokes mettait plus de temps à converger quand il y avait beaucoup de particules. Cela peut venir du choix de la force continue (3.35) qui est constante sur le domaine solide et qui s'annule à la frontière de celui-ci. Il faudrait une transition plus régulière entre le domaine fluide et solide (comme on l'a naturellement pour les forces de gravité grâce à la loi de mélange sur les densités volumiques). Par conséquence cette formulation continue des forces discrètes nécessite un travail plus important et devrait donc être validé dans des situations plus classiques comme la sédimentation de particules [HG99, MBG07] ou la rotation de Quincke [PLL07, LLPP08] (rotation d'une particule isolante, immergée dans un liquide légèrement conducteur soumise à un champ électrique continu).

Finalement, dans les calculs présentés dans le chapitre suivant, on a évité la formation d'amas en prenant des pas de temps relativement petit, en remaillant autour des particules à chaque pas de temps et en introduisant des forces de répulsion lors du déplacement Lagrangien (3.51)-(3.52). Cela nécessite de choisir les bonnes valeurs pour les paramètres intervenant dans l'expression de ces forces. Cependant dans un régime dilué, ces paramètres n'ont pas une grande influence sur le comportement collectif de la population de particules; l'essentiel étant surtout d'éviter la formation d'amas. Nous allons montrer dans le chapitre suivant comment calculer les propriétés macroscopiques de cette suspension définie sur un volume représentatif.

On a aussi montré que l'évolution d'une fibre isolée dans un écoulement de cisaillement est modifiée par la présence de particules sphériques (les calculs numériques doivent être poursuivis pour confirmer ce comportement) . En particulier les résultats expérimentaux montrent que l'équation de Jeferry ne s'applique plus quand la concentration en sphères devient important. Le problème est maintenant de savoir si cela peut affecter le comportement collectif d'une population de fibres.

Chapitre 4

Rhéologie numérique

4.1 Introduction

L'objet de notre travail est de mettre au point un outil numérique permettant de prédire l'évolution d'un composite lors de la phase d'injection. Pour cela, nous nous plaçons à l'échelle microscopique (c'est-à-dire des particules) et nous modélisons le matériau par une matrice fluide contenant un grand nombre de particules de formes différentes.

Les précédents chapitres ont été consacrés à la méthode numérique, par éléments finis, que nous avons mis au point pour simuler l'évolution d'un tel système. Dans ce chapitre nous exposons les résultats de rhéologie numérique que nous avons obtenu à l'aide de cet outil. Pour ce faire, nous avons dû aller plus loin dans notre méthode, et deux nouveaux points ont été abordés :

1. nous avons dû trouver un moyen efficace pour nous affranchir des effets de bords. En effet, nous effectuons nos simulations sur un domaine spatial limité. Les conditions aux limites utilisées jusqu'à présent traduisent la présence de parois. Ces parois ont des effets sur le comportement de la suspension. Or, nous souhaitons comparer nos résultats à des modèles de comportement macroscopiques issus de la théorie, et construits sans effet de bord. Nous avons mis au point des conditions aux limites pseudo-périodiques qui nous ont permis de contourner cette difficulté.
2. la méthode numérique mise au point pour construire une loi de comportement numérique par homogénéisation qui est décrite dans un second temps.

Nous présentons enfin les résultats de rhéologie obtenues pour des suspensions de sphères, de fibres, et des mélanges.

4.2 Volume représentatif et effets de bords

La simulation présentée dans le chapitre précédent a mis en évidence plusieurs difficultés liées à la présence des bords. D'une part, certaines particules quittent le domaine de calcul par les parois, ce qui fait que la concentration dans le domaine de calcul ne reste pas constante. D'autre part, la dynamique d'une particule est faussée lorsqu'elle touche

un bord. En effet, la dynamique de la particule se fait à vitesse de translation constante imposée par la condition de Dirichlet sur la frontière. Ainsi, une fibre qui touche un bord n'a plus la possibilité de tourner, ce qui fausse l'étude de l'orientation des suspensions de fibres. Enfin, la présence de parois entraîne des effets de bords. A leur voisinage, le fluide y est contraint de manière importante. La loi de comportement que l'on peut obtenir par homogénéisation est alors faussée.

D'un point de vue numérique, ces conditions facilitent de plus l'apparition d'amas numériques dans la cellule. Ces problèmes d'effets de bords sont connus et très fréquemment rencontrés entre autre dans les milieux granulaires. Ils sont plus délicats à résoudre dans les simulations numériques directes. Deux méthodes sont couramment utilisées :

- les approches par fenêtrage.
- les approches par champ périodiques.

4.2.1 Approche par fenêtrage

L'approche par fenêtrage consiste à effectuer dans un premier temps le calcul général sur un domaine Ω très grand, puis restreindre les calculs d'homogénéisation à un sous-domaine $\tilde{\Omega}$ (en général au coeur du domaine global) loin des bords. Plusieurs conditions sur la taille des domaines doivent être respectées afin que les calculs effectués aient un sens :

- le sous-domaine doit être suffisamment éloigné des bords pour que les effets de parois soient négligeables. En pratique, nous travaillons avec des domaines de calcul Ω et $\tilde{\Omega}$ carrés ou cubiques (respectivement d'arrête a et \tilde{a}), et $\tilde{\Omega}$ est centrée dans $\tilde{\Omega}$. Le rapport de taille a/\tilde{a} doit être supérieur à un rapport limite r_V .
- le sous-domaine $\tilde{\Omega}$ doit être suffisamment gros pour contenir un nombre représentatif de particules. \tilde{a} doit donc être supérieur à une longueur limite l_V . En effet, dans une approche par fenêtrage, $\tilde{\Omega}$ est le véritable Volume Elementaire Représentatif (VER) du problème. Dans une suspension homogène, c'est le volume à partir duquel les propriétés de la suspension sont constantes et indépendantes de l'échelle. Travailler avec un volume plus petit conduirait à des propriétés différentes selon le choix de $\tilde{\Omega}$. Pour illustrer ces propos, prenons l'exemple d'un ensemble de fibres occupant l'espace Ω (en deux dimensions) avec une orientation isotrope (c'est-à-dire $(a_2)_{xx} = (a_2)_{yy} = 1/2$). Nous considérons successivement des échantillons de fibres de volumes croissants. la valeur de $(a_2)_{xx}$ tend alors vers la valeur globale de $1/2$. Si le volume est trop petit (V_1), la valeur mesurée dépendra fortement de la région choisie (voir figure 4.1).

Au final, l'approche par fenêtrage aura un sens si :

$$\tilde{a} > l_V \quad \text{et} \quad \tilde{a} < r_V \cdot a \quad (4.1)$$

L'intérêt et la faisabilité de cette méthode dépendent donc des valeurs de l_V et r_V dont nous allons discuter.

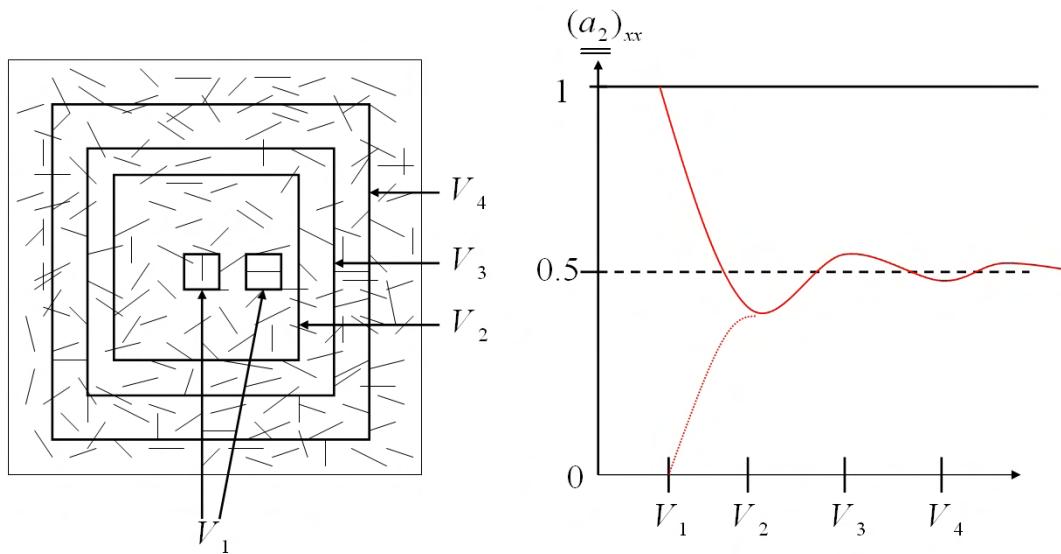


FIGURE 4.1 – Volume élémentaire représentatif : le VER choisi doit avoir une taille suffisamment importante

4.2.1.1 Intérêt du fenêtrage

Le point fort de la technique de fenêtrage est sa simplicité de mise en oeuvre. En effet, il suffit de considérer le problème sur un domaine plus grand, et de réduire l'analyse et l'interprétation des résultats à un sous-domaine. Formellement, le problème modèle à résoudre est donc inchangé.

4.2.1.2 Limites de l'approche

Malgré sa simplicité de mise en oeuvre, l'approche par fenêtrage n'est pas systématiquement utilisée car elle présente un inconvénient de taille : elle augmente considérablement les temps de calculs. En effet, la taille du problème est multipliée par un facteur r_{VER}^d où d est la dimension spatiale. Dans un problème en 3 dimensions, nous ne pouvons pas étendre trop le domaine au risque d'augmenter dramatiquement les temps de calcul. En pratique l'approche par fenêtrage telle que nous l'avons décrite n'est pas utilisable avec l'approche par domaines fictifs que nous avons adoptés. En effet, nous avons vu dans le chapitre précédent que les amas numériques ont tendance à se former à proximité des parois. Une fois un amas formé au voisinage des bords, il a tendance à grossir et à s'étendre rapidement à tout le domaine. Ainsi, la fenêtre $\tilde{\Omega}$ qui est utilisée pour les calculs d'homogénéisation est tôt ou tard affectée par la présence des amas.

Une solution à ce problème a été proposée par [DMHP07]. Elle permet de s'assurer que les particules solides ne s'approchent jamais trop près des bords. La méthode est la suivante : Le domaine de calcul Ω est divisé en trois sous-domaines concentriques. Le premier sous-domaine (zone A) contient des particules solides qui évoluent, et les calculs d'homogénéisation sont effectués sur ce sous-domaine. Il joue le rôle de $\tilde{\Omega}$ dans la méthode que nous avons décrite. [DMHP07] définissent une seconde région intermédiaire $\bar{\Omega}$ (zone B) telle que $\tilde{\Omega} \subset \bar{\Omega} \subset \Omega$. $\bar{\Omega}/\tilde{\Omega}$ contient également des particules qui évoluent. Lorsque les particules quittent $\bar{\Omega}$, alors elles sont y relocalisées de manière aléatoire. Ainsi le domaine

$\Omega/\bar{\Omega}$ (zone C) qui est proche des bords ne contient jamais de particules, car il ne contient que du fluide dans l'état initial, et aucune particule ne peut y pénétrer au cours de la simulation (voir figure 4.2).

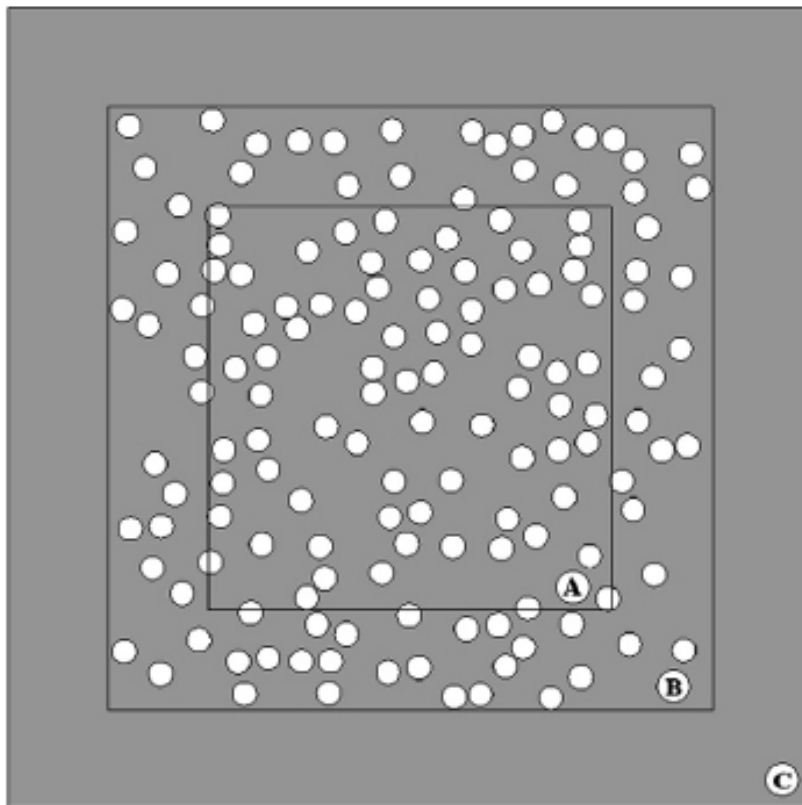


FIGURE 4.2 – Méthode de fenêtrage proposé par D'Avino. Graphique issu de [DMHP07].

Cette méthode permet d'empêcher la formation d'amas au voisinage des bords de Ω . La présence de 3 sous-domaines concentriques conduit cependant à un domaine de calcul très grand, surtout dans les simulations en 3 dimensions que nous avons effectuées. Nous n'avons donc pas retenu cette méthode.

4.2.2 Approche par champ périodique

Une alternative à la technique de fenêtrage est l'utilisation de conditions limites périodiques. Cette méthode est très répandue en dynamique moléculaire et dans l'étude des milieux granulaires. Elle permet de réduire le calcul à un sous-domaine de petite taille (qui doit tout de même vérifier la condition $\tilde{a} > l_V$ pour être représentatif) tout en supprimant les effets de bord. La technique consiste à imposer une condition de périodicité aux différentes inconnues du problème.

4.2.2.1 Conditions limites périodiques

L'idée sous-jacente est la suivante : on considère une cellule élémentaire (un carré ou un cube unité) contenant du fluide et des particules solides. L'échantillon considéré doit

être représentatif du milieu infiniment grand que l'on souhaite étudier. Si cet échantillon est vraiment représentatif du milieu, alors les échantillons adjacents seront très ressemblants. L'hypothèse de milieu périodique consiste alors à supposer qu'ils sont strictement identiques. En d'autres termes, on va recréer le milieu infini en le recouvrant par un arrangement régulier de "copies" de l'échantillon considéré. La démarche est résumée sur la figure suivante :

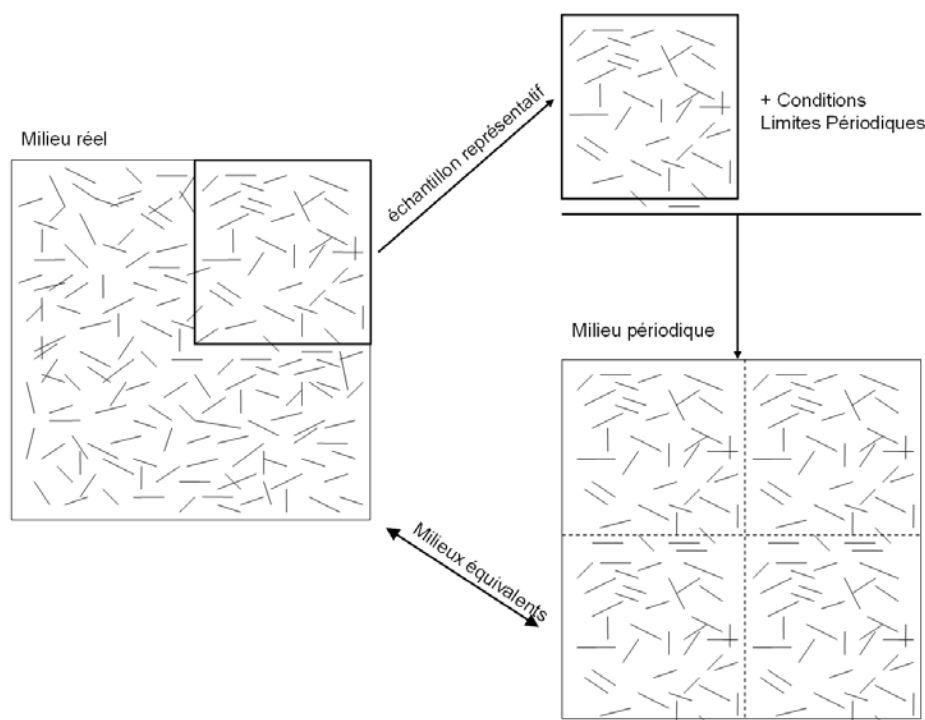


FIGURE 4.3 – Passage d'un milieu réel à un milieu périodique.

La condition de périodicité apparaît à deux niveaux dans le calcul effectué sur l'échantillon représentatif :

- au niveau de la structure : toutes les cellules sont sensées évoluer de la même façon. Ainsi si une particule sort de la cellule représentative par une face, elle doit y être réintroduite par la face opposée.
- au niveau des conditions limites : le champ de vitesse sur une face doit être égal au champ de vitesse sur la face opposée. Ainsi, sur un carré de côté a (dont le coin en bas à gauche est l'origine du repère dans lequel nous exprimons les coordonnées des autres points), la condition de périodicité impose :

$$\forall(x, y) \in [0, a]^2 \quad \begin{cases} u(0, y) = u(a, y) \\ u(x, 0) = u(x, a) \end{cases} \quad (4.2)$$

Les conditions périodiques telles que nous venons de les formuler ne permettent pas d'imposer un cisaillement dans la cellule. En effet, avec ces conditions, les vitesses sur les bords 1 et 3 sont les mêmes, ce qui n'est pas le cas si l'on impose un cisaillement. Il y a donc une incompatibilité entre ces deux conditions. Nous leur préférons donc les conditions bi-périodiques de Lee Edwards, qui permettent de prendre en compte l'existence d'un cisaillement non nul dans le milieu.

4.2.2.2 Conditions limites bipériodiques de Lee-Edwards

Les conditions limites de Lee-Edwards sont formulées à partir de l'arrangement périodique standard dont nous venons de voir la construction. Sous l'effet d'un cisaillement, il est clair que les cellules élémentaires font se décaler les unes par rapport aux autres et se déformer. Dans leur approche, Lee et Edwards ont tenu compte du décalage des bandes de cellules, et ont négligé leur déformation. Cela revient à supposer que les bandes de cellules n'exercent pas de cisaillement les unes sur les autres. La figure 4.4 illustre cette approximation.

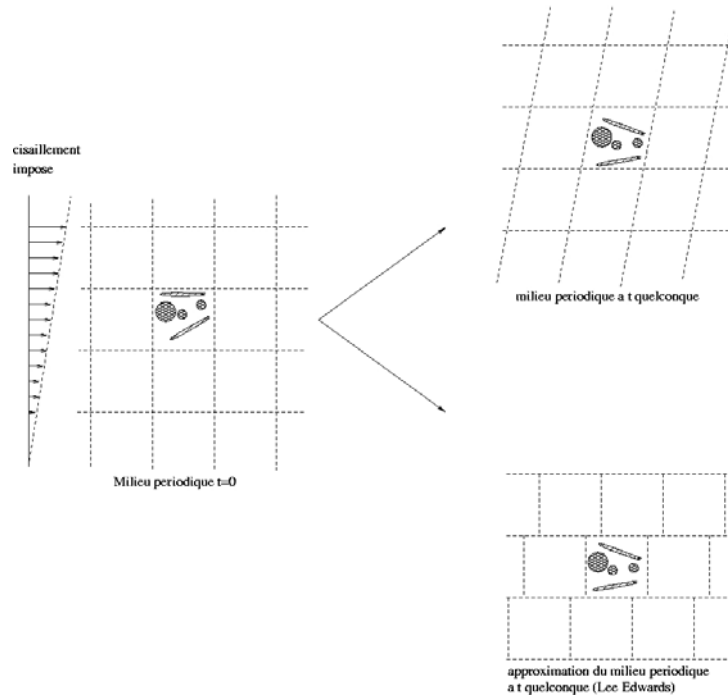


FIGURE 4.4 – Conditions aux limites de Lee Edwards.

On peut alors en déduire simplement la condition de périodicité du champ de vitesse sous cisaillement. Sur un carré de côté a , nous avons :

$$\forall y \in [0, a] \quad \vec{u}(a, y, t) = \vec{u}(0, y, t) \quad (4.3)$$

$$\forall x \in [0, a] \quad \vec{u}(\{x + a\dot{\gamma}t\}^*, a, t) = \vec{u}(x, 0, t) + a\dot{\gamma}\vec{e}_x \quad (4.4)$$

Sur un cube, nous avons de même :

$$\forall (y, z) \in [0, a]^2 \quad \vec{u}(a, y, z, t) = \vec{u}(0, y, z, t) \quad (4.5)$$

$$\forall (x, z) \in [0, a]^2 \quad \vec{u}(\{x + a\dot{\gamma}t\}^*, a, z, t) = \vec{u}(x, 0, z, t) + a\dot{\gamma}\vec{e}_x \quad (4.6)$$

$$\forall (x, y) \in [0, a]^2 \quad \vec{u}(x, y, a, t) = \vec{u}(x, y, 0, t) \quad (4.7)$$

On remarque que ces conditions limites dépendent de l'instant considéré. Les crochets $\{\dots\}^*$ signifient que la valeur de $x + a\dot{\gamma}t$ est prise modulo la largeur de la cellule (c'est-à-dire modulo $a = 1$). Comme pour les conditions limites classiques, on doit relocaliser les

particules qui sortent de la cellule considérée, en tenant compte de ces conditions limites particulières.

4.2.2.3 Le problème du parallélisme et le passage au 3D

Ces conditions limites ont été implémentées avec succès dans [HHM04a, HHM04b]. L'exercice est difficile car il s'agit de coupler une contrainte non-locale (portant sur le champ de vitesse à deux endroits différents). [HHM04a] imposent cette contrainte à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange, et résolvent directement le système d'équations, dans lequel le multiplicateur de Lagrange fait partie des inconnues. Ce type d'approche marche correctement en deux dimensions, mais paraît difficilement généralisable à la dimension 3, car on double quasiment le nombre d'inconnues (7 N au lieu de 4 N environs).

Nous avons donc modifié cette approche dans l'espoir de la rendre exploitable en 3 dimensions. Notre idée fut de calculer le multiplicateur de Lagrange par un algorithme d'Uzawa. Pour assurer la convergence de l'algorithme, nous avons considéré un lagrangien augmenté avec un terme de pénalisation pour la périodicité. Nous pouvons écrire la contrainte de périodicité sous la forme synthétique suivante :

$$\vec{u} = F(\vec{u}^*) \quad \text{sur } \Gamma \quad (4.8)$$

où \vec{u}^* désigne un champ de vitesse construit à partir du champ de vitesse \vec{u} , par périodicité. Cette construction est non locale, ce qui signifie que la valeur de \vec{u}^* en un point ne s'exprime pas en fonction de la valeur locale de \vec{u} au même point. Si \vec{v} désigne une fonction test, on peut montrer que la formulation variationnelle du terme de contrainte du Lagrangien est de la forme :

$$\int_{\Gamma} (\vec{u} - F(\vec{u}^*)) (\vec{v} - F(\vec{v}^*)) d\Gamma \quad (4.9)$$

Une fois le problème discrétisé par éléments finis, nous avons à ajouter à la matrice du problème un terme de la forme :

$$A_{ij}^p = \int_{\Gamma} \vec{N}_i \cdot \vec{N}_j^* d\Gamma \quad (4.10)$$

où \vec{N}_j^* est l'image périodique de \vec{N}_j . Pour un élément frontière donné, une fonction test non-locale (c'est-à-dire nulle sur l'élément considéré) peut conduire à un terme non nul. En d'autres termes, le coefficient (4.10) ne peut pas être calculé localement (à partir d'un élément et des fonctions nodales associées à ses noeuds).

La figure illustre 4.5 ces propos, dans un cas à une dimension. On impose une condition limite périodique de la forme $\vec{u}(0) = \vec{u}(L)$. On constate sur cet exemple que le coefficient A_{0N} défini selon l'équation (4.10) est non nul. Or, dans une méthode d'éléments finis avec un assemblage local, ce coefficient n'est jamais calculé (il est considéré comme nul) car les deux noeuds n'appartiennent pas au même élément.

La librairie C++ CIMlib qui a été utilisée pour ces travaux ne permet pas directement une telle liberté. L'assemblage de la matrice se fait de manière locale. Par ailleurs, c'est une librairie développée en parallèle. La gestion d'un assemblage non-local, dans un code parallélisé constitue à lui seul un travail théorique et pratique important, qui n'a pas pu

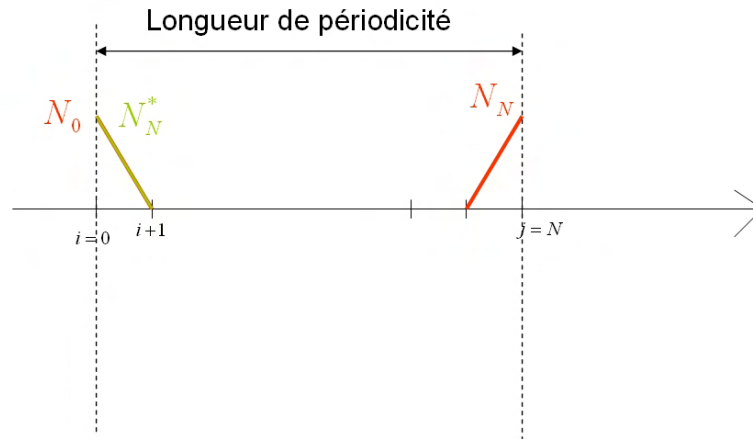


FIGURE 4.5 – Exemple du caractère non local de la condition de périodicité en 1D. Pour le calcul de la matrice locale sur l'élément sortant, on a besoin des fonctions de forme de l'élément entrant.

entrer dans le cadre de cette thèse. Nous avons finalement contourné cette difficulté en mettant au point une approche mixte. Par ailleurs, l'utilisation d'un algorithme d'Uzawa pour calculer le champ de vitesse périodique aurait conduit à une augmentation du temps de calcul qui aurait ôté tout son intérêt à cette méthode.

4.2.3 Approche mixte

L'approche que nous avons mis au point est à mi-chemin entre la technique de fenêtrage et la périodicité. Nous utilisons une méthode de fenêtrage avec une structure périodique (évoluant selon les conditions limites bipériodique de Lee-Edwards). $\Omega/\tilde{\Omega}$ contient des particules qui sont des copies des particules présentes dans $\tilde{\Omega}$. Les particules dans $\tilde{\Omega}$ évoluent au gré de l'écoulement ; toute particule quittant $\tilde{\Omega}$ y est réintroduite par périodicité. En revanche, les particules de $\Omega/\tilde{\Omega}$ évoluent comme des copies périodiques des particules de $\tilde{\Omega}$. Leur dynamique est donc liée à celles des autres particules.

De cette manière, les particules présentes dans $\Omega/\tilde{\Omega}$ évoluent au voisinage des parois, sans qu'aucun amas numérique ne se forme. En effet, tant que les particules de $\tilde{\Omega}$ ne forment pas d'amas, celles de $\Omega/\tilde{\Omega}$ n'en formeront pas non plus puisque ce sont des copies. De la même manière que l'approche proposée par [DMHP07], cette méthode permet de supprimer les effets de bords et le problème de franchissement des parois par des particules. Notre approche présente l'avantage de ne pas introduire un troisième sous-domaine concentrique, et de réduire ainsi la taille du domaine de calcul. En pratique, nous prenons $\tilde{a} = 0.5a$. Notre technique de fenêtrage périodique, et l'évolution du milieu effectif au cours du temps, sont résumés sur la figure 4.6. Le domaine de calcul est donc multiplié par 4 en dimension 2 et par 8 en dimension 3.

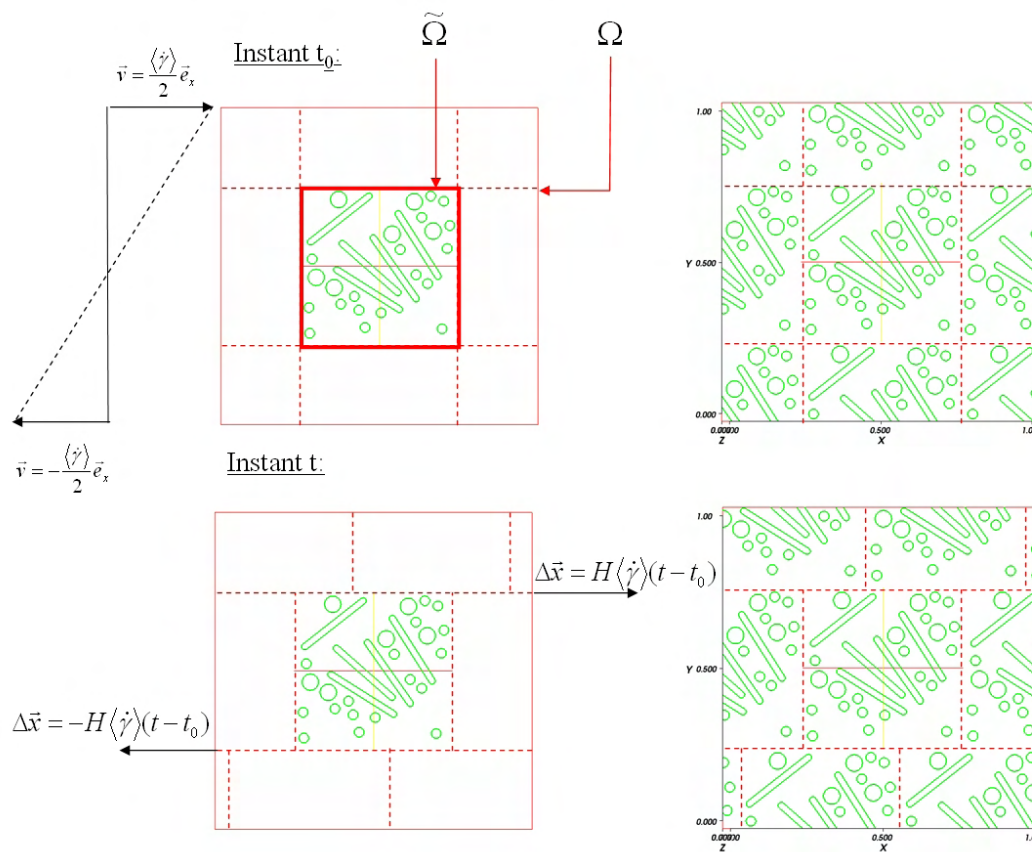


FIGURE 4.6 – Méthode de fenêtrage périodique : $\tilde{\Omega}$ contient des particules. Le reste du domaine de calcul $\Omega/\tilde{\Omega}$ contient est une copie multi-périodique de $\tilde{\Omega}$, qui évolue selon les conditions bipériodiques de Lee Edwards

4.3 Homogénéisation numérique

Le micro-rhéomètre numérique permet une étude multi-échelle de la rhéologie des composites. En effet, nous pouvons déduire les paramètres macroscopiques qui caractérisent l'écoulement en moyennant les champs calculés directement sur la fenêtre centrale. C'est en effet sur ce domaine que nous pouvons garantir une concentration constante, et l'absence d'effet de bord.

4.3.1 Définitions

Les champs locaux à moyenner peuvent être continus, donc définis sur le maillage global, ou discrets, c'est-à-dire particuliers. La définition générale de la valeur moyenne d'une grandeur X définie sur un ensemble E quelconque, que nous notons $\langle X \rangle_E$ est :

$$\langle X \rangle_E = \frac{\int_E X dE}{\int_E dE} \quad (4.11)$$

où dE est une mesure sur cet ensemble.

4.3.1.1 Les champs continus

Dans le cas des champs continus, $E = \tilde{\Omega}$ et $d\tilde{\Omega}$ est la mesure canonique sur l'espace \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 :

$$\langle X \rangle_{\tilde{\Omega}} = \frac{1}{|\tilde{\Omega}|} \int_{\tilde{\Omega}} X d\tilde{\Omega} \quad (4.12)$$

où $|\tilde{\Omega}|$ désigne le volume de $\tilde{\Omega}$.

Par exemple, nous définissons à tout instant t la contrainte totale macroscopique selon :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\tilde{\Omega}}(t) = \frac{1}{|\tilde{\Omega}|} \int_{\tilde{\Omega}} \underline{\underline{\sigma}}(\vec{x}, t) d\tilde{\Omega} \quad (4.13)$$

et le taux de déformation macroscopique par :

$$\langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \rangle_{\tilde{\Omega}}(t) = \frac{1}{|\tilde{\Omega}|} \int_{\tilde{\Omega}} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{x}, t) d\tilde{\Omega} \quad (4.14)$$

4.3.1.2 Les champs discrets

Les champs discrets sont définis sur l'ensemble $\{P_i\}_{i=1\dots N}$ des N particules réelles évoluant dans la fenêtre centrale. La moyenne $\langle X \rangle_P$ de tout champ $X = \{X_1, \dots, X_N\}$ défini sur cet ensemble est donnée par :

$$\langle X \rangle_P = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (4.15)$$

Les champs particuliers macroscopiques qui nous intéressent sont principalement les tenseurs d'orientation. Ils sont définis sur l'ensemble des fibres (nous n'avons pas défini

d'orientation pour les sphères). Le tenseur d'ordre 2 est la moyenne des produit tensoriels des orientations unitaires des fibres :

$$\underline{\underline{a_2}} = \langle \vec{p} \otimes \vec{p} \rangle_P = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \otimes \vec{p}_i \quad (4.16)$$

avec

$$(\underline{\underline{a_2}})_{jk} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{p}_i)_j (\vec{p}_i)_k \quad (4.17)$$

De même le tenseur d'ordre 4 s'exprime selon :

$$\underline{\underline{\underline{a_4}}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \otimes \vec{p}_i \otimes \vec{p}_i \otimes \vec{p}_i \quad (4.18)$$

4.3.2 Loi de comportement construite par homogénéisation

Il est possible d'obtenir une loi de comportement macroscopique par homogénéisation directe sur $\tilde{\Omega}$. Pour cela, on repart des équation fortes correspondant à notre formulation variationnelle. Nous avons vu précédemment que le problème variationnel que nous étudions correspond au problème fort suivant, sur le domaine Ω :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = -\vec{f}_{nh} \quad (4.19)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (4.20)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + 2 \eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) + \mathbb{I}_s \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}_s) \quad (4.21)$$

où η est une viscosité multi-domaines.

En prenant la valeur moyenne de l'équation 4.21 sur $\tilde{\Omega}$ nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\tilde{\Omega}} &= -\langle p \rangle_{\tilde{\Omega}} \underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \rangle_{\tilde{\Omega}} + (2\alpha_s \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_s} + \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}_s) \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_s}) \\ &\approx -\langle p \rangle_{\Omega \cap \tilde{\Omega}_f} \underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_f} + \underbrace{(-\langle p \rangle_{\Omega \cap \tilde{\Omega}_s} + \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{\lambda}_s) \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_s})}_{=\langle \underline{\underline{\sigma_p}} \rangle_{\tilde{\Omega}}} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Nous obtenons ainsi une expression de la contrainte particulière (nous avons supposé la contrainte d'indéformabilité comme étant bien imposée, et nous avons donc négliger la contribution du taux de déformation dans les solides).

4.4 Suspension de sphères

Dans un premier temps, nous avons mené une étude dynamique sur une suspension de sphères dans une matrice fluide newtonienne. La théorie et l'expérience prévoient qu'une telle suspension conserve son comportement newtonien, avec une viscosité apparente d'autant plus élevée que la concentration en particules solides est importante. Nous avons effectué des mesures de viscosité effective à partir de la composante xy des

différents tenseurs. Ces calculs ont été effectués en dynamique, pendant une durée de 2 secondes, avec un pas de temps de 0.02 secondes et un taux de cisaillement de 1. Nous avons constaté que l'évolution de la viscosité effective oscille légèrement autour d'une valeur moyenne, et qu'une durée de 2 secondes est suffisante pour obtenir une valeur significative.

D'après la relation (4.22), nous avons une estimation numérique de la composante $\langle \underline{\underline{\sigma}}_{xy} \rangle_{\tilde{\Omega}}$ à partir des différents champs calculés :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}_{xy}^{num} \rangle_{\tilde{\Omega}} = 2\eta_f \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{xy} \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_f} + \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{xy}(\vec{\lambda}_s) \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_s} \quad (4.23)$$

En théorie, la composante xy de la contrainte moyenne dans une telle suspension est donnée par la loi :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}_{xy}^{th} \rangle_{\tilde{\Omega}} = 2\eta_{eff} \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{xy} \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_f} \quad (4.24)$$

En rapprochant les équations (4.23) et (4.24) on obtient une estimation de la viscosité effective de la suspension :

$$\eta_{eff} = \frac{\langle \underline{\underline{\sigma}}_{xy}^{num} \rangle_{\tilde{\Omega}}}{2 \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{xy} \rangle_{\tilde{\Omega} \cap \Omega_f}} \quad (4.25)$$

4.4.1 Influence du maillage

Pour mettre en évidence l'importance du maillage dans les interstices, nous avons effectué un calcul de viscosité effective pour une suspension de sphères assez concentrée (27.2 % en volume). Ce calcul a été effectué sur un maillage de plus en plus fin dans les interstices. Le maillage initial était uniforme. Les figures 4.7 et 4.8 donnent les allures du maillage initial et final obtenus avec notre remaillieur. Nous renvoyons le lecteur aux références [GC05, CDL⁺ss] pour une description précise de la méthode de remaillage utilisée.

Ce remaillage est effectué progressivement et de manière itérative. La courbe 4.8 donne la viscosité effective calculée aux différents maillages générés lors du remaillage. L'erreur relative effectuée entre le maillage initial et le maillage final est extrêmement grande. Une alternative au remaillage aurait été d'utiliser un maillage uniforme très fin. Mais il est plus efficace en terme de temps de calcul de remailler à chaque incrément et d'effectuer un calcul sur un maillage "optimal" plutôt que de faire le calcul sur le même maillage très fin partout.

4.4.2 Evolution de la viscosité effective au cours du temps

Nous avons tracé sur la figure l'évolution de la viscosité apparente au cours du temps pour des suspensions de différentes concentrations. Nous constatons que la viscosité apparente subie des fluctuations (liées à l'arrangement des particules dans la fenêtre de calcul) d'autant plus importantes que la concentration est grande. Pour les viscosités importantes, on remarque que l'on obtient des valeurs assez faibles pour la viscosité en début de simulation. Par la suite, la viscosité oscille entre deux valeurs extrêmes. Nous avons attribué l'origine de ces valeurs anormalement basses de la viscosité en début de simulation à notre technique de génération de positions initiales, présentée dans le chapitre précédent. En effet, notre méthode nous permet d'avoir une distance minimale entre

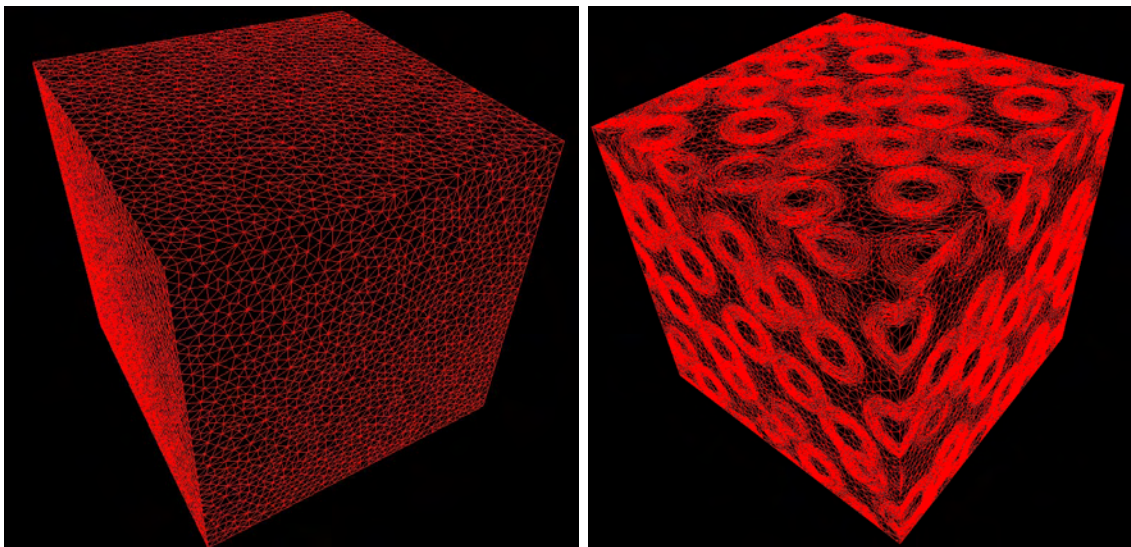


FIGURE 4.7 – Exemple de maillages : (a) maillage isotrope ; (b) maillage raffiné autour des particules.

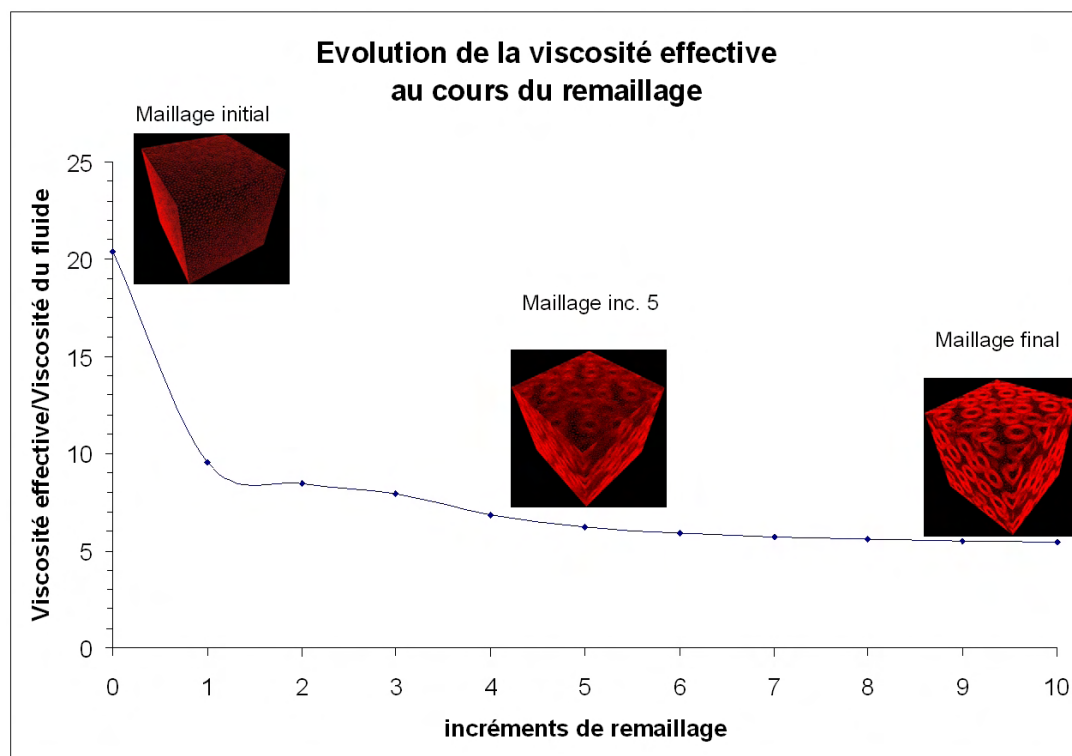


FIGURE 4.8 – Evolution de la viscosité effective avec le maillage.

toutes les particules, à l'instant initiale. Ensuite au cours de la simulation, cette distance minimale n'est plus assurée. Certaines particules se rapprochent les unes des autres à des distances relatives très faibles. Le fluide interstitiel est alors fortement contraint, ce qui conduit à une augmentation de la viscosité apparente.

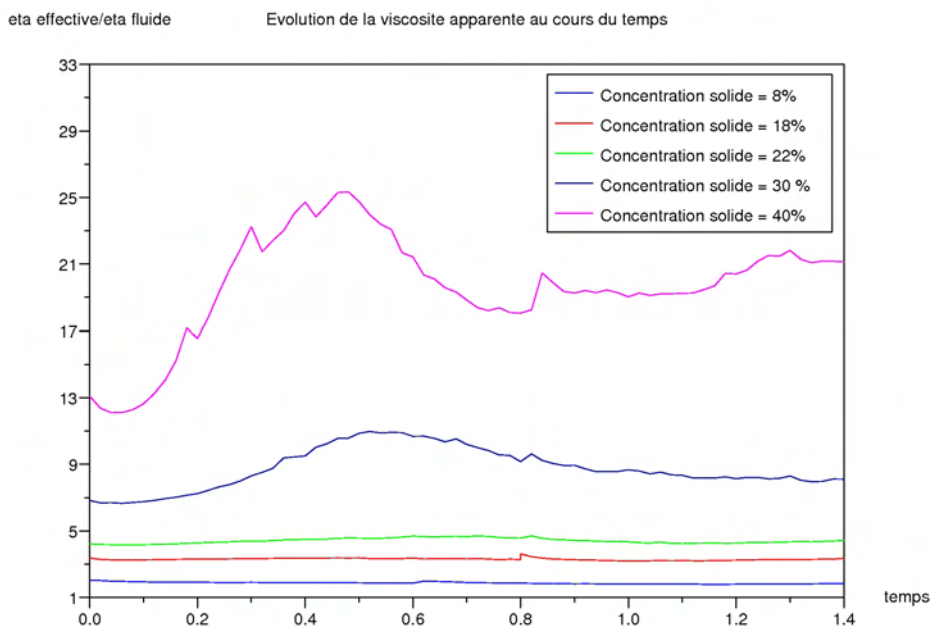


FIGURE 4.9 – Evolution de la viscosité apparente d’une suspension de sphères en fonction du temps pour différentes concentrations

Certains sauts de valeurs sont observés lorsque le calcul a été arrêté et relancé à partir du dernier incrément calculé. Ces sauts sont liés au remaillage qui n’est pas totalement contrôlé. Lorsque l’on relance un calcul, on ne peut pas garantir que le maillage utilisé a la même qualité que celui utilisé lors du dernier calcul avant l’arrêt. Cette différence provoque de légers sauts de la viscosité. Cependant, ces sauts restent faibles et leur influence sur l’évolution de la suspension et la valeur des viscosités apparentes calculées rest faible.

4.4.3 Etude en concentration

Nous avons tracé sur la figure les valeurs des viscosités effectives calculées pour des suspensions de sphères de différentes concentrations. Le seul paramètre que nous avons modifié est le rayon des sphères. Les positions initiales des sphères reste donc les mêmes d’un calcul à l’autre.

Nous avons également tracé l’évolution de la viscosité effective prévue par une loi de Krieger et Dougherty, avec une concentration limite de 0.55 et un paramètre $\alpha = 2$. On retrouve la tendance prévue par la théorie, avec un léger écart au niveau des valeurs.

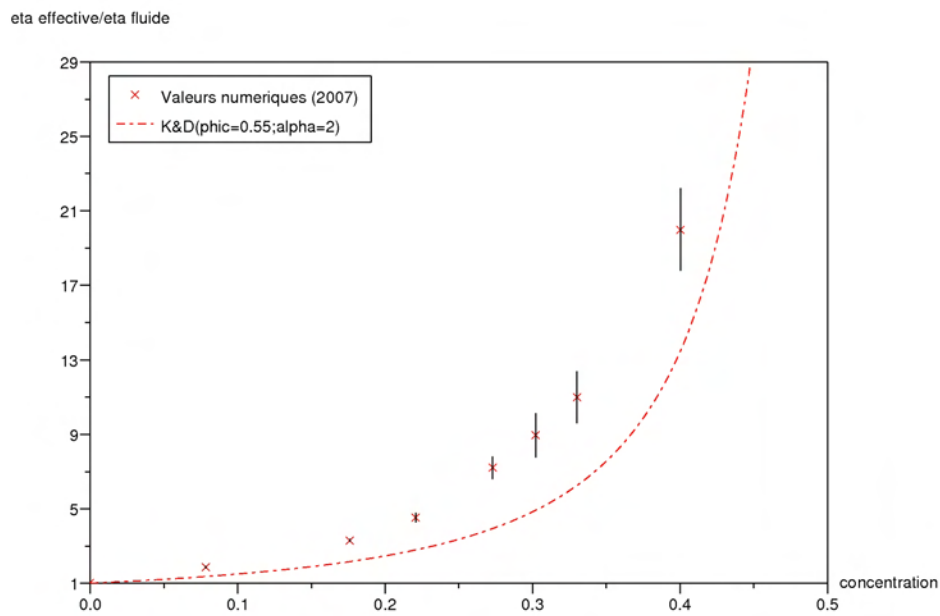


FIGURE 4.10 – Viscosité d’une suspension de sphères : comparaisons entre résultats numériques et théoriques.

4.5 Suspension de fibres

La simulation numérique directe d'écoulement de suspensions de fibres est extrêmement utile car elle permet de mesurer directement l'évolution de l'orientation des fibres et le comportement rhéologique du mélange. Elle fournit donc la totalité des informations nécessaires pour comprendre et modéliser correctement ces suspensions. En comparaison, les modèles théoriques sont incomplets et nécessitent l'introduction d'une relation supplémentaire sur l'orientation des fibres, appelée relation de fermeture. Nos simulations nous permettent d'obtenir directement cette relation.

4.5.1 Suspension de fibres initialement orientées

Dans toutes les simulations présentées ici, nous avons considéré une population de fibres initialement orientées perpendiculairement à l'écoulement (c'est-à-dire selon l'axe Oy). Sous l'effet du cisaillement, les fibres s'alignent selon l'axe Ox . L'intérêt de considérer un tel état initial est double. D'une part, l'axe Oz n'intervient pas (les fibres évoluent principalement dans le plan Oxy , les composantes z des différents vecteurs en tenseurs sont donc négligeables), ce qui permet de simplifier considérablement les calculs d'optimisation. D'autre part, c'est au début de la simulation que l'état de la suspension évolue le plus rapidement, car les fibres sont perpendiculaires à l'écoulement. C'est également au début de la simulation que nous avons la meilleure qualité numérique au niveau des positions des particules (les problèmes de formation d'amas pouvant survenir au bout d'un certain temps) et du maillage.

Nous avons effectué une première simulation dynamique de l'évolution d'une population de fibres avec un rapport de forme de 5 et une concentration solide de 5 %. Cette première simulation nous a permis de valider notre approche, et d'affiner notre méthode numérique. La simulation a été effectuée sur une durée totale de 5.5 secondes, avec un pas de temps de 0.02 secondes. Initialement toutes les fibres sont dans la direction du gradient de cisaillement. Sur la figure 4.11 nous avons tracé l'isovaleur zéro de la fonction distance à différents instants. Comme le prévoit la théorie, les fibres s'alignent progressivement dans le sens de l'écoulement.

4.5.1.1 Evolution du tenseur d'orientation d'ordre 2

Sur la figure 4.12 nous avons tracé l'évolution des composantes du tenseur d'orientation d'ordre 2. On constate que les composantes xz , yz et zz du tenseur d'orientation d'ordre 2 sont négligeables. Toutes les composantes de ce tenseur évolue vers une valeur asymptotique.

4.5.1.2 Relations de fermeture

Nous avons pu étudier directement la validité des relations de fermeture en comparant les valeurs numériques des composantes du tenseur a_4 et de ses valeurs théoriques prévues par les relations de fermeture. Nous nous sommes concentrés sur les composantes $xxxx$, $xyxy$ et $yyyy$. Nous avons comparé les valeurs numériques avec les relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride, qui sont les plus simples à implémenter. De plus, A.

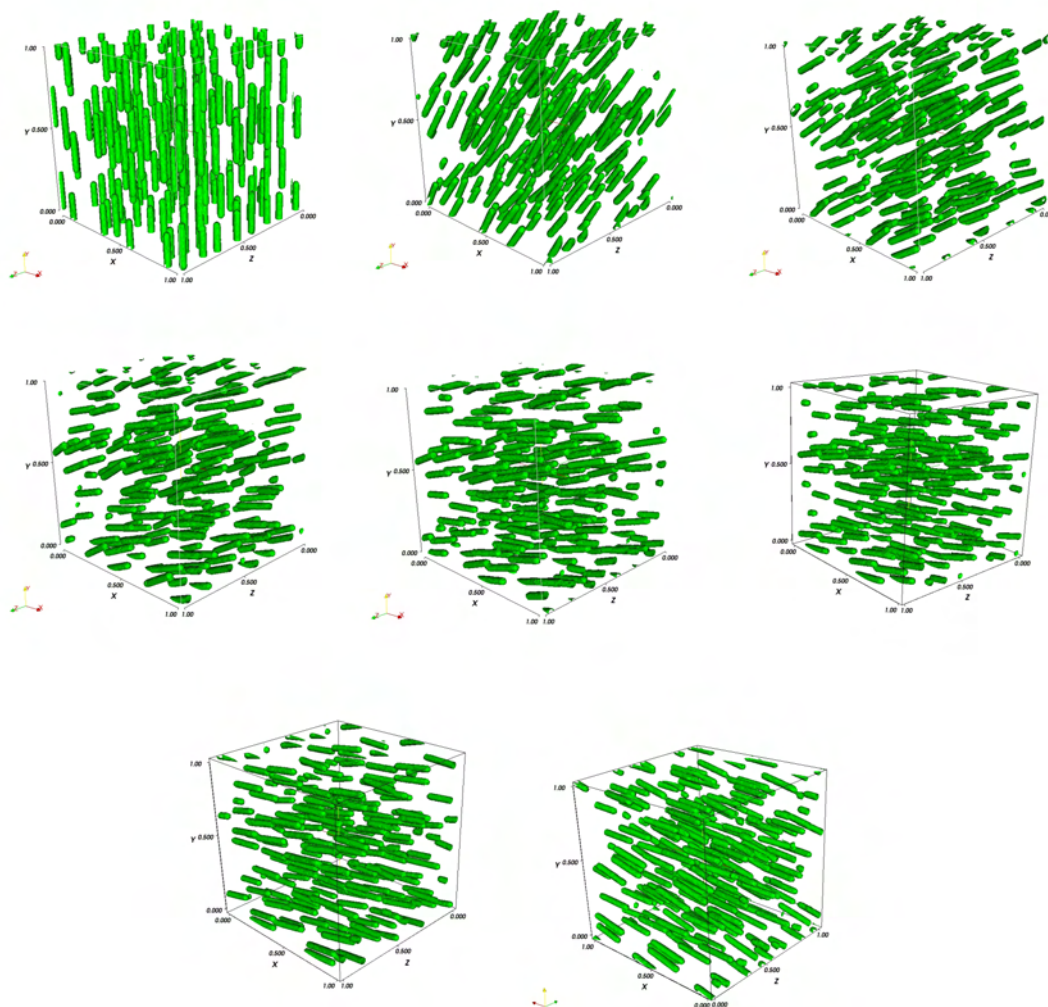


FIGURE 4.11 – Evolution d’une population de fibres dans un écoulement de cisaillement à $t=0$ s, 0.8 s, 1.6 s (première ligne de gauche à droite), 2.4 s, 3.2 s, 4 s (seconde ligne), 4.8 s et 5.5 s (dernière ligne).

Megally avait montré dans sa thèse [MLC04] que les approximations naturelles et orthotropes donnaient en cisaillement les moins bons résultats. Les résultats sont présentés sur les figures 4.13.

Nous constatons que les relations de fermeture hybride et quadratique donnent dans ce cas le meilleur résultat. On remarque également qu’il y a très peu de différence entre les deux (ce qui signifie que la contribution linéaire est négligeable dans la relation hybride).

4.5.1.3 Evolution de l’orientation : les limites du modèle de Folgar et Tucker

Au cours de la simulation, nous calculons à tout instant les tenseurs d’orientations, la contrainte, et le taux de déformation. Nous sommes donc en mesure de construire direc-

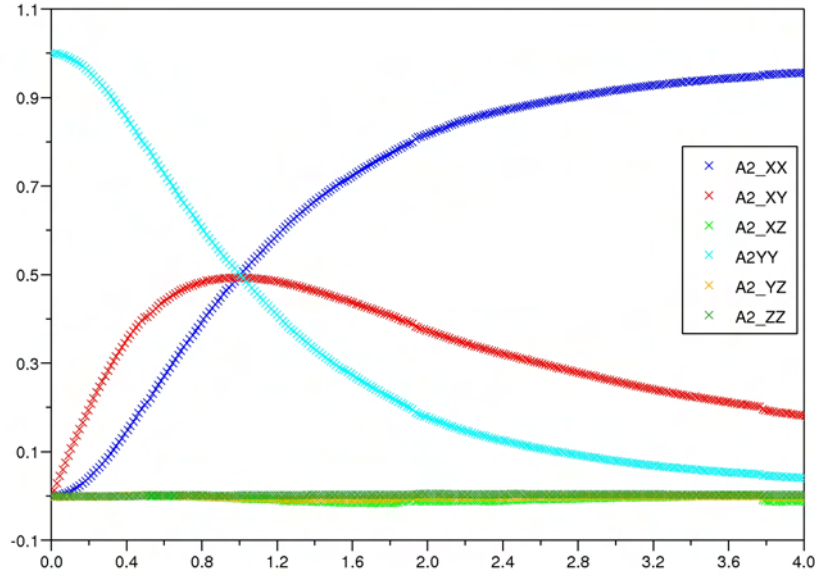


FIGURE 4.12 – Evolution des composantes du tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ au cours du temps ; les fibres sont initialement alignées verticalement (direction Oy).

tement un modèle d'évolution pour les tenseurs d'orientation des particules. Le modèle macroscopique le plus répandu pour décrire l'évolution du tenseur d'orientation d'ordre 2 d'une population de fibres dans un écoulement est l'équation de Folgar et Tucker, que nous avons présenté au premier chapitre. Nous avons utilisé un schéma d'Euler explicite pour discrétiser l'équation de Folgar et Tucker. Nous obtenons la relation suivante :

$$\frac{\underline{\underline{a}}_2^{n+1} - \underline{\underline{a}}_2^n}{\Delta t} = (\underline{\underline{\Omega}}^n \underline{\underline{a}}_2^n - \underline{\underline{a}}_2^n \underline{\underline{\Omega}}^n) + \lambda(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n \underline{\underline{a}}_2^n + \underline{\underline{a}}_2^n \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n - \underline{\underline{a}}_4^n : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n) + \underbrace{2C_i \dot{\gamma}^n}_{D_r} (\underline{\underline{I}} - 3\underline{\underline{a}}_2^n) \quad (4.26)$$

que nous réécrivons sous la forme :

$$\frac{\underline{\underline{a}}_2^{n+1} - \underline{\underline{a}}_2^n}{\Delta t} = \underbrace{(\underline{\underline{\Omega}}^n \underline{\underline{a}}_2^n - \underline{\underline{a}}_2^n \underline{\underline{\Omega}}^n) + \lambda(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n \underline{\underline{a}}_2^n + \underline{\underline{a}}_2^n \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n - \underline{\underline{a}}_4^n : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^n)}_{\underline{\underline{F}}^n(D_r)} + D_r (\underline{\underline{I}} - 3\underline{\underline{a}}_2^n) \quad (4.27)$$

Soit donc :

$$\boxed{\frac{\underline{\underline{a}}_2^{n+1} - \underline{\underline{a}}_2^n}{\Delta t} = \underline{\underline{F}}^n(D_r)} \quad (4.28)$$

On constate numériquement que le taux de déformation généralisé $\dot{\gamma}^n$ reste quasiment constant au cours de la simulation. Sur les figures 4.14a, 4.14b et 4.14c nous avons tracé l'évolution des composantes xx , xy et yy des tenseurs $\underline{\underline{F}}^n$ et $\frac{\underline{\underline{a}}_2^{n+1} - \underline{\underline{a}}_2^n}{\Delta t}$. Le coefficient C_i a été déterminé par une méthode de moindres carrés, et a une valeur de 0.11.

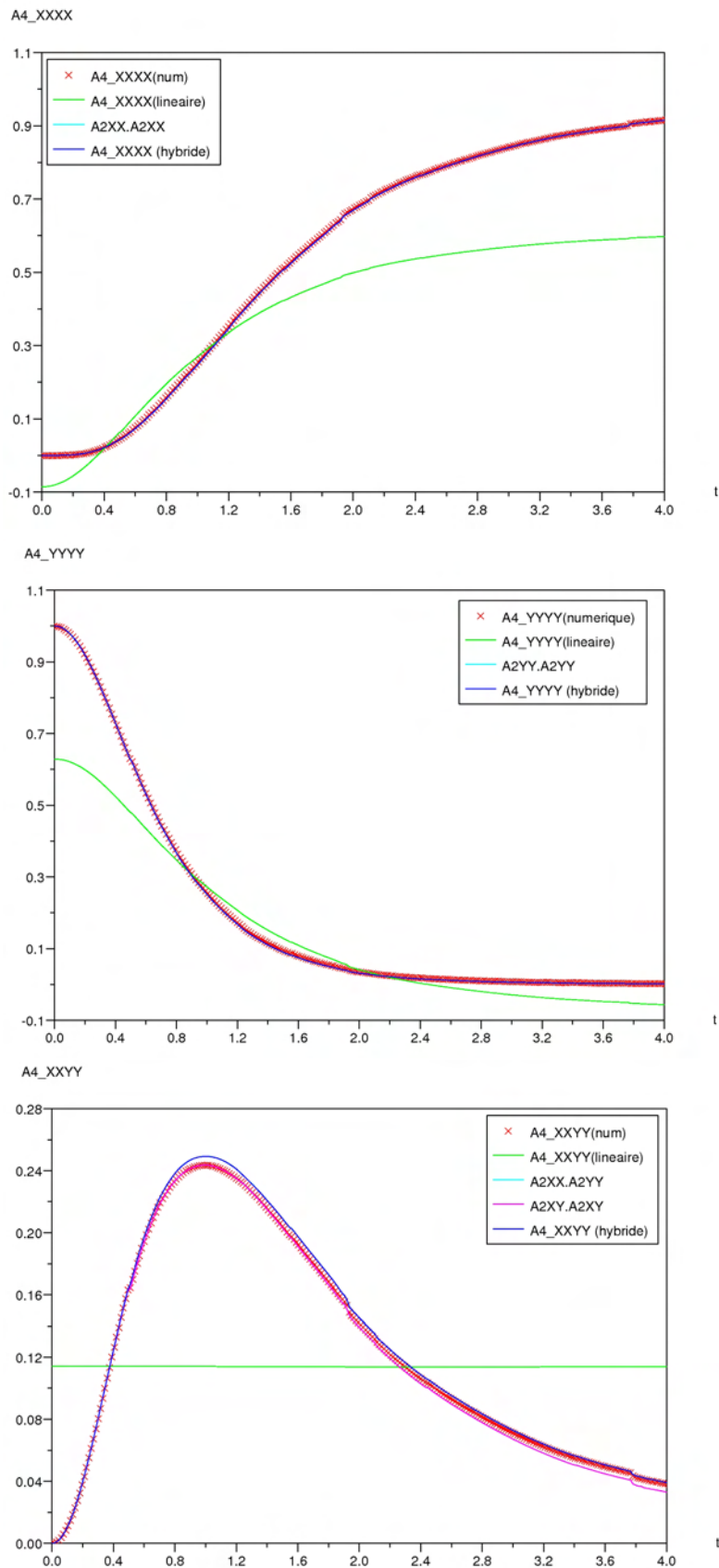


FIGURE 4.13 – Comparaison entre résultat numérique et valeur prévue par les relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride. Evolution de : (a) $(a_4)_{xxxx}$; (b) $(a_4)_{yyyy}$; (c) $(a_4)_{xxyy}$.

tel-00416435, version 1 - 14 Sep 2009

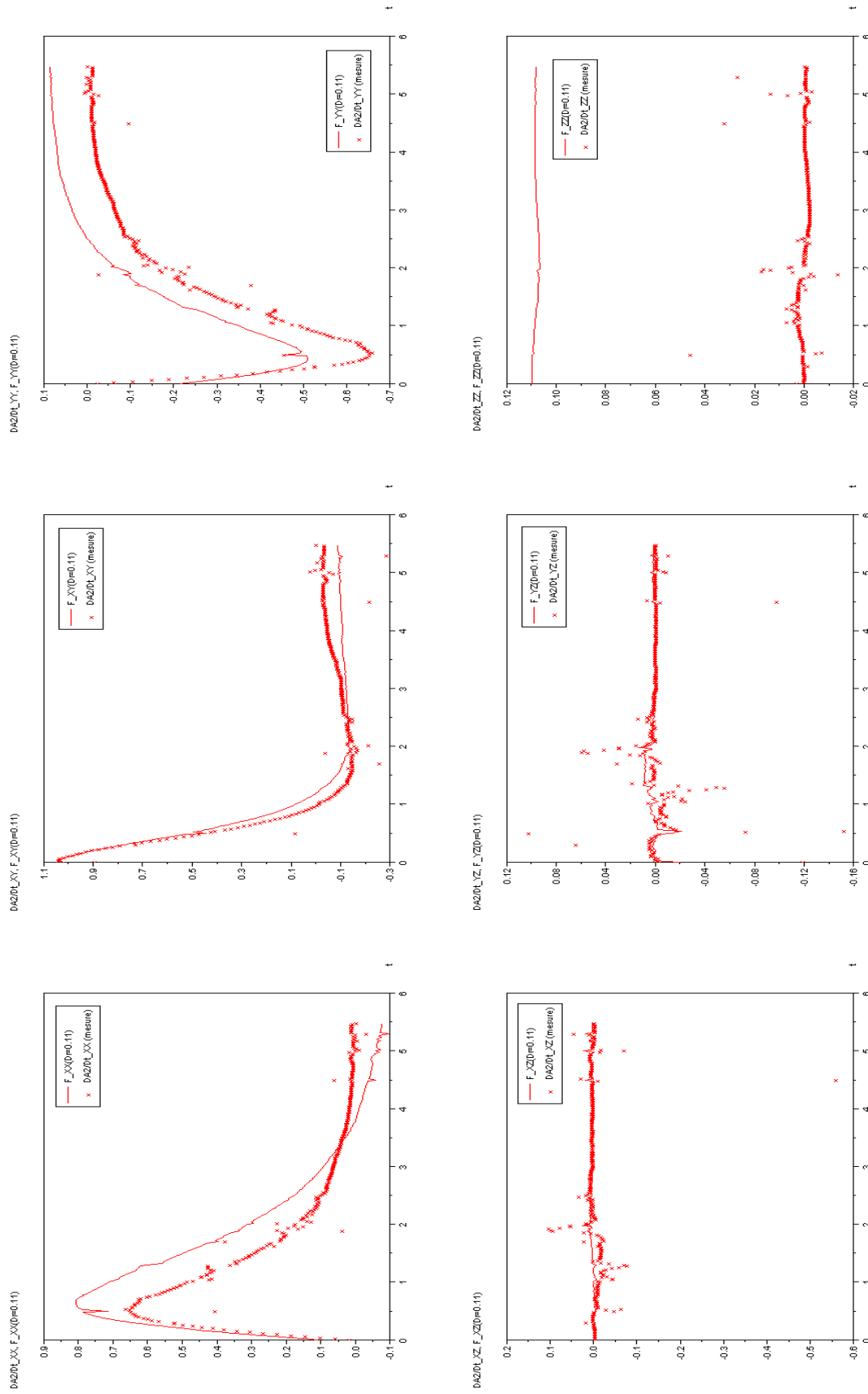


FIGURE 4.14 – Comparaison entre les résultats numériques et ceux calculés à partir de l'équation de Folgar et Tucker. Evolution des composantes du tenseur $\underline{\underline{F}}$: (a) xx ; (b) yy ; (c) zz ; (d) xy ; (e) xz ; (f) yz .

Nous constatons plusieurs choses. Tout d'abord, les courbes des composantes de $\underline{\underline{F}}$ sont lisses avec quelques sauts ponctuels. Ces sauts de $\underline{\underline{F}}$ sont dus à des sauts de $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ et de $\underline{\underline{\Omega}}$. Ces valeurs anormales correspondent à des configurations particulières dans lesquelles des particules sont trop proches (ou trop éloignées) les unes des autres, conduisant à des valeurs anormalement grande (ou petite) des moyennes des taux de déformation, contrainte et vorticit . Ce ph nom ne est probablement li    une gestion encore insuffisante des interactions entre particules.

Bien que surprenantes, ces valeurs ne sont qu'anecdotiques, et ne perturbent en rien le comportement global du m lange ni l'analyse qui en est faite. Un second point m rite d' tre soulign . La comparaison des r sultats num riques obtenus avec ceux pr dits par le mod le de Folgar et Tucker est aussi int ressante. Pour les composantes xx , xy et yy on retrouve bien les tendances pr dites par le mod le. En revanche, nos r sultats sont en d saccord avec le mod le en ce qui concerne la composante zz du tenseur. En effet, au cours de nos simulations, nous n'observons pas de cr ation d'orientation dans cette direction. Une analyse simple permet de justifier "  la main" ce r sultat : toutes les fibres sont dans un plan parall le au plan Oxy . Le gradient de vitesse est  galement dans ce plan l . En l'absence d'autres corps, chaque fibre est amen e    voluer dans ce m me plan. En r alit , la pr sence des autres fibres va perturber son  volution. Seules les fibres dans des plans parall les et distants d'une distance inf rieure au rayon de la fibre vont interagir avec elle. La th orie de la lubrification pr dit alors que la composante selon Oz de la force subie par chacune des fibres restera faible. De ce fait, il para t naturel que la composante zz du tenseur d'orientation, initialement nulle, le reste ou du moins varie peu au cours de la simulation.

Ce ph nom ne est en d saccord avec le mod le de Folgar et Tucker, et souligne ici une des limites de ce mod le. En effet, le terme de diffusion de l' quation est isotrope, c'est- -dire qu'il pousse le tenseur $\underline{\underline{a_2}}$   se rapprocher du tenseur $\underline{\underline{I}}/3$. Concr tement, cela signifie que le mod le de Folgar et Tucker pr voit une croissance de la composante zz du tenseur $\underline{\underline{a_2}}$. Il appara t clairement dans cette simulation que la contribution de ce terme est surestim e pour le calcul de la composante zz .

4.5.1.4 Loi de comportement

Nous avons  galement pu construire une loi de comportement macroscopique   partir de cette simulation. Dans la litt rature, la plupart des mod les de comportement macroscopique pour les suspensions de fibres ob issent   la loi g n rale de Tucker donn e par la relation (1.44) :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\eta_{eff}, N_s, N_p) = -p\underline{\underline{I}} + 2\underline{\underline{\eta}}_{eff} \left[\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + \underbrace{N_s [\underline{\underline{\dot{\epsilon}a_2}} + \underline{\underline{a_2\dot{\epsilon}}}]}_{=P} + \underbrace{N_p \underline{\underline{a_4}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}}_{=Q} \right] \quad (4.29)$$

Dans notre simulation, nous calculons la contrainte, les tenseurs d'orientation et les taux de d formation et de vorticit . Nous sommes donc en mesure de calculer des valeurs optimales pour les coefficients N_s , N_p et η_{eff} . Pour construire une loi de comportement optimale, nous avons consid r  uniquement la composante xy des tenseurs. En proc dant de cette fa on, la pression (dont l'approximation est moins bonne et qui prend des valeurs

très grandes comparées aux autres termes) n'intervient pas dans le calcul. Sur la figure 4.15 nous avons représenté la composante xy de $\underline{\underline{\sigma}}$, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$, $\underline{\underline{P}}$ et $\underline{\underline{Q}}$:

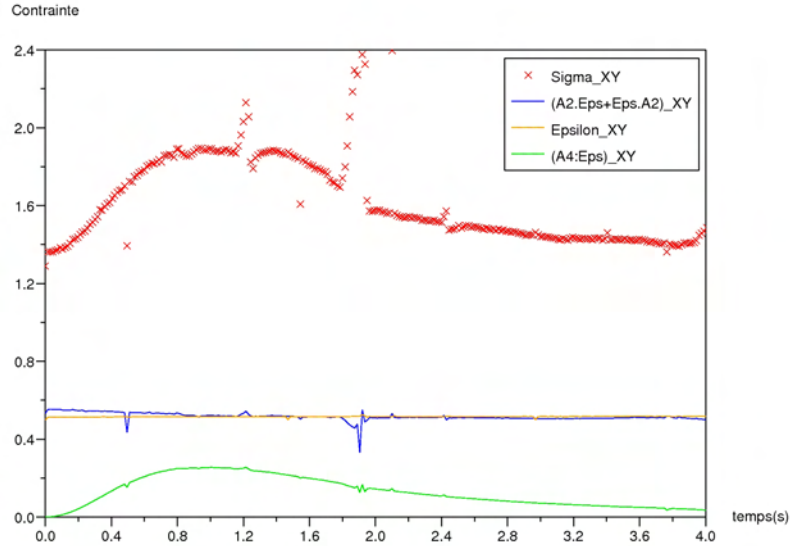


FIGURE 4.15 – Evolution de σ_{xy} , $\dot{\epsilon}_{xy}$, P_{xy} et Q_{xy} au cours du temps ; les fibres initialement alignées.

Deux constatations peuvent être faites. Premièrement, la contrainte et les autres tenseurs ont tous la même allure. Ils évoluent de manière régulière, avec quelques variations brusques dont nous avons déjà discuté l'origine et les conséquences.

On remarque également que les composantes xy des tenseurs $\dot{\epsilon}_{xy}$ et P_{xy} gardent la même valeur au cours de la simulation, sauf lors des sauts. Cette constatation permet d'affirmer que le taux de déformation et le tenseur $\underline{\underline{P}}$ sont égaux. Dans la construction d'une loi de comportement, on ne doit donc prendre qu'un seul des deux tenseurs en compte. Cette constatation revient à prendre le coefficient N_s nul, comme le font la plupart des modèles théoriques. En calculant les coefficients optimaux sur la durée totale de la simulation, nous obtenons les valeurs $\eta_{eff} = 1.26$ et $N_p = 0.98$. D'après la proposition 4-b, ce calcul ce ramène à la résolution d'un système linéaire d'ordre 2. Sur la figure 4.16 nous avons tracé la valeur numérique obtenue pour σ_{xy}^{num} et la valeur $\sigma_{xy}(\eta_{eff}, N_p)$ recalculée à partir des coefficients obtenus.

On constate que la loi de comportement construite en fonction des paramètres optimaux suit de près la contrainte calculée numériquement. Des divergences apparaissent cependant lorsque les bruits numériques sont importants.

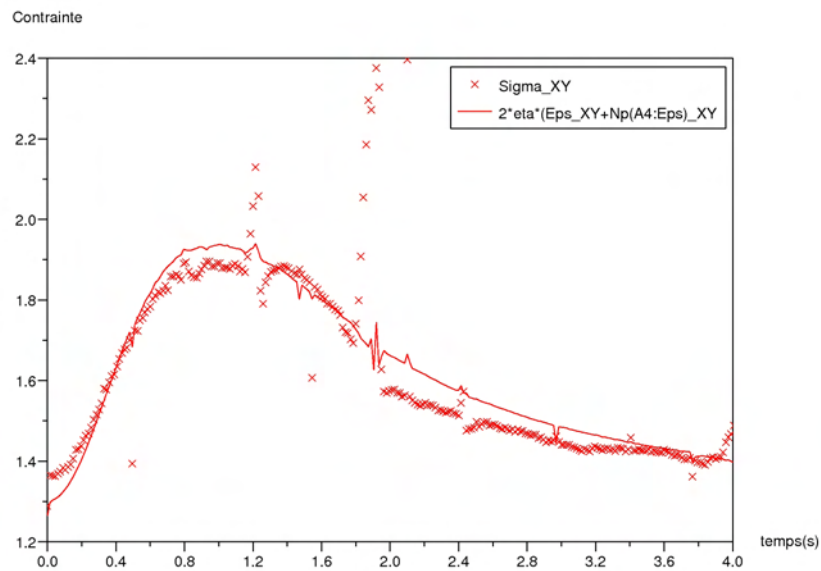


FIGURE 4.16 – Evolution de σ_{xy} et $\sigma_{xy}^{opt} = 2\eta_{eff}^{opt}(\dot{\epsilon}_{xy} + N_p^{opt}Q_{xy})$ avec $\eta_{eff}^{opt} = 1.26$ et $N_p^{opt} = 0.98$. Fibres initialement alignées

4.5.2 Suspension de fibres sans orientation initiale

Nous avons effectué une simulation comparable à celle présentée dans la sous-section précédente, avec une orientation initiale désordonnée. Cette simulation nous a permis d'étudier l'influence de l'orientation initiale sur les valeurs des coefficients rhéologiques calculés et sur les relations de fermeture. Par ailleurs, elle nous a permis de tester le modèle de Folgar et Tucker indépendamment de l'orientation initiale.

4.5.2.1 Evolution du tenseur d'orientation d'ordre 2

Comme dans le cas précédent, les fibres vont s'aligner dans la direction de l'écoulement.

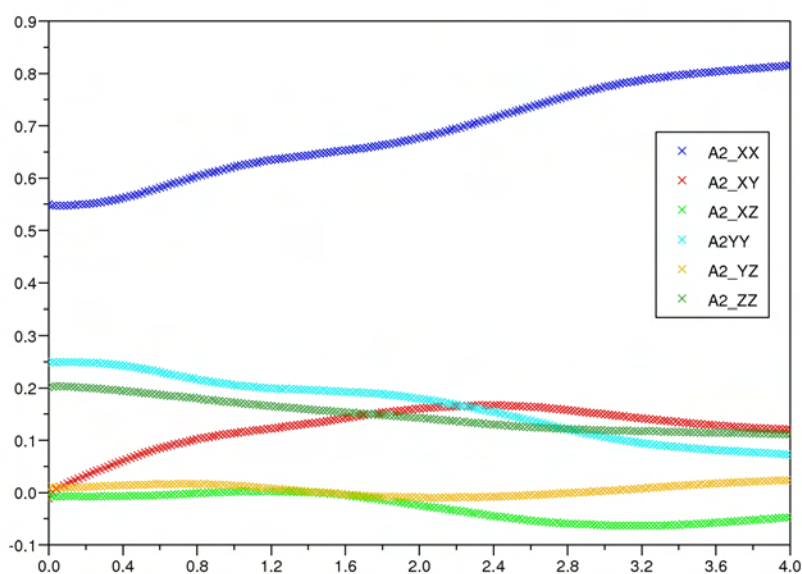


FIGURE 4.17 – Evolution des composantes du tenseur \underline{a}_2 au cours du temps. Orientation initiale aléatoire.

4.5.2.2 Relation de fermeture

Nous avons comparé les valeurs numériques des composantes $xxxx$, $xyxy$ et $yyyy$ du tenseur d'orientation d'ordre 4 avec celles obtenues à partir des valeurs numériques du tenseur d'orientation d'ordre 2 et des relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride. Les résultats sont présentés sur les figures 4.18a, 4.18b et 4.18c.

La relation hybride donne encore un meilleur résultat que les relations de fermeture linéaire et quadratique. Néanmoins, l'écart entre le résultat numérique et la relation de fermeture reste important.

4.5.2.3 Evolution de l'orientation

Nous avons comparé l'évolution du tenseur d'orientation d'ordre 2 avec le modèle de Folgar et Tucker (avec un coefficient optimal $C_i = 0.064$). Les résultats sont présentés

sur les courbes 4.19.

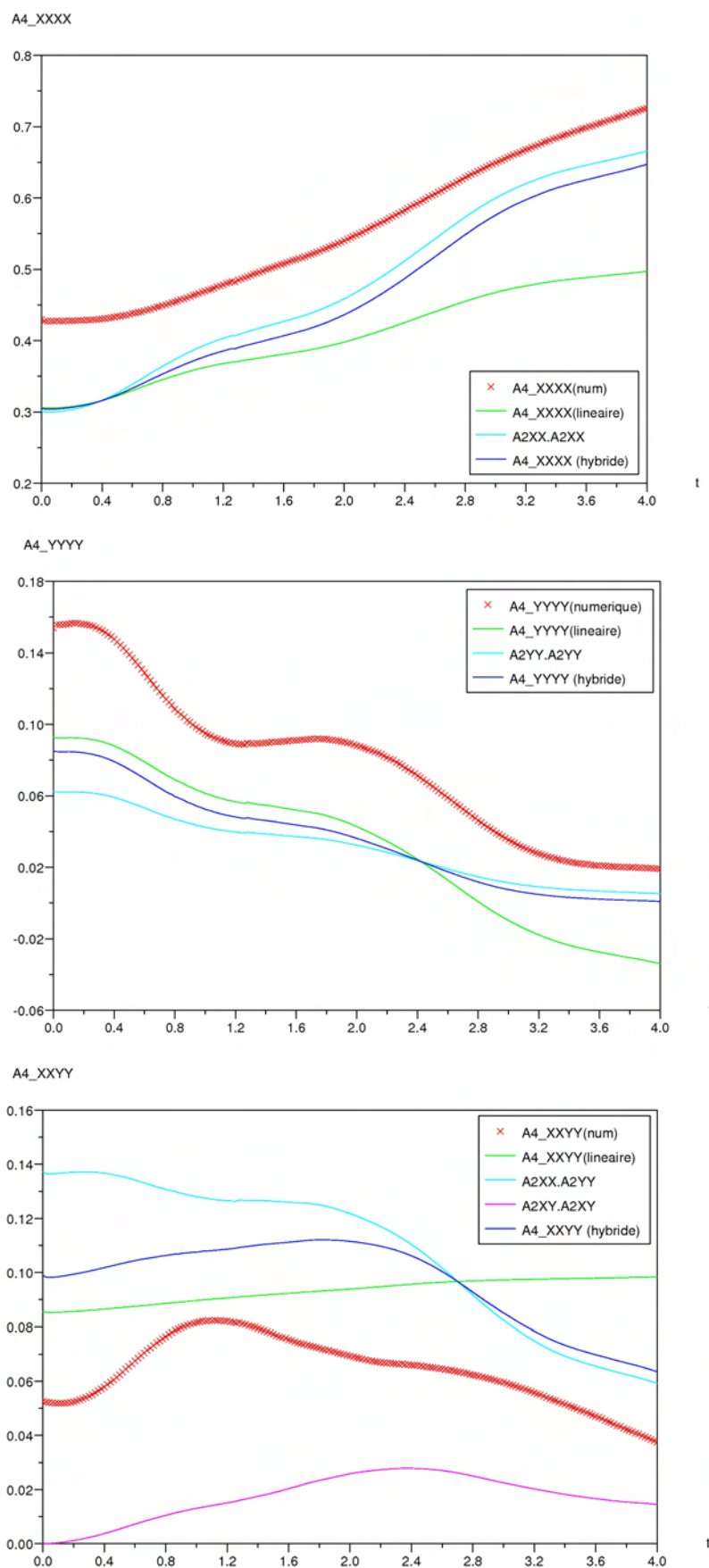


FIGURE 4.18 – Comparaison entre résultat numérique et valeur prévue par les relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride. Evolution de : (a) $(a_4)_{xxxx}$; (b) $(a_4)_{yyyy}$; (c) $(a_4)_{xyyy}$.

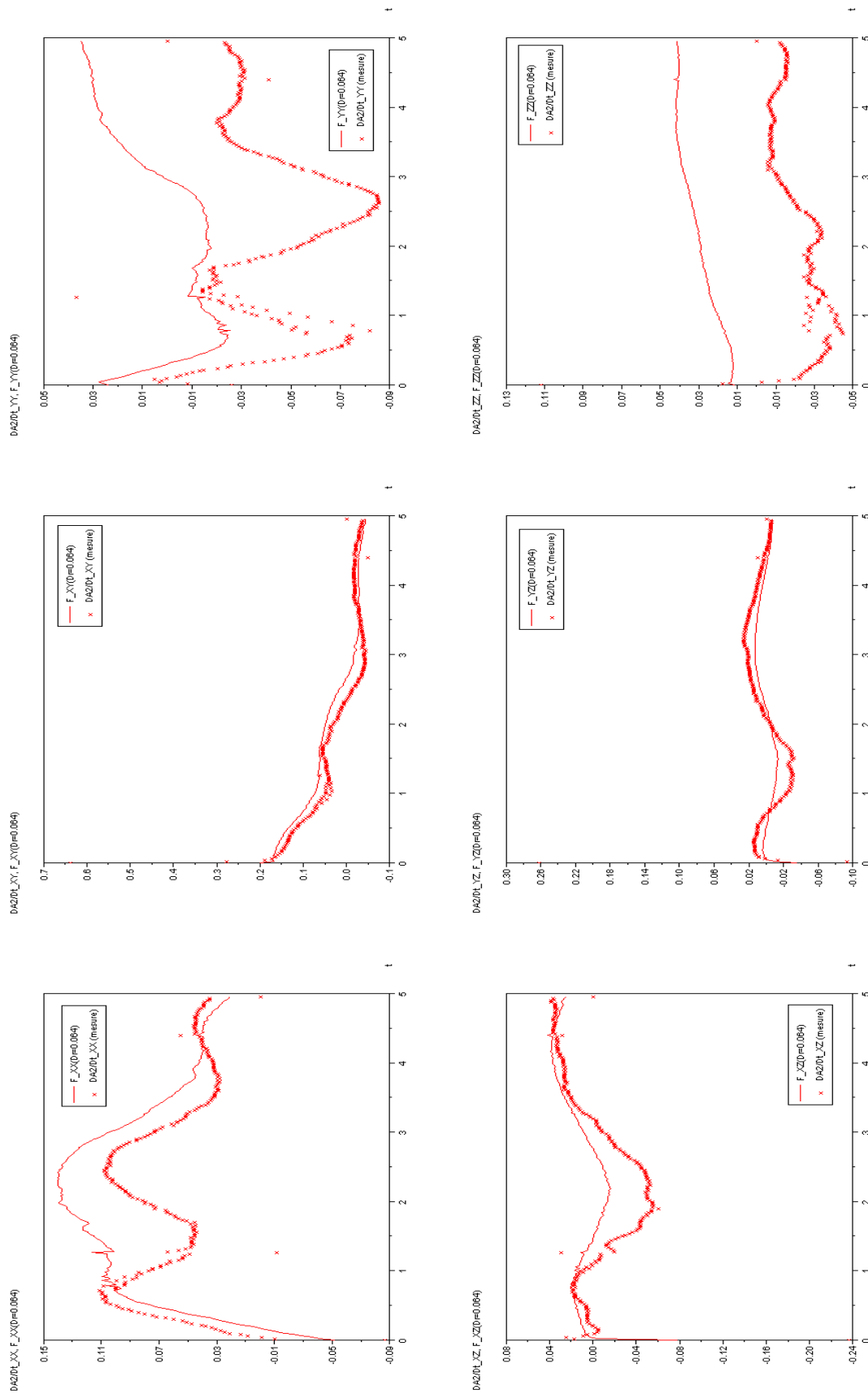


FIGURE 4.19 – Comparaison entre les résultats numériques et ceux prédits par le modèle de Folgar et Tucker (pour un coefficient $D_r = 0.064$). Evolution des composantes du tenseur $\underline{\underline{F}}$: (a) xx ; (b) xy ; (c) yy ; (d) xz ; (e) yz ; (f) zz

Avec une suspension sans orientation initiale, on constate encore une fois que le modèle de Folgar et Tucker surestime la création d'orientation dans la direction Oz . De plus, s'il permet de bien retrouver les tendances correctes pour l'évolution du tenseur d'orientation, on observe des écarts importants entre la valeur calculée et celle prédite par le modèle, en particulier pour les composantes yy et xx . Enfin, la valeur du coefficient optimale est de 0.064, contre 0.11 pour la même suspension de fibre mais avec une orientation initiale. Ces différentes constatations nous poussent encore à discuter la pertinence du modèle de Folgar et Tucker.

4.5.2.4 Loi de comportement

Nous obtenons des coefficients optimaux $\eta_{eff} = 1.21$ et $N_p = 1.02$ qui sont proches de ceux obtenus avec des fibres initialement alignées (voir figures 4.20 et 4.21). Dans cette simulation, la nullité de N_s est plus discutable, car les courbes de $\dot{\epsilon}_{xy}$ et P_{xy} n'ont pas exactement la même valeur. Néanmoins, par souci de cohérence avec la précédente étude, nous avons conservé cette approximation, qui donne de bons résultats.

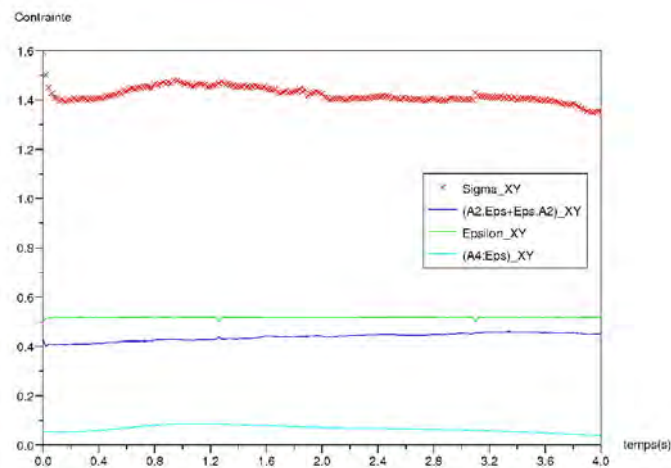


FIGURE 4.20 – Evolution de σ_{xy} , $\dot{\epsilon}_{xy}$, P_{xy} et Q_{xy} au cours du temps. Orientation initiale aléatoire.

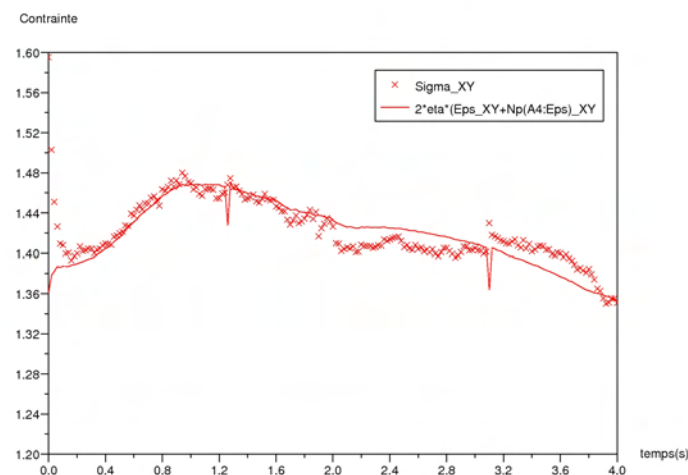


FIGURE 4.21 – Evolution de σ_{xy} et $\sigma_{xy}^{opt} = 2\eta_{eff}^{opt}(\dot{\epsilon}_{xy} + N_p^{opt}Q_{xy})$ avec $\eta_{eff}^{opt} = 1.21$ et $N_p^{opt} = 1.01$. Orientation initiale aléatoire.

4.5.3 Influence du rapport de forme à concentration fixée

Nous avons mené une étude paramétrique pour déterminer l'influence du rapport de forme sur la valeur des paramètres η_{eff} et N_p . Nous avons pu les comparer avec les modèles existants dans la littérature. Nous avons travaillé avec une concentration solide fixe de 5%. Nous avons calculé les paramètres η_{eff} et N_p optimaux pour des suspensions de fibres de rapport de forme 3, 5, 8, 9 et 10. Nous avons tracé sur la figure 4.22 l'évolution de N_p en fonction du rapport de forme, donnée par les modèles théoriques. Les calculs ont été fait avec des fibres alignées dans l'état initial. Les valeurs calculées sont en accord avec celles proposées par les différents modèles, en particulier avec le modèle de Phan Tien et Graham. Par ailleurs, les valeurs obtenues avec notre outil numérique "amélioré" sont plus pertinentes que celles obtenues par [Meg05] avec la première version de l'outil.

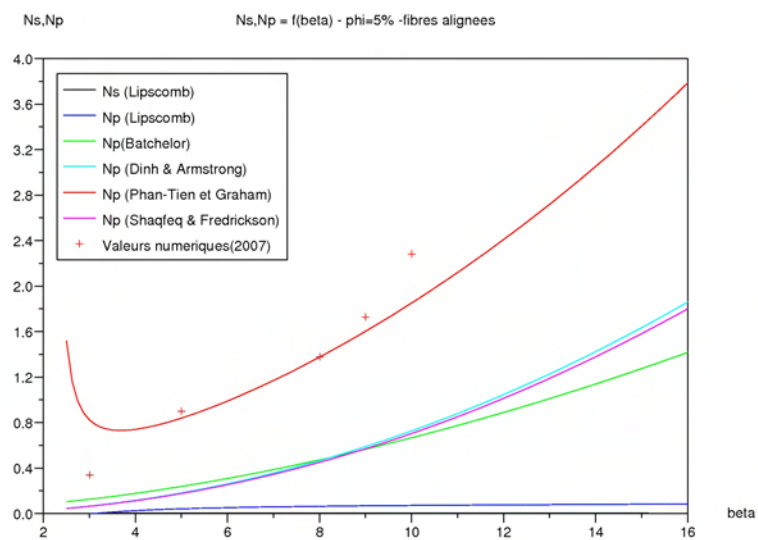


FIGURE 4.22 – Valeur du coefficient N_p (fibres alignées). Comparaison entre les valeurs numériques et les modèles théoriques

4.5.4 Suspensions de fibres et de sphères

On a vu au chapitre précédent que l'on était capable de faire des calculs pour un mélange d'une fibre et de sphères. Par conséquent, nous avons finalement mené une étude de comportement sur un mélange de fibres et de sphères. Nous n'avons effectué qu'une seule simulation pour un temps limité, dans un but démonstratif. Les temps de calcul pour ce type de simulations restent prohibitifs : ce calcul a été effectué sur 24 processeurs du cluster Linux 512 (Sun X4100 bi-dual core et Sun X2200 bi-dual et bi-quadri core) du CEMEF. Un incrément de temps complet (c'est-à-dire incluant le déplacement des particules, le remaillage, le calcul du champ de vitesse et les calculs d'homogénéisation) dure environ 20 minutes. Nous avons considéré la même suspension de fibres de rapport de forme de 5 avec une concentration de 5%. Nous avons ajouté à ce mélange des sphères de même rayon que les fibres, avec une concentration en sphères de 2%.

Nous avons représenté sur la figure 4.23 l'allure de la suspension dans l'état initial et final

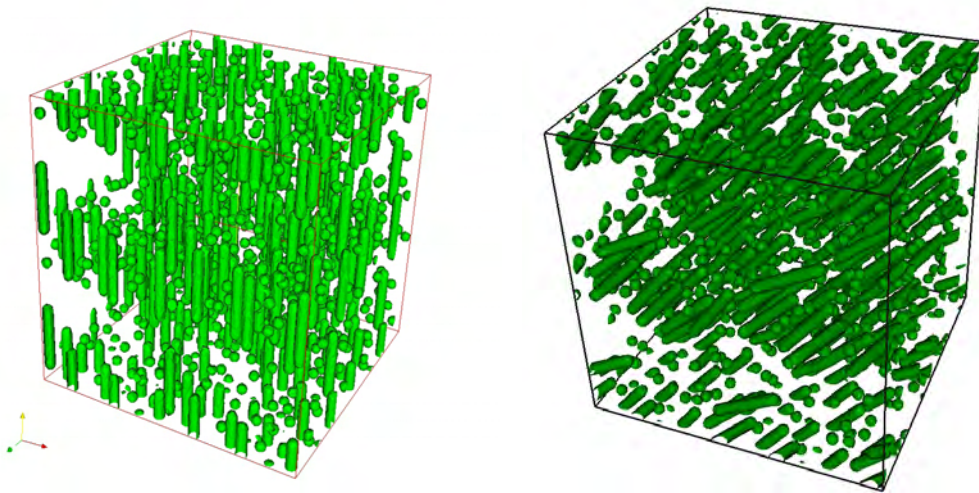


FIGURE 4.23 – Configuration initiale des particules dans le mélange (5% de fibres de rapport de forme 5 et 2% de sphères) : (a) $t = 0$; $t = 1.3$

Sur ce laps de temps très réduit, on a essayé d'approcher les résultats du calcul par l'équation de Folgar et Tucker (voir figure 4.25) et la loi de comportement de Lipscomb (figure 4.24). Sur ce calcul préliminaire, ces approximations semblent encore fonctionner : pour la loi de comportement, la viscosité équivalente est plus grande. La valeur C_i est du même ordre que dans le cas sans particule sphérique. Cela reste à confirmer sur un temps de calcul plus important quand les interactions fibres-particules auront été plus nombreuses.

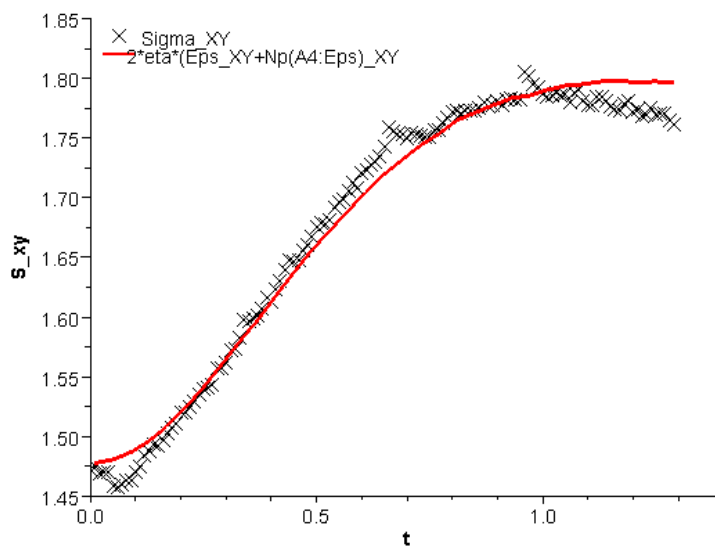


FIGURE 4.24 – Evolution de σ_{xy} et $\sigma_{xy}^{opt} = 2\eta_{eff}^{opt}(\dot{\epsilon}_{xy} + N_p^{opt}Q_{xy})$ avec $\eta_{eff}^{opt} = 1.44$ et $N_p^{opt} = 0.45$. Les fibres sont initialement alignées et la concentration en sphères est de 2%

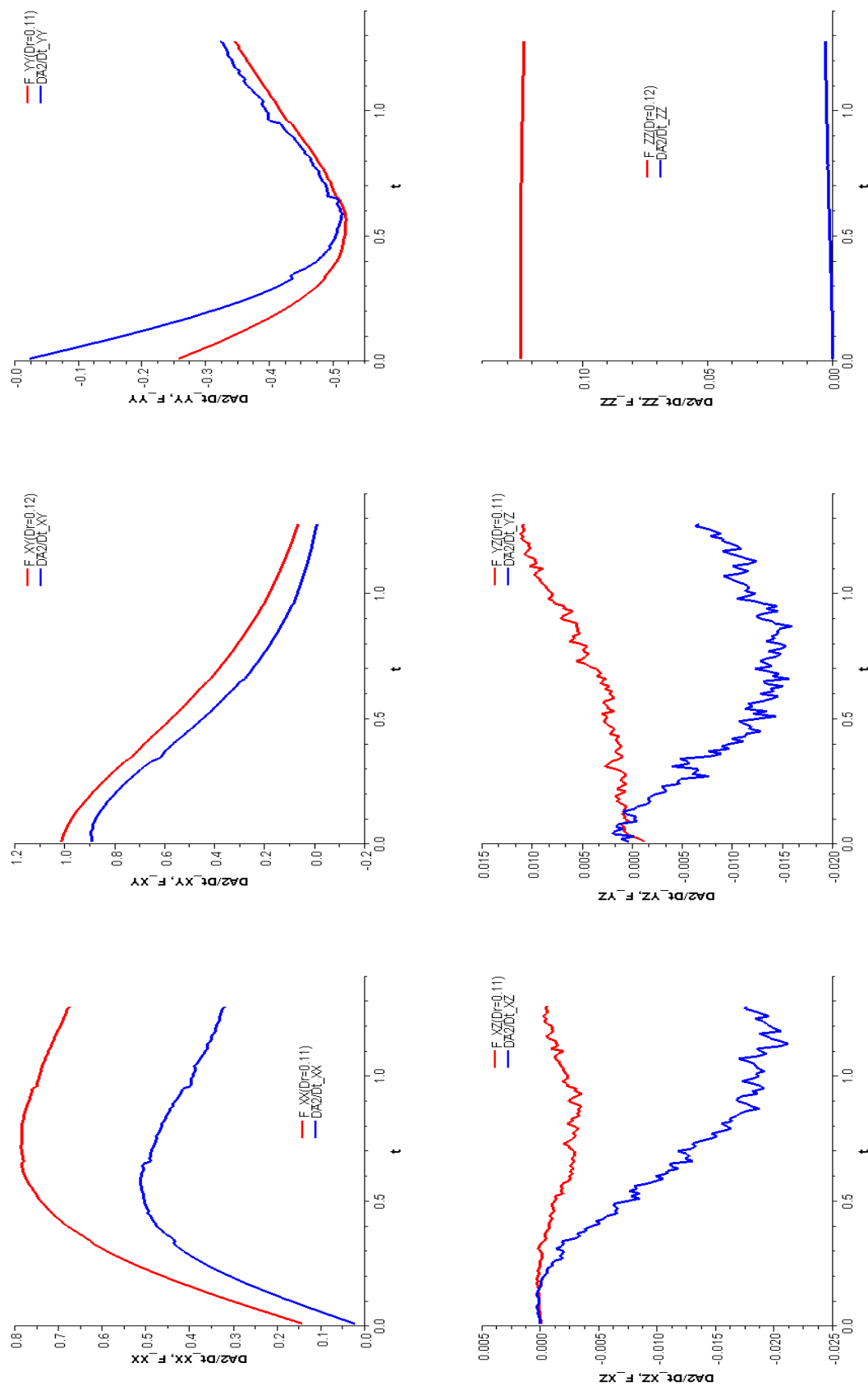


FIGURE 4.25 – Comparaison entre les résultats numériques et ceux prédits par le modèle de Folgar et Tucker (pour un coefficient $C_i = 0.12$). Evolution des composantes du tenseur $\underline{\underline{F}}$: (a) xx ; (b) xy ; (c) yy ; (d) xz ; (e) yz ; (f) zz

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats de rhéologie numérique obtenus au cours de simulations. Nous avons étudié le comportement de suspensions de sphères et de fibres. Ces suspensions ont été soumises à un cisaillement simple. Les effets de bords ont été fortement diminués grâce à une technique de fenêtrage périodique. Nous avons mis en évidence l'importance de l'influence du maillage sur les grandeurs homogénéisées. Nous avons donc travaillé en remaillant après la mise à jour des positions et orientations des particules, à chaque incrément.

Nous avons effectué des calculs de viscosité effective pour des suspensions monomodales de sphères. La viscosité effective a été calculée en dynamique, pour différentes concentrations. Nous avons obtenu des valeurs de viscosité apparentes croissantes avec la concentration. La croissance obtenue est exponentielle, comme le prévoit le modèle de Krieger et Dougherty. La viscosité effective calculée en dynamique fluctue autour de sa valeur moyenne, avec un écart type croissant avec la concentration.

Les résultats obtenus pour les suspensions de fibres sont d'un grand intérêt. Les simulations ont permis l'étude couplée de l'orientation des fibres et du comportement rhéologique des suspensions. Le calcul direct des tenseurs d'orientation dans la suspension permet de construire directement une relation de fermeture, et un modèle d'évolution du tenseur d'ordre 2. Nous avons effectué une simulation avec des fibres initialement orientées selon Oy , et une simulation avec une orientation aléatoire :

- nous avons comparé l'évolution des valeurs numériques des composantes du tenseur d'ordre 4, avec celles calculées à partir des relations de fermeture linéaire, quadratique et hybride et des valeurs numériques des composantes du tenseur d'orientation d'ordre 2. Avec un état initial orienté, les relations de fermeture quadratique et hybrides donnent de très bons résultats. Avec une orientation initiale aléatoire, l'écart entre les prévisions théoriques et les valeurs numériques des composantes du tenseur d'ordre quatre sont un peu plus importantes. C'est néanmoins la relation de fermeture hybride qui reste la plus pertinente.
- l'évolution du tenseur d'orientation d'ordre deux a été comparée au modèle de Folgar et Tucker. L'équation de Folgar et Tucker découle de l'équation de Jeffery. Selon ce modèle, l'évolution du tenseur d'orientation d'ordre deux suit la même loi que celle des orientations unitaires des fibres, avec un terme de diffusion supplémentaire. Ce terme de diffusion traduit la perturbation de l'écoulement autour d'une particule, induite par la présence des autres particules dans la suspension. Folgar et Tucker ont proposé un terme de diffusion isotrope, similaire à la diffusion brownienne. L'importance de ce terme de diffusion est proportionnel à un coefficient scalaire C_i et au taux de cisaillement généralisé. Les prévisions du modèle de Folgar et Tucker ne sont pas en bon accord avec le résultat numérique que nous avons obtenu. En effet, l'apparition d'orientation dans la direction Oz semble surestimée par l'équation de Folgar et Tucker. Par ailleurs, la valeur du coefficient C_i calculée n'est pas indépendante de l'orientation initiale. Ces constatations nous poussent à

remettre en cause le modèle, et motiveront, nous l'espérons, des études futures à ce sujet.

- nous avons enfin pu étudier le comportement rhéologique de la suspension, en calculant les valeurs moyennes de la contrainte, du taux de déformation et de vorticité. Les valeurs numériques de ces champs subissent des sauts au cours de leur évolution. Nous pensons qu'ils sont liés à une gestion encore trop approximative du contact et de la dynamique des particules. Néanmoins, ces sauts ne perturbent pas durablement le comportement de la suspension. Nous avons pu comparer l'évolution de la contrainte moyenne avec celle prévue par les modèles théoriques. Nous avons obtenu des valeurs en très bon accord avec le modèle de Phan Tien et Graham. Ces valeurs sont nettement plus réalistes et proches des modèles théoriques que celles présentées dans la thèse de Megally. La puissance de calcul nécessaire, et les imperfections de notre gestion des interactions entre particules rendent encore difficile l'étude de suspensions à concentration plus importante.

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

L'objectif de cette étude était de mettre au point un outil numérique permettant de mieux comprendre les interactions entre fluides et particules solides dans les écoulements de suspensions. Notre approche consiste à simuler directement l'évolution d'un fluide newtonien et de particules solides dans une cellule élémentaire soumise à un cisaillement. A tout instant nous calculons le champ de vitesse en tout point du fluide, et pouvons donc, par homogénéisation, en déduire l'évolution de certaines variables macroscopiques du mélange.

Notre méthode numérique est basée sur une approche par domaines fictifs. Cette méthode revient à mailler l'ensemble du domaine de calcul et à étendre la définition des champs de vitesse et pression au domaine solide. On doit alors suivre l'évolution des particules au travers d'une fonction caractéristique. Le système d'équations obtenu assure la rigidité du domaine solide au cours du calcul grâce à une contrainte d'indéformabilité du champ de vitesse. Ce système est discrétisé par l'élément fini P_1^+/P_1 .

Pour décrire l'évolution de la phase solide, nous avons utilisé une technique de transport lagrangien associée à une méthode de courbe de niveau. Les centres des particules sont transportés à partir du champ de vitesse. L'orientation est mise à jour grâce au taux de vorticit . A partir d'une description discr te de la phase solide, nous calculons   tout instant la fonction level-set associ e, puis nous en d duisons la fonction caract ristique. Enfin, une technique de h -adaptation a  t e utilis e afin d'am liorer la pr cision des calculs aux interfaces entre fluide et particules solides.

Dans un premier temps, nous nous sommes int ress s   l' volution d'une particule, soumise   un cisaillement, en deux ou trois dimensions. Ces simulations ont donn  des r sultats en parfait accord avec la th orie, au niveau de l' volution des positions des centres et des orientations.

Ensuite nous avons  tendu notre m thode   l' volution d'un syst me de particules immisc es dans du fluide. Nous avons  t  confront    un premier probl me num rique,   savoir la formation d'amas de particules. Ces amas n'ont pas de sens physique aux concentrations  tudi es. Ils sont li s au choix de la m thode num rique, qui n'incorpore plus de condition de non-p n tration des solides entre eux. Nous avons r m di    ce ph nom ne en ajoutant un algorithme de correction des positions des particules apr s leurs d placements, pour s'assurer qu'aucun amas ne se forme. Ceci nous a permis de travailler avec des suspensions plus concentr es.

Une fois capable de simuler correctement l'évolution d'un fluide et d'un ensemble de particules, nous avons souhaité utiliser cet outil de simulation pour réaliser des expériences de "rhéologie numérique". Il s'agit d'homogénéiser les contraintes dans une cellule contenant du fluide et un nombre significatif de particules, pour en déduire une loi de comportement macroscopique. Un second problème numérique est alors apparue, concernant les effets de bords. Avec des conditions limites classiques pour un cisaillement plan, le fluide compris entre les bords du domaine et les particules solides est très fortement contraint. Ce phénomène fausse les calculs d'homogénéisation, et conduit à une surestimation de la contrainte. Nous avons utilisé une méthode de fenêtrage périodique afin de nous affranchir des effets de bords. A mi-chemin entre des conditions limites périodiques (difficilement implémentable sans rentrer dans l'assemblage de la matrice de raideur) et une technique de fenêtrage classique, cette méthode a donné des résultats satisfaisants, tout en limitant l'augmentation des temps de calcul. Nous avons utilisé cet outil de simulation pour calculer la viscosité équivalente d'une suspension de sphère, avec une concentration solide comprise entre 0 et 40%. Les résultats obtenus sont en bon accord avec la théorie. Nous avons ensuite testé notre outil sur une suspension de fibres. Nous avons pu obtenir directement des relations de fermetures, ainsi qu'une estimation des paramètres rhéologiques pour décrire le comportement de la suspension de fibres. A faible concentration nous avons obtenu des valeurs pour les coefficients N_s et N_p en bon accord avec les modèles théoriques. Nous avons également pu comparer l'évolution du tenseur d'orientation d'ordre 2 avec celle prédite par l'équation de Folgar et Tucker et nous avons pu pointer les faiblesses de ce modèle.

Ce travail a révélé l'intérêt des simulations numériques directes d'écoulements de suspensions pour mener des expériences de rhéologie numériques. Après validation sur des cas tests simples, nous nous sommes intéressés à des suspensions de plus en plus complexes. L'intérêt de notre approche s'est révélée lors de l'étude de l'évolution de l'orientation des fibres. Nos calculs directs nous ont permis d'obtenir un série de mesure de rhéologie qui permettent d'étudier le comportement à l'échelle macroscopique de ce type de suspension. Cet aspect est assez appréciable car A. Megally avait montré dans sa thèse qu'il était assez difficile de faire de la rhéologie expérimentale classique (cône plan, capillaire, ...) pour les polymères chargés de fibre.

Les perspectives concernent d'une part l'amélioration et l'extension de l'outil de rhéologie numérique, mais aussi l'utilisation à d'autres domaines des calculs à l'échelle microscopique.

5.1 Amélioration de l'outil de rhéologie numérique

Bien que donnant des résultats satisfaisants, notre méthode numérique peut encore être améliorée à bien des égards :

- la limitation principale de notre travail a été le temps de calcul excessif en 3D. On peut essayer d'améliorer cela en utilisant un schéma d'intégration implicite qui permet d'avoir un pas de temps plus grand. Il faudra bien sûr coupler cela avec une bonne gestion des collisions.
- il faudrait valider les forces de répulsion de courte portée en faisant des comparaisons avec des expériences. Il faudrait poursuivre les études utilisant les outils de rhéo-

optique [Cha07].

- il faudrait aussi valider la formulation utilisant des forces continues en travaillant sur d'autre problème comme la sédimentation [YW07] ou la rotation de Quincke [PLL07, LLPP08] .
- il faudrait compléter les calculs sur les mélanges de fibres et sphères afin de proposer une équation de Folgar et Tucker qui permet de calculer le comportement macroscopique de ce type de suspension.

Comme on l'a déjà mentionné notre outil permet d'obtenir des séries de données qui permettent de valider et améliorer les modèles macroscopiques. Habituellement ces données sont obtenues de façons expérimentales et l'on a accès qu'aux variables macroscopiques comme la viscosité et les différences de contrainte normale [SAC04, SCMA04, LVAC07, FHAC08] . De notre coté l'information est plus riche car l'on peut suivre l'orientation de chaque particule et les grandeurs macroscopiques sont plus faciles à calculer. Comme nos calculs, les mesures expérimentales ont montré les faiblesses du modèle de Fogar et Tucker pour décrire l'évolution d'une population de fibres et des améliorations ont récemment été proposées [WOT08, FAHC08]. Le premier article propose de pondérer le tenseur d'ordre 4 qui ferme l'équation de Folgar et Tucker par un terme qui prend aussi en compte l'orientation donné par le tenseur d'ordre 2 ("reduced-strain closure model"). La constante C_I est aussi remplacé par un tenseur qui va aussi dépendre de l'orientation et donc de \underline{a}_2 . Le deuxième article propose de rajouter un tenseur d'interaction définie par

$$\underline{\underline{b}}_2 = \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{\phi=0}^{\pi} \vec{p}(\theta, \phi) \otimes \vec{p}(\theta, \phi) |\vec{p}(\theta, \phi) \times \vec{p}(\theta, \phi)| \Psi(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi$$

le problème étant alors d'exprimer $\underline{\underline{b}}_2$ en fonction de \underline{a}_2 pour pouvoir fermer ces équations. Il reste maintenant à confronter nos séries de données à ces modèles.

Un autre important challenge est de pouvoir passer à des concentrations de particules solides plus importantes. Il faudra prendre en compte des forces de friction entre particules. On peut partir des approches proposées par [Mor00, RBR96, FMdS05] pour calculer l'écoulement de particules sphériques. Leurs méthodes pourrait être ajoutées à notre solveur particulaire et adaptées à des particules de formes plus complexes. On pourrait suivre l'approche de [YS07] [WAC07]. pour les écoulements de suspension. Au lieu d'utiliser des forces de répulsion, on peut adapter le modèle qui permet l'interpénétration des grains dans l'approche DEM (Discrete Element Method) où la force de répulsion dépend de la longueur de pénétration dans la particule.

5.2 Les simulations à l'échelle microscopiques ou mésoscopiques

Durant cette thèse, nous avons développer de nombreux outils et méthodologies qui ont été utilisés sur d'autres projets connexes. On a pu montrer ainsi l'intérêt de ce type de calcul à l'échelle micro- ou mésoscopique pour la compréhension et l'analyse de nombreux phénomènes physiques. Cela est illustré sur quelques exemples sur lesquels, on a directement participé.

Création d'échantillons numériques

Dans notre étude, la construction d'un échantillon représentatif d'une suspension dans un volume élémentaire était un passage obligé.

Malgré son aspect rudimentaire actuel cet outil a été utilisé dans la thèse de H. Miled [Mil09] qui propose de déterminer les propriétés mécaniques d'un matériau composite (matrice polymère + fibres). Pour cela un volume élémentaires représentatifs chargés de fibres est générés (figure 5.1). La phase fibres ainsi que la phase matrice sont supposées avoir chacune un comportement élastique linéaire isotrope. Pour le calcul des propriétés mécaniques, on soumettra l'échantillon à trois essais numériques de traction simple et deux essais de cisaillement simple. Ce cette manière, on calcule les coefficients de Young et de poisson du matériau. Cette détermination est sensible au nombre de fibres dans l'échantillon. On peut constater sur la figure 5.1b qu'un échantillon contenant 22 fibres pourra être un VER optimum.

Cependant il reste à améliorer cet outil. Plus généralement, il faut passer d'une représentation géométrique et/ou topologique donnée par des images, films, variables statistiques à une représentation numérique en éléments finis, cette transition étant assez complexe dans le cas de résultats expérimentaux 3D. Ceci implique la possibilité d'immersion de n'importe quel type d'entité, la gestion d'une éventuelle périodicité, l'encombrement, la définition de quelle information sera nécessaire au calcul direct. Actuellement, on ne peut faire de la rhéologie numérique que pour du cisaillement. Il faudrait aussi chercher un nouveau VER qui permet de la rhéologie pour des écoulements élongationnels [HH06].

Dispersion de charges par cisaillement

L'incorporation de charges dans les polymères est une technique couramment employée car elle permet de modifier et d'améliorer les propriétés finales du matériau, mais aussi d'élargir son domaine application. De plus, elle est un moyen économique pour développer de nouveaux matériaux répondant à des applications spécifiques. Par exemple on mélange de la silice et le noir de carbone aux élastomères afin d'améliorer les performances des pneumatiques.

On a utilisé les méthodes développées pour cette thèse pour étudier la dispersion et l'érosion d'agglomérats à l'échelle microscopique [AVN⁺03, Leb07b, Leb07a, Rou09] . Deux aspects sont intéressants : l'un concerne la dynamique du mélange afin de voir comment les gros amas se dispersent ; l'autre étudie la contrainte exercée sur les grosses particules (ou agglomérats) car on montre que le mécanisme de désagrégation d'un amas est lié cette contrainte. Il y a en général quatre scénarios de dispersion : la rupture qui se traduit par un cassage de l'amas considéré en deux ou plusieurs parties ; l'érosion qui est un phénomène plus lent et qui se caractérise par un arrachement de petits fragments de la surface de l'agglomérat de départ ; la décohesion quand un vide se crée entre les deux parties qui se séparent ; l'infiltration si la matrice fluide peut s'infiltrer à l'intérieur, ce qui va modifier la dispersion des charges.

On peut par exemple étudier l'influence du taux de cisaillement sur le comportement d'un agglomérat. et montrer qu'un taux de cisaillement faible (voir le départ des particules sur la figure 5.2) entraîne l'érosion de l'agglomérat alors qu'un taux de cisaillement élevé déclenche plutôt la dispersion de l'agglomérat par rupture (formation de trois petits

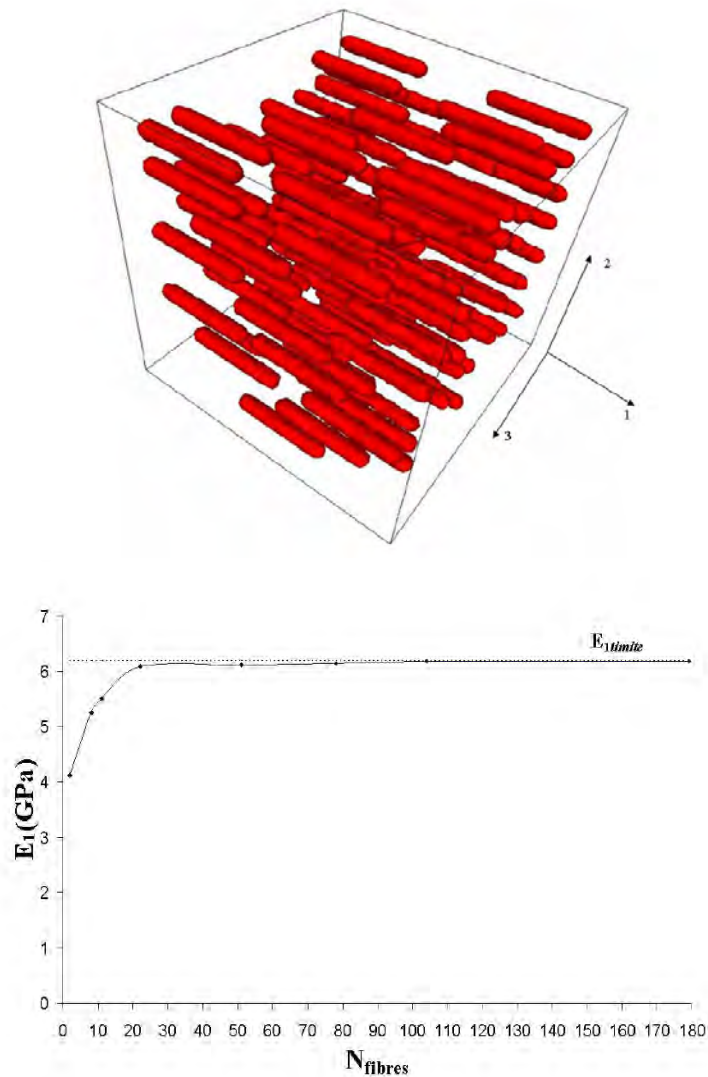


FIGURE 5.1 – Calcul mécanique par homogénéisation : (a) VER avec une orientation unidirectionnelle des fibres; (b) Prédiction du module de Young longitudinal pour des échantillons avec des fibres ayant une concentration volumique de 10% et un rapport de forme de 10

agglomérats sur la figure 5.3).

Comme la dynamique de l'érosion est directement liée à la contrainte à la surface de l'agglomérat, on peut essayer d'augmenter cette contrainte [Zar07]. Une des possibilités est d'ajouter des petites billes de verre en concentration suffisante pour que les forces d'interaction hydrodynamique augmentent la contrainte due au seul cisaillement. Les figures 5.4 montrent que la contrainte sur la particule centrale (parfaitement symétrique lorsqu'elle est isolée) augmente quand la petite particule se rapproche.

La rhéologie propre de la matrice fluide peut aussi changer la contrainte $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}$ sur l'agglomérat. Pour étudier cela, on a pris une matrice fluide qui obéit à une loi de Maxwell

(le temps de relaxation λ caractérise le caractère viscoélastique du fluide). On montre que si le fluide devient de plus en plus viscoélastique une compression plus importante s'applique sur la particule (voir figures 5.5) et donc provoque une érosion plus importante.

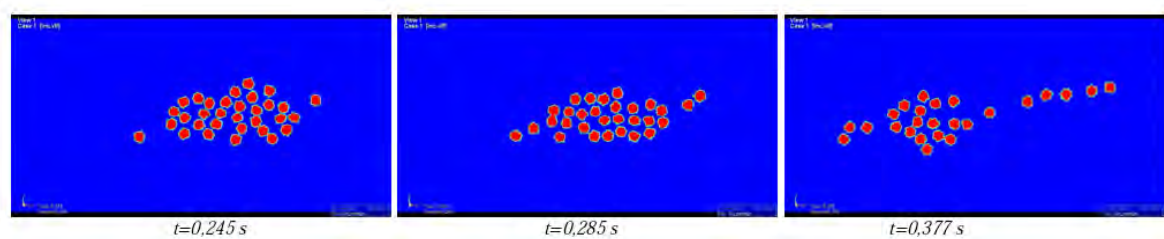


FIGURE 5.2 – Dispersion d'un agglomérat de 34 particules dans champ de cisaillement $\dot{\gamma} = 50 \text{ s}^{-1}$

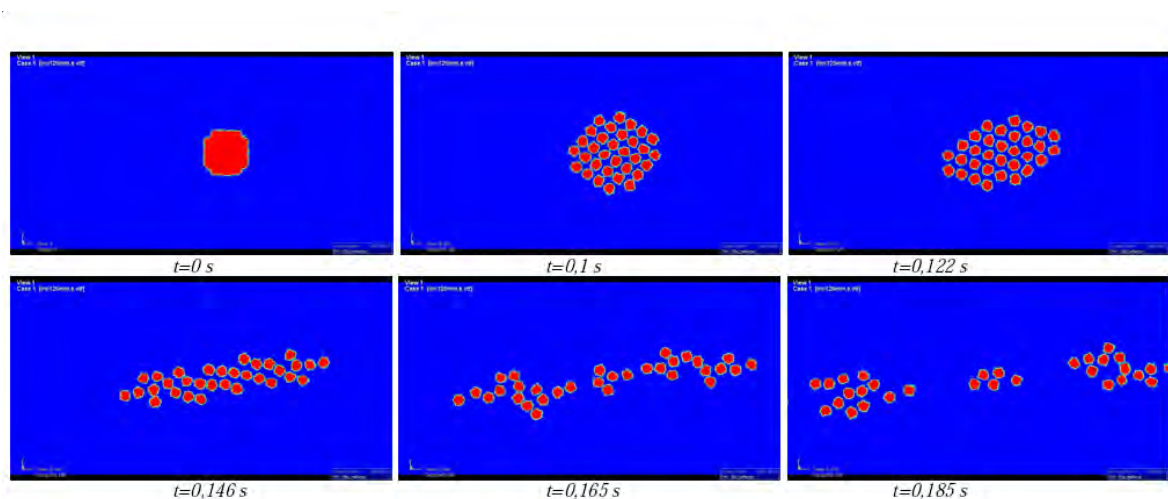


FIGURE 5.3 – Dispersion d'un agglomérat de 34 particules dans champ de cisaillement $\dot{\gamma} = 65 \text{ s}^{-1}$

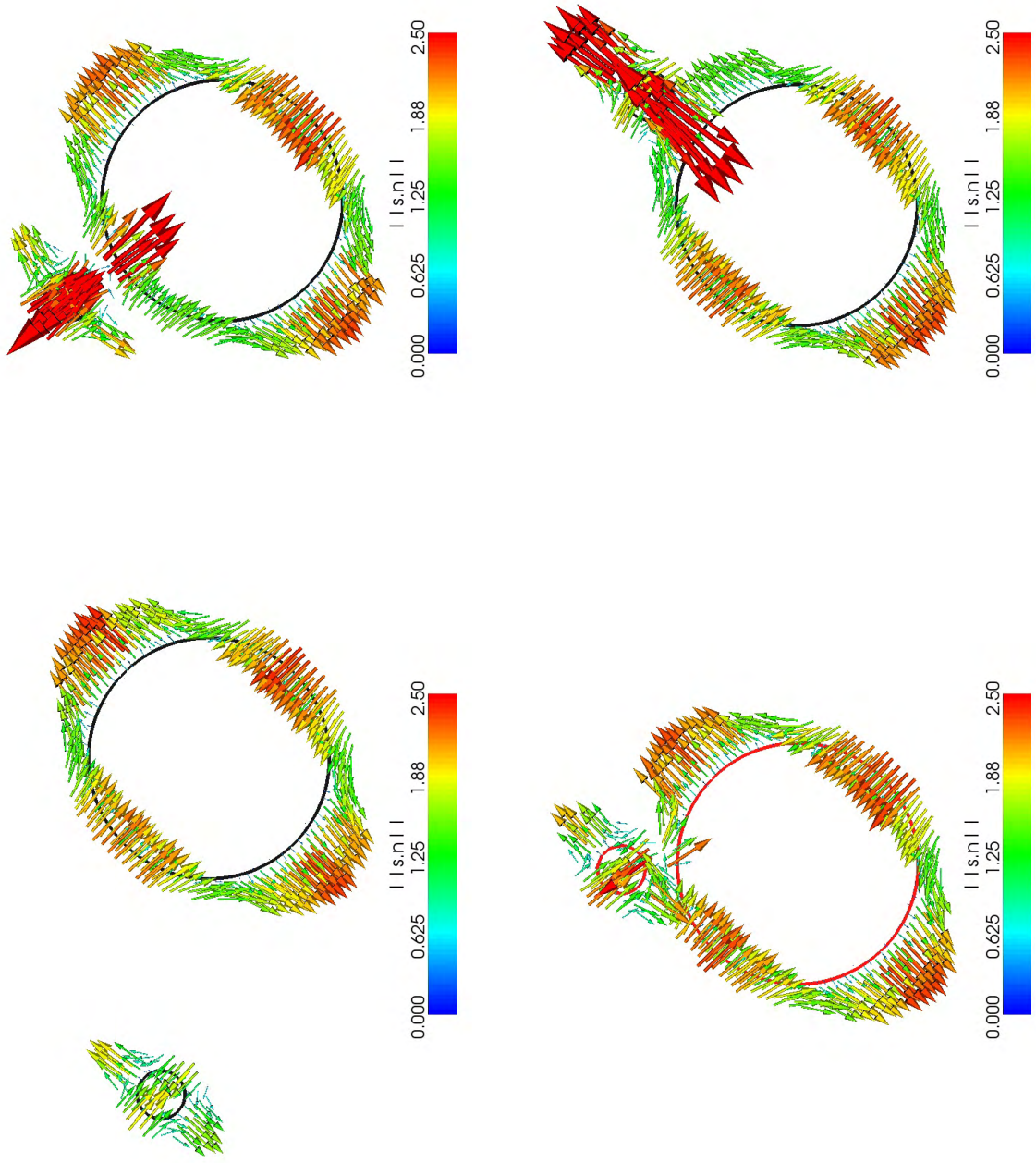


FIGURE 5.4 – Contrainte $\underline{\sigma} \cdot \underline{n}$ à la surface des particules de rayons ($R_2 = R_1/5 = .01$ et $\gamma = 1$) à différents temps : (a) $t = 1$; (b) $t = 12.2$; (c) $t = 12.8$; (d) $t = 13.7$.

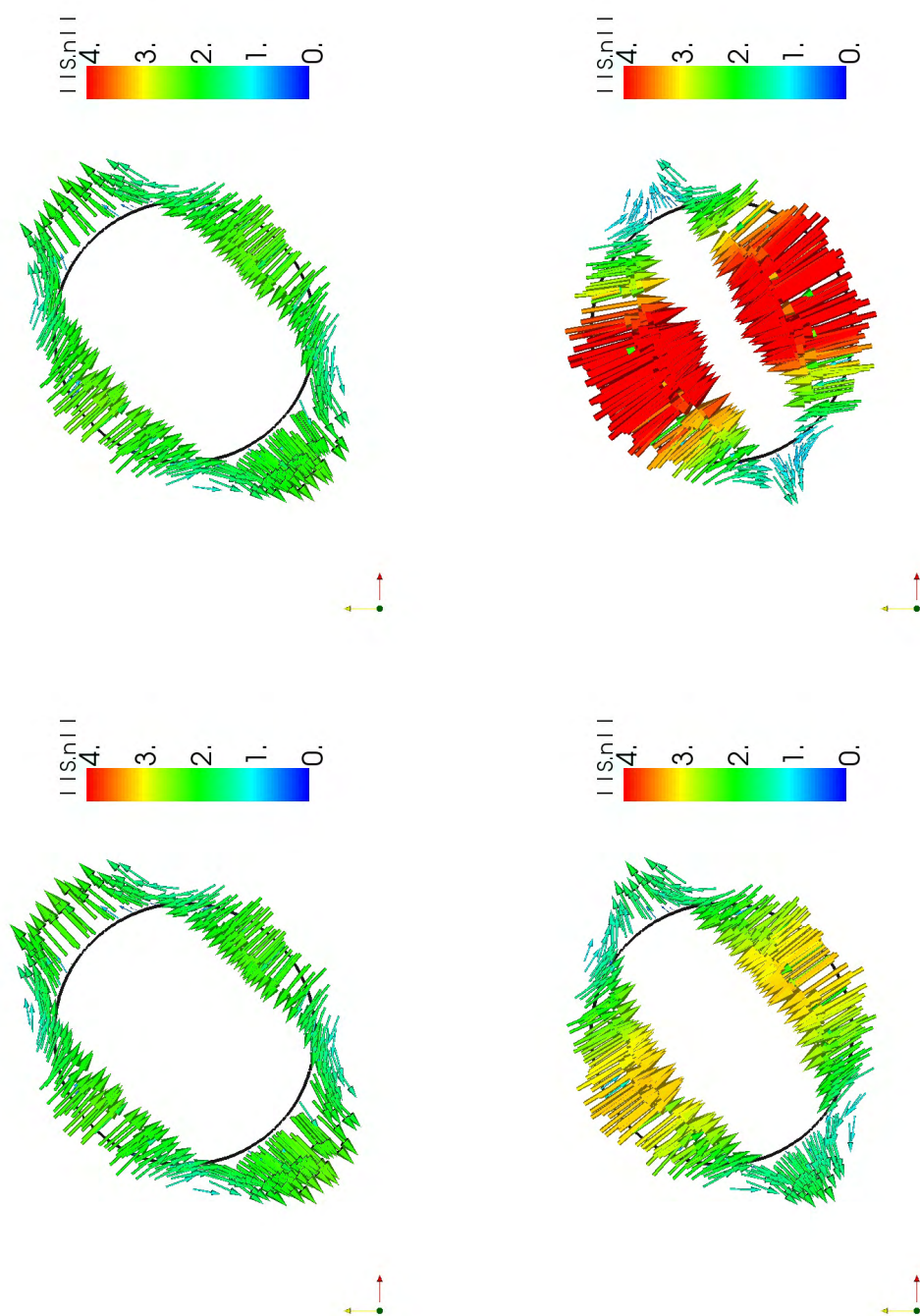


FIGURE 5.5 – Contrainte $\underline{\sigma} \cdot \vec{n}$ à la surface d'une particule de rayon $R = .05$ pour différents temps de relaxation λ : (a) $\lambda = 0$; (b) $\lambda = 0.1$; (c) $\lambda = 0.5$; (d) $\lambda = 1$.

Bibliographie

- [AC99] C. Ancey and P. Coussot. *Rhéophysique des pâtes et des suspensions*. EDP Sciences, 1999.
- [ACE99] C. Ancey, P. Coussot, and P. Evesque. A theoretical framework for very concentrated granular suspensions in a steady simple shear flow. *J. Rheol.*, 43 :1673–1699, 1999.
- [AG85] W.W. Armstrong and M.W. Green. The dynamics of articulated rigid bodies for purposes of animation. In *Visual Computer*, pages 231–240. Springer-Verlag, 1985.
- [AT90] S.G. Advani and C.L. Tucker. Closure approximations for three-dimensional structure tensors. *J. Rheology*, 34 :367–386, 1990.
- [At97] Averbakh and *al.* Slow viscous flow of highly concentrated suspensions - part ii. *Int. J. Multiphase Flow*, 23 :613–629, 1997.
- [At06] Ausias and *al.* Direct simulation for concentrated fibre suspensions in transient and steady state shear flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 135 :46–57, 2006.
- [AVN⁺03] M. Astruc, S. Vervoort, H.O. Nouatin, T. Coupez Y. De Puydt, P. Navard, and E. Peuvrel-Disdier. Experimental and numerical study of the rotation and the erosion of fillers suspended in viscoelastic fluids under simple shear flow. *Rheol. Acta*, 42 :421–431, 2003.
- [BA94] K. Burget and S.G. Advani. An experimental investigation of fiber-wall interactions in simple shear flow. *ASME FED*, 189, 1994.
- [Bar89] D. Baraff. Analytical methods for dynamic simulation of non-penetrating rigid bodies. *Computer Graphics*, 23(3) :223–232, 1989.
- [Bat70a] G.K. Batchelor. Slender-body theory for particles of arbitrary cross-section in stokes flow. *J. Fluid. Mech.*, 44 :419–440, 1970.
- [Bat70b] G.K. Batchelor. The stress system in a suspension of force-free particles. *J. Fluid Mech.*, 41 :545–570, 1970.
- [Bat71] G. K. Batchelor. The stress generated in a non-dilute suspension of elongated particles by pure straining motion. *J. Fluid. Mech.*, 46 :813–829, 1971.
- [BB88] Brady and Bossis. Stokesian dynamics. In *Annual Review of Fluid Mech.*, volume 20, pages 111–, 1988.
- [BG72a] G.K. Batchelor and J.T. Green. The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 . *J. Fluid. Mech.*, 56 :401–427, 1972.

- [BG72b] G.K. Batchelor and J.T. Green. The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. *J. Fluid Mech.*, 56 :375–400, 1972.
- [CDD00] T. Coupez, H. Dignonnet, and R. Ducloux. Parallel meshing and remeshing. *Applied Mathematical*, 25 :153–175, 2000.
- [CDL⁺ss] T. Coupez, H. Dignonnet, P. Laure, L. Silva, and R. Valette. Calculs éléments finis multidomaines : applications aux problèmes multi-phasiques. In M'hamed Souli, editor, *Interaction Fluide Structure : Modélisation et Simulation Numérique*, pages 163–201. Hermes, in press.
- [Cha07] M. Chaim. Etude du comportement d'une suspension de charges solides dans un écoulement de cisaillement. *Rapport de Master, ENSMP*, 2007.
- [CM97] T. Coupez and S. Marie. From a direct solver to a parallel iterative solver in 3d forming simulation. *International Journal of Supercomputer and Applications*, 11 :2005, 1997.
- [Col04] V. Collin. *Etude rhéo-optique des mécanismes de dispersion du noir de carbone dans les élastomères*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2004.
- [Cox70] Cox. The motion of long slender bodies in a viscous fluid part 1. general theory. *J. Fluid. Mech.*, 44 :791–810, 1970.
- [CT95] Cintra and Tucker. Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *J. Rheology*, 39, 1995.
- [DA84] Dinh and Armstrong. A rheological equation of state for semi-concentrated fiber suspensions. *J. of Rheology*, 28 :207–227, 1984.
- [DGMN03] C. Diaz-Goano, P.D. Mineev, and K. Nandakumar. A fictitious domain/finite element method for particulate flows. *J. Comp. Physics*, 192 :105–123, 2003.
- [DMHP07] G. D'Avino, P.L. Maffettone, M.A. Hulsen, and G.W.M. Peters. A numerical method for simulating concentrated rigid particle suspensions in an elongational flow using a fixed grill. *J. Comput. Physics*, 226(1) :688–711, 2007.
- [Ein56] A. Einstein. *Investigation of the brownian movement*. New-York, Dover Publication, 1956. traduction de *Ann. Physik*, Einstein (1906).
- [FA67] N.A. Frankel and A. Acrivos. On the viscosity of a concentrated suspension of solid spheres. *Chem. Eng. Sci.*, 22 :847–853, 1967.
- [FAHC08] J. Férec, G. Ausias, M.C. Heuzey, and P.J. Carreau. Modeling fiber interactions in semi-concentrated fiber suspensions. *J. Rheology*, 2008. acceptée.
- [FHAC08] J. Férec, M.C. Heuzey, G. Ausias, and P.J. Carreau. Rheological behavior of fiber-filled polymers under large amplitude oscillatory shear flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 151 :89–100, 2008.
- [FMdS05] J. Fortin, O. Millet, and G. de Saxcé. Numerical simulation of granular materials by an improved discrete element method. *Int. J. of Num. Meth. Engng.*, 62 :639–663, 2005.
- [For01] A. Fortin. *Analyse numérique pour ingénieurs*. Les Presses internationales Polytechnique, 2001.

- [FT84] F. Folgar and C.L. Tucker. Orientation behavior of fibers in concentrated suspensions. *J. Reinf. Plast. Compos.*, 3 :98–119, 1984.
- [Ft98] Fan and *al.* A direct simulation of fibre suspensions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 74 :113–135, 1998.
- [Ft99] Fan and *al.* Simulation of fibre suspension flows by the brownian configuration field method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 84 :257–274, 1999.
- [GC05] C. Gruau and T. Coupez. 3d tetrahedral unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 194 :4951–4976, 2005.
- [GMA80] Gadala-Maria and Acrivos. shear induced structures in a concentrated suspension of solid spheres. *J. of Rheology*, 24 :789–, 1980.
- [GP97] P. Gondret and L. Petit. Dynamic viscosity of macroscopic suspensions of bimodal sized solid spheres. *J. of Rheol.*, 41 :1261–1274, 1997.
- [GPH⁺01] R. Glowinski, T.-W. Pan, T.I. Hesla, D.D. Joseph, and J. Periaux. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : Application to particulate flow. *J. Comput. Phys.*, 169 :363, 2001.
- [GPP94] R. Glowinski, T.W. Pan, and J. Periaux. A fictitious domain method for dirichlet problem and applications. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 111 :283–303, 1994.
- [Gt98] Glowinski and *al.* Distributed lagrange multiplier methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. *Computer Methods in applied Mechanics and Engineering*, 151 :181–194, 1998.
- [Gt99] Glowinski and *al.* A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase flow*, 25 :755–794, 1999.
- [HG99] B. Herzhaft and É. Guazzelli. Experimental investigation of the sedimentation of a dilute fiber suspension. *J. Fluid Mech.*, 384 :133–158, 1999.
- [HH06] W.R. Hwang and M.A. Hulsenb. Direct numerical simulations of hard particle suspensions in planar elongational flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 136 :167–178, 2006.
- [HHM04a] W.R. Hwang, M.A. Hulsen, and H. E. H. Meijer. Direct simulation of particle suspensions in sliding bi-periodic frames. *J. Comp. Physics*, 194 :742–772, 2004.
- [HHM04b] W.R. Hwang, M.A. Hulsen, and H. E. H. Meijer. Direct simulations of particle suspensions in a viscoelastic fluid in sliding bi-periodic frames. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 121 :15–33, 2004.
- [HPZ01] H.H. Hu, N.A. Patankar, and M.-Y. Zhu. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the Arbitrary-Lagrangian-Eulerian technique. *J. Comput. Physics*, 169 :427–462, 2001.
- [Ht92] Hu and *al.* Direct simulation of fluid particle motions. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 3 :285–, 1992.

- [Hu96] H.H. Hu. Direct simulations of flows of solid-liquid mixtures. *Int. J. Multiphase Flow*, 22 :335–352, 1996.
- [Jef22] G.B. Jeffery. The motion of ellipsoidal particles immersed in viscous fluid. *Proc. R. Soc. London, A* 102 :161–179, 1922.
- [JS05] Jack and Smith. An invariant based fitted closure of the sixth-order orientation tensor for modelling short-fiber suspensions. *J. of Rheology*, 49 :1091–1115, 2005.
- [Jt01] Joung and *al.* Direct simulation of flexible fibers. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 99 :1–36, 2001.
- [Jt02] Joung and *al.* Viscosity of curved fibers in suspension. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 102 :1–17, 2002.
- [KD59] I.M. Krieger and T.J. Dougherty. A mechanism for non-newtonian flow in suspensions of rigid spheres. *Trans. Soc. Rheol.*, 3 :137–152, 1959.
- [Kt94] Koh and *al.* An experimental investigation of concentrated suspension flows in a rectangular channel. *J. of Fluid Mech.*, 266 :1–32, 1994.
- [LA87] Leighton and Acrivos. The shear-induced migration of particles in concentrated suspensions. *J. of Fluid Mech.*, 181 :415–439, 1987.
- [LBB⁺07] P. Laure, G. Beaume, O. Basset, L. Silva, and T. Coupez. Numerical methods for solid particles in particulate flow simulations. *European J. Comp. Mechanics*, 16 :365–383, 2007.
- [LDH⁺88] G.G. Lipscomb, G.G. Denn, M.M. Hur, D.U. Hur, and D.V. Boger. The flow of fiber suspensions in complex geometries. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 26 :297–325, 1988.
- [Leb07a] *Simulation directe 2D et 3D de la dispersion d'agglomérats sous cisaillement dans une matrice polymère*. 18^{ème} Congrès Français de Mécanique, 2007.
- [Leb07b] M. Leboeuf. *Influence des paramètres procédé sur les propriétés électriques et rhéologiques des polyamides chargés de noir de carbone*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2007.
- [LLPP08] E. Lemaire, L. Lobry, N. Pannacci, and F. Peters. Viscosity of an electro-rheological suspension with internal rotations. *J. Rheol.*, 52(3) :769–783, 2008.
- [LMC05] P. Laure, A. Megally, and T. Coupez. Collision strategy for the direct simulation of moving fibers in viscous fluid. *Int. Conf. on Computational Methods for coupled problems in science and engineering*, 2005.
- [LVAC07] W. Letwimolnun, B. Vergnes, G. Ausias, and P.J. Carreau. Stress overshoots of organoclay nanocomposites in transient shear flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 141(2-3) :167–179, 2007.
- [LVCed] L. Silva L. Ville and T. Coupez. Improved convective level set method for the numerical simulation of fluid buckling. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, submitted.
- [MAR01] K.B. Moses, S.G Advani, and A. Reinhardt. Investigation of fiber motion near solid boundaries in simple shear flow. *Rheology Acta*, 40 :306–306, 2001.

- [Mau97] B. Maury. A many-body lubrication model. *CRAS Series I*, 325 :1053–1058, 1997.
- [MBG07] B. Metzger, J.E. Butler, and É. Guazzelli. Experimental investigation of the instability of a sedimenting suspension of fibres. *J. Fluid Mech.*, 575 :307–332, 2007.
- [Meg05] A. Megally. *Etude et modélisation de l'orientation de fibres longues dans des thermoplastiques renforcés*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2005.
- [Mil09] H. Miled. *Rem3D STRUCT, Comportement complexe à l'état solide, tenue en service*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [MLC04] A. Megally, P. Laure, and T. Coupez. Direct simulation of rigid fibers in viscous fluid. In *3rd International Symposium on Two-phase flow modelling and Experimentation, Pisa*, 2004.
- [Mor00] J.J. Moreau. Contact and friction in the dynamist of rigid body systems. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 9 :9–28, 2000.
- [NB94] Nott and Brady. ressure-driven flow of suspensions : simulation and theory. *J. Fluid Mech.*, 275 :157–199, 1994.
- [OBR06] G. Ovarlez, F. Bertrand, and S. Rodts. Local determination of the constitutive law of a dense suspension of noncolloidal particles through magnetic resonance imaging. *J. Rheol.*, 50 :259–292, 2006.
- [OT81] Ouchiyama and Tanaka. Porosity of a mass of solid particles having a range of sizes. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20 :66–71, 1981.
- [PC98] E. Pichelin and T. Coupez. Finite element solution of the 3D mold filling problem for viscous incompressible fluid. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 163 :359–371, 1998.
- [PLL07] N. Pannacci, E. Lemaire, and L. Lobry. Rheology and structure of a suspension of particles subjected to quinicke rotation. *Rheol Acta*, 46 :899–904, 2007.
- [PSJ+00] N.A. Patankar, P. Singh, D.D. Joseph, R. Glowinski, and T.-W. Pan. A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. of Multiphase flow*, 26 :1509–1524, 2000.
- [PST94] R.F. Probstein, M.Z. Sengun, and T.-C. Tseng. Bimodal model of concentrated suspension viscosity for distributed particle sizes. *J. Rheol.*, 38 :811–829, 1994.
- [Pt91] Philips and *al.* A constitutive equation for concentrated suspensions that accounts for shear-induced particle migration. *Phys. of Fluid A*, 4, 1991.
- [Pt02] Pan and *al.* Direct simulation of the motion of a settling ellipsoid in newtonian fluid. *J. of Computational and Applied Mathematics*, 149 :71–82, 2002.
- [Pt05] Pan and *al.* Simulating the dynamics of fluid-ellipsoid interactions. *Computer and Structures*, 83 :463–478, 2005.
- [PTG91] Phan-Thien and Graham. A new constitutive model for fibre suspensions : flow past a sphere. *Rheol. Acta*, 57 :30–44, 1991.

- [RBR96] F. Radjai, L. Brendel, and S. Roux. Nonsmoothness, indeterminacy, and friction in twodimensional arrays of rigid particles. *Phys. Review E*, 54 :861–873, 1996.
- [Rou06] C. Roux. *Etude du comportement d'une charge de silice dans une matrice élastomère*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006.
- [Rou09] C. Roux. *Mécanismes de dispersion de la silice*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [SAC04] M. Sepehr, G. Ausias, and P.J. Carreau. Rheological properties of short fiber filled polypropylene in transient shear flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 123(1) :19–32, 2004.
- [SCMA04] M. Sepehr, P.J. Carreau, M. Moan, and G. Ausias. Rheological properties of short fiber model suspensions. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 48(5) :1023–1048, 2004.
- [SF90] Shaqfeh and Fredrickson. The hydrodynamic stress in a suspension of rods. *Phys. Fluids A*, 2 :7–, 1990.
- [SG54] K.H. Sweeny and R.D. Geckler. The rheology of suspension. *J. Appl. Phys.*, 25 :1135–1144, 1954.
- [SG98] Stockie and Green. Simulating the motion of flexible pulp fibres using the immersed boundary method. *J. of Computational Physics*, 147 :147–165, 1998.
- [SJH+00] P. Singh, D.D. Joseph, T.I. Helsa, R. Glowinski, and T.-W. Pan. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for viscoelastic particulate flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 91 :165–188, 2000.
- [SK97] Sundararajakumar and Koch. Structure and properties of sheared fiber suspensions with mechanical contacts. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 73 :205–239, 1997.
- [SKC92] C.A Stover, D. Koch, and C. Cohen. Observations of fiber orientation in simple shear flow of semi-dilute suspensions. *J. Fluid Mech.*, 238, 1992.
- [SP92] A.P. Shapiro and R.F. Probstein. A mechanism for non-newtonian flow in suspensions of rigid spheres. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :1422–1425, 1992.
- [St98] Shauly and *al.* Shear-induced particle migration in a polydisperse concentrated suspension. *J. of Rheol.*, 48, 1998.
- [Tuc91] C.L. Tucker. Flow regimes for fiber suspensions in narrow gaps. *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.*, 39 :239–268, 1991.
- [Vt07] Veeramani and *al.* A fictitious domain formulation for flows with rigid particles : A non-lagrange multiplier version. *J. of Computational Physics*, 867–879 :224, 2007.
- [WAC07] *GRIFF : a direct numerical simulation tool for particulate flows*. 18ème Congrès Français de Mécanique, 2007.
- [WOT08] J. Wang, J.F. O’Gara, and C.L. Tucker III. An objective model for slow orientation kinetics in concentrated fiber suspensions : Theory and rheological evidence. *J. Rheology*, 2008. acceptée.

- [WT07] Wan and Turek. Fictitious boundary and moving mesh methods for the numerical simulation of rigid particulate flows. *J. of Computational Physics*, 222 :28–56, 2007.
- [YKD94] Y. Yamane, Y. Kaneda, and M. Dio. Numerical simulation of semi-dilute suspensions of rodlike particles in shear flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 54 :405–421, 1994.
- [YM93] Yamamoto and Matsuoka. A method for dynamic simulation of rigid and flexible fibers in a flow field. *J. of Chem. Phys.*, 98 :644–, 1993.
- [YM95] S. Yamamoto and T. Matsuoka. Dynamic simulation of fiber suspensions in shear flow. *J. Chem. Phys.*, 116(13) :2254–2260, 1995.
- [YS07] Z. Yu and X. Shao. A direct-forcing fictitious domain method for particulate flows. *J. Comp. Physics*, 227 :292–314, 2007.
- [YW07] Z. Yu and A. Wachs. A fictitious domain method for dynamic simulation of particle sedimentation in bingham fluids. 145 :78–91, 2007.
- [Zar07] J.-F. Zaragoci. Modélisation du comportement d’une particule solide placée dans une matrice newtonienne ou viscoélastique au cours d’un écoulement de cisaillement simple. *Rapport de Master, ENSMP*, 2007.
- [ZT00] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor. *The finite element method - The basis*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.

Annexe A

Rappels d'analyse fonctionnelle et d'optimisation

Ce chapitre regroupe les principaux résultats que nous utilisons dans notre méthode d'éléments finis. Nous ne les redémontrons pas. Nous expliquons en revanche dans quelles conditions ils sont utilisés dans notre approche.

■ Théorème de Lax-Milgram :

Soit $a(u, v)$ une forme bilinéaire, continue et coercive définie sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . Soit $f \in \mathcal{H}$. $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire de \mathcal{H} . Alors :

$$\exists ! u \in \mathcal{H} \text{ tq } \forall v \in \mathcal{H} \quad a(u, v) = \langle f, v \rangle \quad (\text{A.1})$$

De plus, si a est symétrique, u est caractérisé par la propriété :

$$u \in \mathcal{H} \text{ et } \frac{1}{2}a(u, u) - \langle f, u \rangle = \min_{v \in \mathcal{H}} \underbrace{\left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle f, v \rangle \right\}}_{J(v)} \quad (\text{A.2})$$

Application :

Ce théorème assure l'existence et l'unicité de la solution \vec{u} du problème variationnel associé au problème de Stokes. Le résultat (A.2) est fondamental car il permet de faire le lien entre la recherche d'une solution au problème variationnel et un problème d'optimisation. Ce résultat nous permettra d'exprimer le problème de Stokes incompressible comme une minimisation de Lagrangien sous contrainte. Nous utilisons le lemme fondamental suivant, pour reformuler nos problèmes variationnels avec diverses contraintes :

■ Théorème de minimisation avec contrainte d'égalité :

Soit $J(v)$ une fonction définie sur une espace de Hilbert \mathcal{H} à valeur dans \mathbb{R} et $F(v) = (F_1(v), \dots, F_N(v))$ une fonction sur \mathcal{H} à valeurs dans \mathbb{R}^N . On supposera F dérivable au sens de Fréchet sur \mathcal{H} , c'est-à-dire que pour tout $i = 1 \dots N$:

$$\forall u \in \mathcal{H} \exists F'_i(u) \in \mathcal{H} \text{ tq } \forall w \in \mathcal{H} F_i(u+w) = F_i(u) + \langle F'_i(u), w \rangle + o(w)$$

avec $\lim_{w \rightarrow 0} \frac{|o(w)|}{\|w\|} = 0$.

On considère le problème de minimisation de J sous la contrainte $F(v) = 0$:

$$\min_{v \in \mathcal{H}, F(v)=0} J(v) \tag{A.3}$$

On appelle lagrangien du problème la fonction :

$$\forall (v, \mu) \in \mathcal{H} \times \mathbb{R}^N \quad \mathcal{L}(v, \mu) = J(v) + \mu \cdot F(v) \tag{A.4}$$

μ est appelé multiplicateur de Lagrange pour la contrainte $F(v) = 0$. Les deux problèmes suivants sont alors équivalents :

$$\min_{v \in \mathcal{H}, F(v)=0} J(v) = \min_{v \in \mathcal{H}} \max_{\mu \in \mathbb{R}^N} \mathcal{L}(v, \mu) \tag{A.5}$$

et admettent une unique solution u .

De plus, si J et F sont continuellement dérivables, alors il existe un multiplicateur de Lagrange $\lambda \in \mathbb{R}^N$ tel que :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v}(u, \lambda) = J'(u) + \lambda \cdot F'(u) = 0 \text{ et } \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda}(u, \lambda) = F(u) = 0 \tag{A.6}$$

On dit alors que le couple (u, λ) est un point selle du lagrangien.

Application au problème de Stokes incompressible :

On utilise ce théorème pour introduire le multiplicateur de Lagrange $\vec{\lambda}$ qui impose la contrainte de mouvement de corps rigide sur Ω_s dans la formulation variationnelle (2.21)-(2.24). De la même façon, la pression p peut être vue comme un multiplicateur de Lagrange associé à l'incompressibilité.

■ Théorème 3 : pénalisation d'une contrainte :

Avec les définitions et notations du théorème 2, nous considérons à nouveau le problème de minimisation de J sous la contrainte $F(v) = 0$:

$$\min_{v \in \mathcal{H}, F(v)=0} J(v) \quad (\text{A.7})$$

Pour $r \in R_+$ on introduit la fonction $J_r(v)$:

$$\forall v \in \mathcal{H} \quad J_r(v) = J(v) + \frac{r}{2} \|F(v)\|^2$$

$J_r(v)$ est appelée pénalisation de la fonction j et r est le facteur de pénalisation. Alors il existe une unique solution u_r au problème de minimisation suivant :

$$\min_{v \in \mathcal{H}} J_r(v) \quad (\text{A.8})$$

Et u_r tend vers u quand r tend vers l'infini :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} u_r = u \quad (\text{A.9})$$

Application au problème de Stokes incompressible rigide :

Ce théorème permet d'obtenir la formulation (2.29)-(2.31) où on le terme de pénalisation joue le rôle d'une viscosité sur le domaine solide.

■ Algorithme d'Uzawa :

Avec les définitions et notations du théorème 2, nous cherchons un point selle du lagrangien $\mathcal{L}(v, \mu)$:

$$\text{trouver } (u, \lambda) \text{ tq } \mathcal{L}(u, \lambda) = \min_{v \in \mathcal{H}} \max_{\mu \in \mathbb{R}^N} \mathcal{L}(v, \mu)$$

L'algorithme d'Uzawa consiste à chercher une solution de ce problème de manière itérative :

• initialisation : on se fixe λ^0 et $\rho > 0$.

• incrément $k \rightarrow k + 1$:

FAIRE : trouver u_k solution de :

$$\mathcal{L}(u_k, \lambda_k) = \min_{v \in \mathcal{H}} \mathcal{L}(v, \lambda_k) \tag{A.10}$$

$$\text{si } \mathcal{L}(u_k, \lambda_k) > \mathcal{L}(u_{k-1}, \lambda_{k-1}) \text{ calculer : } \lambda_{k+1} = \lambda_k + \rho F(u_k) \tag{A.11}$$

sinon recommencer avec ρ plus petit.

Tant que : $\|F(u_k)\| > \epsilon$

La convergence d'un algorithme d'Uzawa dépend de la valeur de ρ que l'on choisit. Il doit être suffisamment faible, mais on ne peut pas prédire à l'avance si l'algorithme va converger pour un ρ donné. En pratique, on travaille plutôt avec une méthode de lagrangien augmenté. Dans ce cas, la convergence de l'algorithme vers le point selle est assuré par le théorème suivant :

■ Théorème 4 : méthode de lagrangien augmenté :

Avec les définitions et notations du théorème 2, nous considérons à nouveau le problème de minimisation de J sous la contrainte $F(v) = 0$. Pour tout $\rho > 0$, nous définissons le lagrangien augmenté du problème par :

$$\mathcal{L}_r(v, \mu) = J(v) + \frac{r}{2} \|F(v)\|^2 + \mu \cdot F(v)$$

Soit $\rho > 0$ et $\{u_k, \lambda_{k+1}\}$ la suite calculée par un algorithme d'Uzawa et définie par les équations (A.10) et (A.11) :

$$\begin{cases} \mathcal{L}(u_k, \lambda_k) = \min_{v \in \mathcal{H}} \mathcal{L}(v, \lambda_k) \\ \lambda_{k+1} = \lambda_k + \rho F(u_k) \end{cases}$$

Alors pour tout $\lambda_0 > 0$ et pour $0 < \rho < 2r$ la suite $\{u_k\}$ converge vers la solution u du problème avec contrainte.

RÉSUMÉ

Le travail présenté ici porte sur la simulation numérique de l'écoulement d'un mélange de fluide et de particules solides. Le fluide obéit à une loi de comportement newtonien, et les particules solides sont des bâtonnets ou des sphères, considérées comme des corps indéformables. Ce modèle de fluide complexe est une représentation de composites utilisés en injection. Le but est de connaître le comportement rhéologique en cisaillement de ce type de suspension. Pour cela nous étudions l'évolution d'un tel mélange dans une cellule cubique, soumise à un cisaillement plan, avec des conditions limites pseudo-périodiques. Les équations décrivant les champs de vitesse et pression dans le fluide sont étendues au domaine solide, en ajoutant une contrainte d'indéformabilité. On se ramène ainsi à un système d'équation en vitesse pression sur le domaine fictif total, résolu par une méthode d'éléments finis. Dans cette approche multidomaine, il est nécessaire de suivre l'évolution des positions des particules solides. Le domaine solide est suivi par sa fonction caractéristique. Une méthode de transport lagrangien est utilisée pour actualiser les positions des particules, puis une méthode de level-set permet d'en déduire à chaque instant la fonction caractéristique associée. Une technique de correction des positions des particules à posteriori permet de réimposer la condition de non-interpénétration des particules. Des calculs d'homogénéisation ont été effectués, permettant notamment de calculer des viscosités équivalentes pour des suspensions de sphères, et de construire des lois de comportement et d'évolution des tenseurs d'orientation pour des suspensions de fibres. L'utilisation de conditions limites pseudo-périodiques permet de limiter les effets de bords dans les calculs d'homogénéisation. Par ailleurs une technique de h-adaptation a été appliquée pour mieux décrire les interfaces. Les premiers résultats obtenus sont en assez bon accord avec les modèles théoriques, et une première simulation d'écoulement d'un mélange a été menée.

ABSTRACT

This work is dedicated to numerical simulation of flow of solid-liquid mixtures. The fluid flow obeys a Newtonian behavior and suspended particles are modeled by rigid spheres or sticks. This suspension is appropriate for composites injection molding. Our goal is to better understand the rheological behavior of such a mixture under a shear flow. So we consider the evolution of this mixture in a cubic cell, under a shear flow, with pseudo-periodic boundary conditions. We extend the velocity-pressure equations to solid domain by adding a rigid constraint. Thus we obtain a system of velocity-pressure equations defined on the whole fictitious domain that we solve by a Finite Element method. In this multidomain approach, we have to follow the evolution of the positions of solid particles. The solid domain is represented by a characteristic function. A lagrangian transport is used to update the positions of particles, and the corresponding characteristic function is deduced at any time thanks to a Level-Set method. A collision algorithm is used after this transport to correct positions and prevent particles from interpenetrating. Homogenization calculus have been done in order to estimate equivalent viscosity for suspensions of spheres, and behavior laws and models for evolution of orientation tensors in suspensions of fibers. Boundary effects are reduced thanks to pseudo-periodic boundary conditions. Moreover the interface description is improved by a h-adaptation technique. Our results are in rather good agreement with theoretical models, and a first simulation of a 3D mixture flow is presented.