

Modélisation d'écoulements granulaires réactionnels par la méthode des éléments discrets : application aux fours tournants

Jacques MORANDINI¹, Maxime PEYRARD¹, François NICOLAS², Stéphane HEBRARD³,
Eric TOUBOUL⁴, Michèle PIJOLAT⁵, Loïc FAVERGEON⁵, Michel SOUSTELLE⁵

¹ ASTEK Rhône-Alpes - 1 place du Verseau - 38130 Echirolles

² AREVA NC / BUchimie, BP 44 26701 Pierrelatte Cedex

³ AREVA NP – FBFC, Les Bérauds - BP. 114, 26104 Romans Cedex

⁴ 3MI, Ecole Nationale Supérieure des mines, 158 cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne

⁵ Centre SPIN, LPMG, Ecole Nationale Supérieure des mines, 158 cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne
jmorandini@astek.fr

Résumé :

Le traitement de poudres en four tournant met en oeuvre des phénomènes chimiques et mécaniques qui se caractérisent par une grande diversité d'échelles spatiales et temporelles dont la simulation est rendue délicate par la nécessité de concilier consistance du modèle et temps de calcul. Pour la modélisation du mouvement nous avons développé une méthode des éléments discrets fondée sur le modèle de Cundall et couplée à une représentation géométrique du four par éléments finis. La recherche des contacts est optimisée par l'emploi d'une triangulation de Delaunay ou d'un système de casiers.

Abstract :

The treatment of powders with rotary kiln technologies implements chemical and mechanical phenomena which are characterized by a great diversity of space and temporal scales. To carry out such simulations it is necessary to reconcile model consistency with computing time. For movement modeling we developed a Distinct Elements Method founded on the Cundall model and coupled to a geometrical representation of the furnace by finite elements. The contacts research is optimized by the use of a Delaunay triangulation or a racks system.

Mots-clefs : **Écoulement granulaire ; fours tournants ; éléments finis.**

1 Introduction

La simulation du comportement de fours tournants permettant le traitement chimique de milieux granulaires nécessite de considérer plusieurs échelles :

- A l'échelle microscopique du grain, la cinétique des réactions chimiques gouverne la croissance des germes. Cette cinétique est influencée par les conditions thermodynamiques locales. L'avancée de la réaction est généralement décrite par des fonctions du temps, solutions d'équations différentielles ordinaires.
- L'échelle mésoscopique du groupe de grains, est caractérisée par une unité des conditions thermodynamiques et chimiques. Cette échelle abrite une population de grains qui font l'objet de transformations chimiques qui collectivement perturbent les conditions thermodynamiques locales.
- L'échelle macroscopique, celle du réacteur, est caractérisée par une hétérogénéité des conditions thermodynamiques et chimiques. A cette échelle le milieu est le siège de

transferts de chaleur par conduction et par convection naturelle ou forcée, et de transferts de masse dus aux mouvements imposés par le brassage du milieu granulaire ou aux consommations et/ou productions de gaz dues aux réactions chimiques.

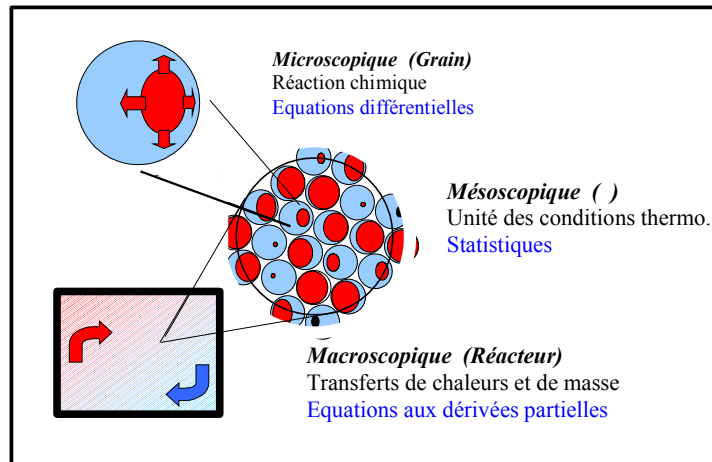


FIG. 1 – Les diverses échelles de modélisation.

2 Phénomènes physiques et modèles

Nous présentons ici les principaux éléments qui concernent la modélisation des cinétiques chimiques ainsi que la modélisation de la dynamique de la charge.

2.1 Les cinétiques chimiques

A l'échelle du grain, un solide A, constituant du grain, est transformé en un solide B, par une suite de réactions, dont l'une au moins est hétérogène. Cette transformation se déroule généralement en deux phases :

- La **germination** est le mécanisme qui aboutit à l'apparition sur le grain des premières molécules de B. Ce mécanisme semble aléatoire mais est cependant influencé par les conditions thermodynamiques locales. Il est caractérisé par la vitesse de germination γ qui s'exprime en nombre de germes par unité d'aire libre et par unité de temps.
- La **croissance** est la phase de la transformation qui voit croître le germe jusqu'à la transformation complète du grain si les conditions thermodynamiques et l'alimentation en réactants le permettent. Cette phase est caractérisée par le degré d'avancement β du grain (proportion de moles de A transformées en B) et la vitesse : $\frac{\partial \beta}{\partial t}$. La croissance peut être isotrope ou anisotrope selon que la vitesse de réaction est identique dans toutes les directions du grain ou non. La vitesse de réaction est généralement considérée comme séparable ce qui permet de l'écrire comme le produit de deux fonctions. La première dépend des conditions thermodynamiques, la seconde de la géométrie.

$$R = \frac{\partial \beta}{\partial t} = \phi(P_{(t)}, T_{(t)}) E(t)$$

A l'échelle mésoscopique on s'intéresse à un ensemble de grains qui ont été attaqués par la réaction à des dates (τ) diverses. L'enjeu est ici de suivre globalement la réaction sur la population locale. Celle-ci est caractérisée essentiellement par sa position dans l'espace dont

dépendent les conditions thermodynamiques. L'avancée globale de la réaction à l'échelle mésoscopique vaut :

$$\alpha(t) = \frac{n_0}{N_0} \int_0^t \gamma(\tau) SL(\tau) \beta(\tau, t) d\tau$$

$SL(\tau)$ représente la surface des grains non germés à l'instant τ , n_0 et N_0 représentent respectivement le nombre initial de moles de A dans un grain et dans la poudre. Nous avons entrepris ces modélisations de cinétiques chimiques à l'aide du logiciel Flux-Expert.

2.2 La dynamique du milieu granulaire

Diverses méthodes sont utilisées pour simuler le comportement d'un milieu granulaire en mouvement. Certaines considèrent les grains comme des objets indéformables. La résolution transitoire s'effectue alors à la cadence des collisions : le pas de temps variable prend pour valeur l'intervalle qui sépare deux chocs dans le milieu et les variables d'état d'un couple de grain après sa collision sont calculées à partir de leurs valeurs avant la collision. La phase de collision n'est pas simulée. D'autres méthodes considèrent les particules comme déformables. Elles autorisent alors les grains à se chevaucher légèrement sans que leur forme naturelle ne change, alors que dans la nature les grains se déforment lors du contact mais la pénétration est nulle. Les efforts qu'ils échangent à cette occasion sont proportionnels au chevauchement. Le contact entre deux grains se déroule durant plusieurs pas de temps (idéalement entre 20 et 100). Cette dernière méthode, appelée aussi Distinct Element Method (DEM), est mieux adaptée aux milieux denses. C'est pourquoi nous l'avons choisi pour la modélisation du mouvement de la charge du four tournant. Selon la dimension de l'espace les grains sont considérés ici comme des disques ou des sphères. La méthode est basée sur un algorithme transitoire à pas de temps fixe. Lors de chaque itération on étudie le contact de chaque grain avec son entourage. Ces contacts permettent de modéliser les efforts qu'il reçoit de son environnement. La figure 2 montre en 2D comme en 3D les grandeurs qui interviennent alors.

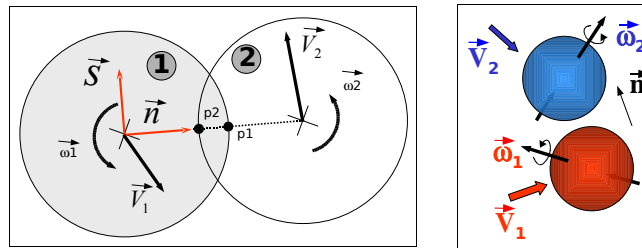


FIG. 2 – Le contact entre deux grains

Avec les vitesses de translation et de rotation des grains on calcule la vitesse du point p_1 relativement au point p_2 :

$$\vec{v} = (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) + (\vec{\omega}_1 R_1 + \vec{\omega}_2 R_2) \times \vec{n}$$

On en détermine les composantes normales et tangentielles ainsi que la valeur de la pénétration :

$$\begin{aligned} v_N &= \vec{v} \cdot \vec{n} & \delta_N &= v_N \Delta t \\ \vec{v}_S &= \vec{v} - v_N \vec{n} & \vec{\delta}_S &= \vec{v}_S \Delta t \end{aligned}$$

On estime ensuite, conformément au modèle de Cundall et Strack (1979), l'incrément d'effort entre les deux grains :

$$\begin{aligned} \delta F_N &= k_N \delta_N + c_N v_N \\ \delta \vec{F}_S &= k_S \vec{\delta}_S + c_S \vec{v}_S \end{aligned}$$

Les paramètres k_N , c_N , k_S , c_S représentent respectivement les coefficients d'élasticité et d'amortissement normal et tangentiel qui figurent dans le modèle de Cundall schématisé sur la figure 3. Les incréments ainsi évalués permettent de mettre à jour les efforts à l'instant courant

compte tenu de l'histoire du contact depuis son origine. On utilise enfin un modèle de frottement de Coulomb qui limite les efforts de cisaillement $|\vec{F}_S| < \mu |\vec{F}_N|$.

Un grain entretient des contacts avec plusieurs de ses voisins. L'effort résultant est alors caractérisé par la force et le moment :

$$\sum_i \vec{F}^i = \sum_i (\vec{F}_S^i + F_N^i \vec{n}^i)$$

$$\sum_i \vec{M}^i = \sum_i R \vec{F}_S^i$$

Lorsque l'évaluation des efforts reçus par chaque grain est achevée, il reste à déterminer son mouvement. Celui-ci est gouverné par le système différentiel issu du principe fondamental.

$$m \ddot{\vec{x}} + C \dot{\vec{x}} = m \vec{g} + \sum_i \vec{F}^i = \vec{F}$$

$$J \ddot{\vec{\omega}} + C^* \dot{\vec{\omega}} = \sum_i \vec{M}^i = \vec{M}$$

m et J désignent respectivement la masse et le moment d'inertie des grains. Ce système différentiel est résolu par la méthode de Verlet. Les vitesses sont calculées aux instants intermédiaires d'indices non entiers :

$$\dot{\vec{x}}_{k+1/2} = \frac{\frac{\Delta t \vec{F}}{m} + (1 - \frac{C \Delta t}{2m}) \dot{\vec{x}}_{k-1/2}}{1 + \frac{C \Delta t}{2m}} + o(\Delta t) \quad \dot{\vec{\omega}}_{k+1/2} = \frac{\frac{\Delta t \vec{M}}{J} + (1 - \frac{C^* \Delta t}{2J}) \dot{\vec{\omega}}_{k-1/2}}{1 + \frac{C^* \Delta t}{2J}} + o(\Delta t)$$

Les positions sont calculées aux instants d'indices entiers par la formule :

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \Delta t \dot{\vec{x}}_k + o(\Delta t^2)$$

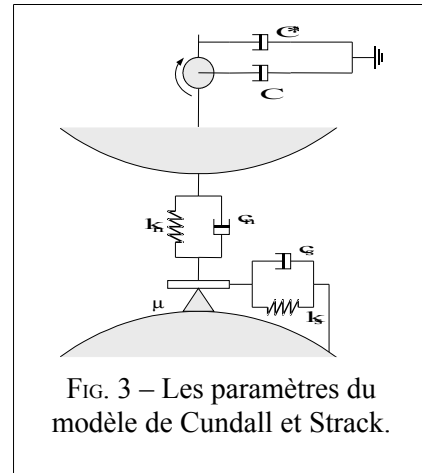


FIG. 3 – Les paramètres du modèle de Cundall et Strack.

Durant son cheminement le grain entre en contact avec la paroi du four tournant. Elle peut prendre diverses formes et posséder des adaptations permettant de relever la poudre, nous avons donc choisi de la représenter par un maillage éléments finis. En plus des contacts entre grains il devient alors nécessaire d'étudier le contact entre les grains et la paroi. Pour ce faire, après qu'un contact potentiel ait été détecté entre un grain et un élément de la paroi, son barycentre est localisé dans l'élément.

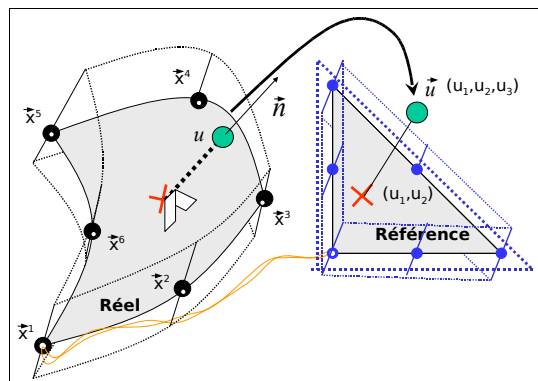


FIG. 4 – Localisation d'un grain vis-à-vis d'un élément de la paroi du four.

On est ainsi conduit, comme l'illustre la figure 4, à rechercher dans l'élément de référence, les coordonnées réduites \vec{u} du barycentre \vec{x} . L'élément de référence, surfacique est complété par une troisième dimension qui correspond dans l'espace réel à la direction normale. Les coordonnées réduites sont solution du système généralement non linéaire suivant :

$$\sum_{n=1}^{\text{NBN}} \alpha_n(\vec{u}) \vec{x}^n = \vec{x}$$

La troisième des coordonnées obtenues représente la distance du centre du grain à l'élément. Elle est utilisée pour déterminer s'il y a contact ou non.

La recherche des contacts potentiels entre grains constitue une étape déterminante de l'algorithme esquissé ci-dessus. Deux grains sont en contacts si la somme de leur rayon est supérieure à la distance qui sépare leur centre de gravité. Pour limiter le temps de calcul, il est important de réserver ce test aux couples de grains voisins. Pour ce faire Müller (1996) a proposé en 2D de réaliser une triangulation de Delaunay de l'ensemble des barycentres de grains. Il est ensuite aisé en utilisant les arêtes de trouver rapidement la liste des grains en contact potentiel avec un grain donné. Il est difficile cependant de tenir à jour cette triangulation de Delaunay au cours du temps. Pourtant une triangulation continue à bien décrire les voisinages durant de nombreuses itérations après sa construction. Il semble ainsi préférable de construire une nouvelle triangulation à fréquence régulière (tous les 200 à 500 pas de temps) sans chercher à la maintenir de Delaunay. En 3D, Ferrez (2001) utilise une tétraédrisation de Delaunay pour résoudre ce problème de voisinage. Nous avons mis en place un algorithme rapide basé sur un système de casiers pour résoudre le même problème. A fréquence régulière (200 à 500 pas de temps) nous recherchons la boîte englobant l'ensemble des grains et la découpons de manière régulière en un ensemble de casiers parallélépipédiques de tailles judicieusement choisies. Nous affectons ensuite chaque grain, selon sa position, à l'un de ces casiers. Rechercher les contacts potentiels d'un grain revient ainsi à dresser la liste des grains observés dans son casier et dans les casiers adjacents. Les noeuds de discrétisation de la paroi du four sont également placés dans ce système de casiers. Cette méthode permet donc de déterminer quels sont les éléments de la paroi avec lesquels un grain peut entrer en contact.

3 Résultats

Les figures 5 et 6 montrent les premiers résultats obtenus lors de simulations d'écoulements granulaires de fours tournants 2D et 3D. Sur la figure 5 il apparaît que la triangulation de Delaunay est une méthode de recherche de voisinages efficace au coeur de l'écoulement. Elle l'est moins là où le milieu est peu dense, en périphérie par exemple, puisqu'elle invite alors à étudier l'interaction entre grains parfois très éloignés. La figure 6 montre plusieurs vues de l'écoulement d'un ensemble de 2500 grains. Initialement disposés selon une grille régulière, ils s'accumulent ensuite en un amas informe dans la partie inférieure du four. Cet amas est emporté par la rotation du four jusqu'à ce qu'il s'effondre en une avalanche permanente.

4 Conclusion

La simulation précise de l'écoulement de milieux granulaires réactionnels nécessite des temps de calculs importants. Ils sont dus à la modélisation des cinétiques de réaction dans la poudre mais aussi et surtout à la modélisation du mouvement de celle-ci. Les temps caractéristiques de ces deux phénomènes posent problème : quelques minutes pour les cinétiques et quelques microsecondes pour le mouvement des grains. Pour optimiser la simulation du mouvement nous avons développé une méthode simple et efficace qui permet à la fois d'étudier le voisinage des grains entre eux et avec la paroi du four pour laquelle nous avons choisi une représentation par éléments finis. Un calage du modèle doit être prévu pour obtenir les valeurs des coefficients du modèle de Cundall qui permettent de représenter au mieux l'écoulement de poudres industrielles.

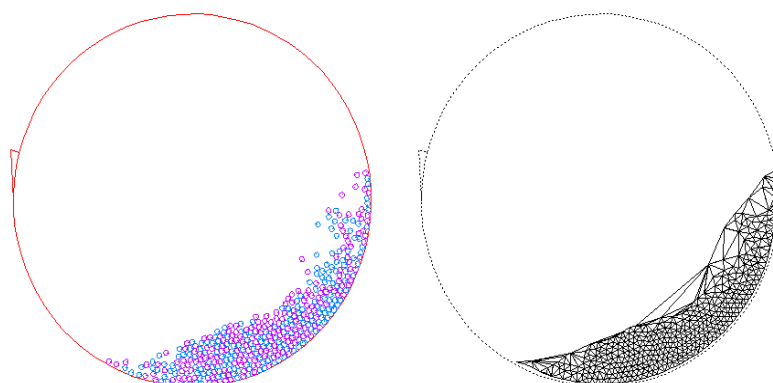


FIG. 5 – Ensemble de 400 grains en mouvement et triangulation de Delaunay associée.

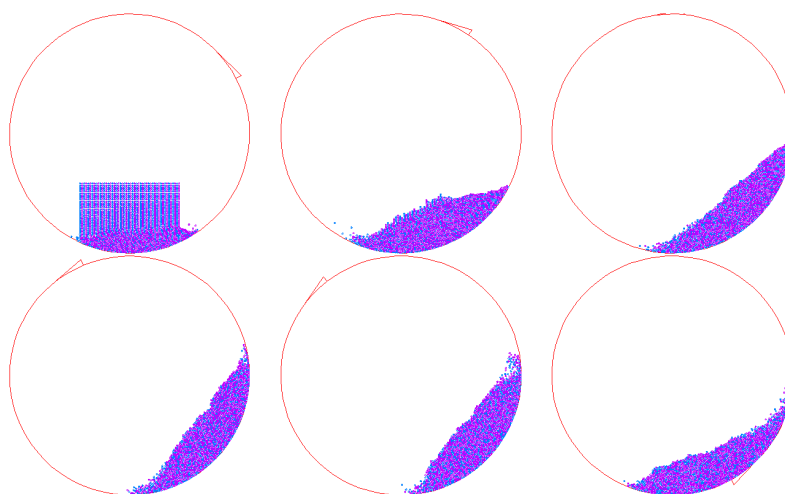


FIG. 6 – Quelques vues d'un écoulement 2D de 2500 grains dans un four cylindrique.

Références

- Cundall, P. A. 1988. Formulation of a three-dimensional distinct-element model — Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.*, 25(3).
- Cundall, P. A. and Strack, O. D. L. 1979. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1).
- Ferrez, J.-A., 2001. Dynamic triangulations for efficient 3D simulation of granular materials. Thèse N° 2432, EPFL
- Flux-Expert®, Astek Rhône-Alpes, 1 place du Verseau, 38130 Echirolles, France, flux-expert@astek.fr
- Müller, D. 1996. Techniques informatiques efficaces pour la simulation de milieux granulaires par des méthodes d'éléments distincts. Thèse N° 1545, EPFL
- Michèle Pijolat, Stéphane Perrin, F. Valdivieso, Eric Touboul, M. Soustelle et Kaïs Nahdi. Modélisation cinétique non isotherme de la deshydrocylation de la kaolinite. Récents progrès en Génie des Procédés. Actes d'un congrès Sciences et technologie des poudres, mai 2004 à Compiègne.