

Évaluation du logiciel *LIGGGHTS* pour la modélisation d'écoulement de matériaux granulaires

Par : Maxime Montmagny

Objectifs

Avant de plonger dans les expérimentations avec les différents types de paillis, nous avons choisi de conduire une étude exploratoire avec la méthode des éléments discrets et le logiciel *LIGGGHTS*. Le but est d'explorer l'apport et les limites que peut amener cette méthode.

Méthodologie

À l'aide d'un banc de test simulé (voir figure 1), des études par la simulation par éléments discrets (effectuée à l'aide du logiciel *LIGGGHTS*) ont été effectuées sur des particules similaires au polypropylène.

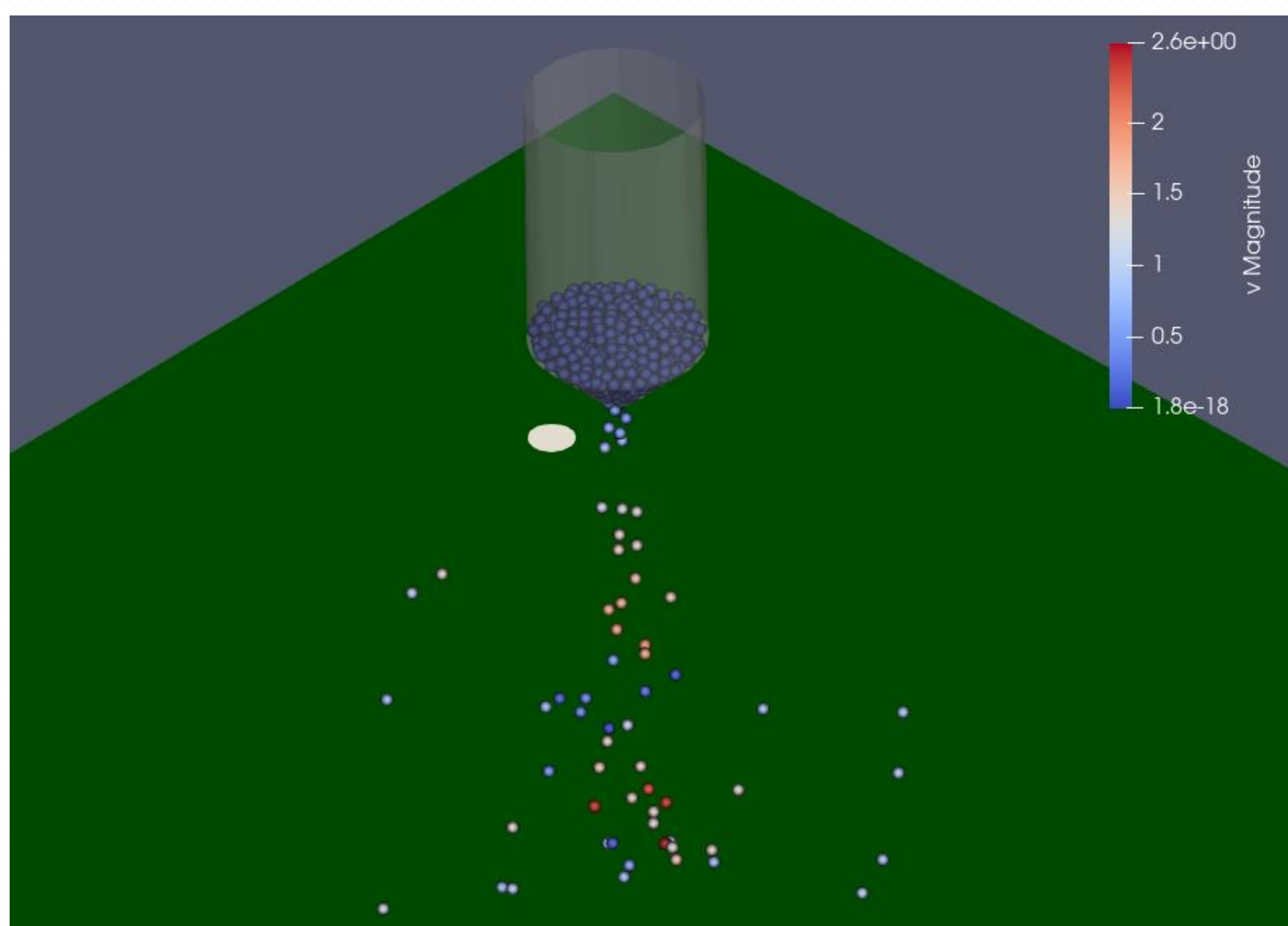


Figure 1. Banc de test utilisé pour les simulations.

Le grand apport que peut amener la simulation par rapport aux expérimentations est de pouvoir étudier l'effet de la variation de paramètres d'un produit difficile à mesurer et/ou qui ne sont pas modifiables.

Étude via la simulation par éléments discrets

La simulation par éléments discrets sera utilisée pour évaluer l'effet de certaines propriétés du matériel sur l'écoulement à l'aide de dix simulations. Les paramètres suivants (Fan et al., 2021) furent utilisés selon les échelles indiquées (voir tableau 1) :

- Cohésion (kJ/m^3) : 0 à 600 ;
- Densité (kg/m^2) : 910 à 1820 ;

- Diamètre des particules (m) : 0,006 à 0,007 ;
- Coefficient de Poisson : 0,3 à 0,5 ;
- Module de Young (GPa) : 1,5 à 3,0.

Selon les domaines présentés, le tableau 2 ci-dessous présente la matrice des 10 expériences qui ont été effectuées ainsi que les résultats de temps d'écoulement obtenus.

Tableau 1. Matrice de plan d'expériences.

	Cohésion (kJ/m^2)	Densité (kg/m^3)	Diamètre des particules (m)	Coefficient de poisson	Module de Young (GPa)	Temps d'écoulement (s)
1	0	1820	0,007	0,5	3,00E+00	2,5
2	200	910	0,006	0,5	3,00E+00	4,3
3	200	1820	0,007	0,3	1,50E+00	2,6
4	400	1820	0,006	0,5	1,50E+00	2,15
5	600	1820	0,006	0,3	3,00E+00	2,25
6	500	1200	0,0065	0,4	1,50E+00	3,6
7	300	1350	0,00675	0,35	3,00E+00	3,35
8	100	1600	0,00625	0,45	3,00E+00	2,55
9	450	1050	0,0065	0,4	1,50E+00	4,1
10	600	910	0,00625	0,4	1,50E+00	4,8

En effectuant une analyse de variance sur les tests effectués, il est possible d'obtenir les résultats du tableau 2. Après une analyse de données, il fut possible de constater que la densité du produit a un effet majeur sur le temps d'écoulement.

Tableau 2. ANOVA sur le temps d'écoulement.

Source	Degrés de liberté	Contribution
Régression	5	96,96%
Cohésion (kJ/m^2)	1	11,02%
Densité (kg/m^3)	1	83,97%
Diamètre des particules (m)	1	1,91%
Coefficient de poisson	1	0,01%
Module de Young (Pa)	1	0,06%
Erreur	4	3,04%
Total	9	100,00%

Où le R^2 de la régression obtenue est le suivant :

$$R^2 = 0,9696$$

La corrélation obtenue pour le système à l'étude est :

$$\begin{aligned} \text{Temps} = & 4,39 - 0,000277 \text{ Cohésion } (\text{kJ/m}^2) - 0,00237 \\ & \text{Densité } (\text{kg/m}^3) - 347 \text{ Diamètre des particules} \\ & (\text{m}) - 0,03 \text{ Coefficient de poisson} - 0,038 \\ & \text{Module de Young} \end{aligned}$$

La corrélation ne prend cependant pas compte le blocage de produits.

Afin de valider le résultat, une onzième simulation a été réalisée avec des points étant compris dans la marge étudiée, mais n'étant pas présent dans la matrice. Les paramètres considérés sont :

- Cohésion (kJ/m^3) : 350 ;
- Densité (kg/m^2) : 1450 ;
- Diamètre des particules (m) : 0,006125 ;
- Coefficient de Poisson : 0,42 ;
- Module de Young (GPa) : 2,0.

Le résultat est le suivant (voir tableau 3).

Tableau 3. Comparaison du modèle avec une mesure obtenue via les simulations.

Temps simulé (s)	Temps estimé par la formule (s)	Erreur (%)
2,8000	2,8933	3,333%

Conclusion

Les constats suivants ont été observés :

- *LIGGGHTS* est un outil à considérer pour les futures expériences.
- Les propriétés du matériel ont un effet important sur l'écoulement d'un produit granulaire.
- Le temps de calcul du logiciel est très long (de 6 à 65h par simulation effectuée).
- Il serait très difficile, voire impossible de simuler un paillis dû à la complexité de ses particules (multitudes de formes). Prochaine étape : Essai sur des multisphères dans des grappes de calculs.

Référence utilisée

Fan, J. C., Zhang, S. M., Yao, B. C., Hao, Y., Zhu, X. X., & Liu, X. W. (2021). Numerical simulation of the motion of polypropylene-particles in a horizontal straight pipe. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 88, Article 103854. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2021.103854>