



Université du Québec  
à Rimouski

**Projet**

**Modélisation d'écoulement granulaire de particules de polyéthylène**

Par

© **Maxime Montmagny**

**Présenté à**

M. Abderrazak El Ouafi

**Rapport présenté**

dans le cadre du cours de Planification d'expérience pour l'analyse et l'optimisation des produits  
et des procédés (ING70915)

**22 avril 2023**

## Table des matières

Mise en situation .....	3
Présentation des catégories d'expériences réalisées .....	3
Étude de régularité des particules de polyéthylène.....	4
Présentation du montage expérimental .....	5
Étude expérimentale.....	7
Présentation du logiciel de simulation .....	9
Présentation des expériences réalisées avec la simulation.....	11
Conclusion .....	13
ANNEXE A : Entrées du logiciel LIGGGHTS .....	14
Références.....	21

## **Table des figures**

Figure 1. Exemple de particule à l'étude .....	3
Figure 2. Montage expérimental. ....	6
Figure 3. Partie conique du banc de tests en vue de coupe. ....	7
Figure 4. Visualisation de la simulation par éléments discrets à partir de PARAVIEW.....	10

## **Table des tableaux**

Tableau 1. Dimensions de 30 particules prises au hasard.....	4
Tableau 2. Prises de mesures avec un chronomètre.....	7
Tableau 3. Analyse de variance des données de la prise de mesure par chronomètre.....	8
Tableau 4. Expérimentations à quatre niveaux. ....	11
Tableau 5. Analyse de variance des paramètres à l'étude sur le temps d'écoulement. ....	12

## Mise en situation

Le marché des ensacheuses industrielles pour les produits comme les mélanges de terreaux et de paillis est très compétitif. Ces types de produits ne sont pas très coûteux au volume si on les compare aux autres produits granulaires (comme ceux des marchés agroalimentaires). Les machines d'ensachage de ces produits doivent donc être peu coûteuses, rapides et très fiables, ce qui impacte directement leur développement technologique. Le produit le plus complexe à ensacher étant le paillis, Premier Tech désire approfondir ses connaissances scientifiques sur ce dernier afin de trouver des solutions permettant de faire passer la vitesse de dosage pour des sacs de 2 m<sup>3</sup> de 22 à 28 sacs/min (Côté et al., 2022).

Afin d'optimiser le système, il est d'abord important de pouvoir prédire le comportement d'un produit à l'aide d'un modèle. Les méthodes de test envisagées pour modéliser l'écoulement de ce type de produit sont via la simulation par éléments discrets et les expérimentations. Avant de plonger dans les expérimentations avec les différents types de paillis, il est essentiel d'effectuer une première étude exploratoire. Le but est d'explorer l'apport et les limites que peuvent amener ces deux méthodes à la future recherche selon deux tests différents effectués sur des particules de polyéthylène (voir à la figure 1).



*Figure 1. Exemple de particule à l'étude*

## Présentation des catégories d'expériences réalisées

Ce rapport sera divisé en deux grandes parties. La première partie présentera une étude expérimentale ayant comme but d'évaluer la corrélation entre la vitesse d'écoulement et la masse de matériel ajoutée. Cette partie aura comme utilité de vérifier si avec une simple mesure de quantité massique de matériel ajoutée (selon un modèle précis), il est possible de prédire le temps d'écoulement. La seconde partie étudiera l'effet des paramètres du matériel (cohésion, densité, diamètre des particules, coefficient de poisson et module de Young) sur l'écoulement. Cette partie aura comme utilité d'évaluer l'importance de ces paramètres sur l'écoulement d'un produit.

Un objectif secondaire de ce projet sera aussi d'évaluer l'importance de la simulation pour les études à venir. Étant donné que certaines propriétés d'un produit peuvent être complexes à mesurer

de façon expérimentale (par exemple pour le module de Young et le coefficient de poisson), la simulation pourrait être un outil intéressant pour remédier à ceci lors des recherches.

### **Étude de régularité des particules de polyéthylène**

Avant de réaliser les expériences, les particules à l'étude ont été évaluées afin d'étudier la régularité de leurs dimensions. Il est possible de constater qu'elles ne sont pas tout à fait sphériques, leur rayon est plus grand que leur épaisseur.

En prenant les dimensions de 30 particules au hasard, il est possible d'obtenir les rayons et les épaisseurs vues au tableau 1 ci-dessous.

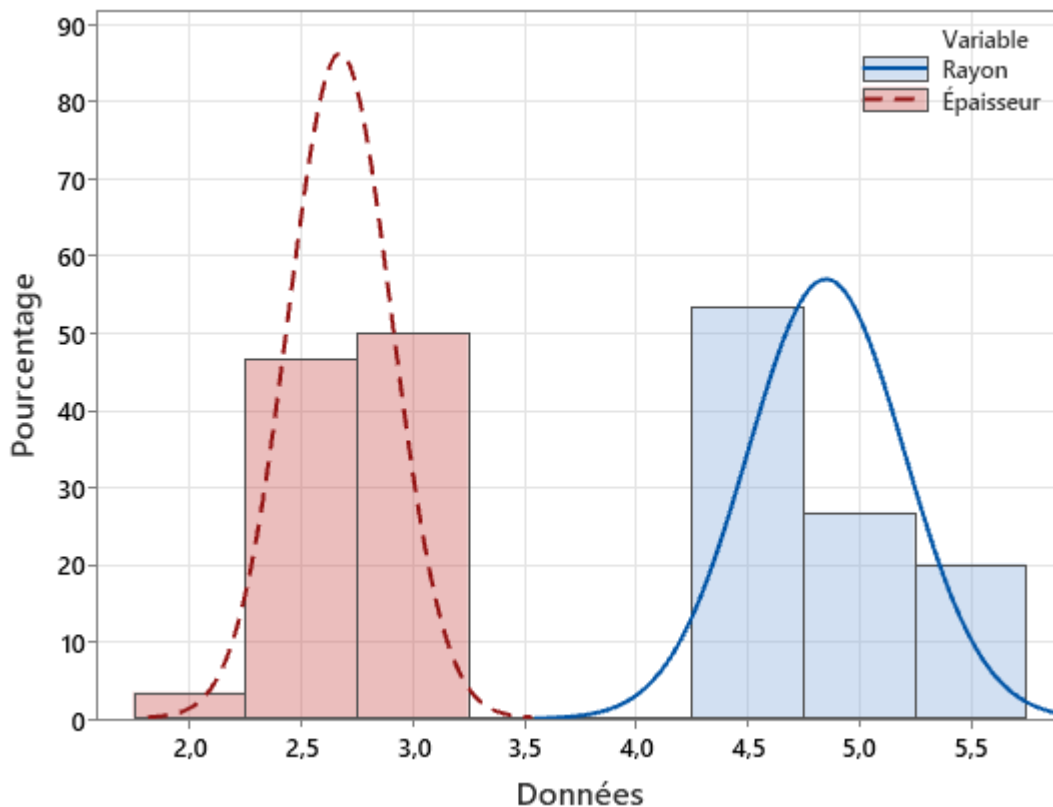
*Tableau 1. Dimensions de 30 particules prises au hasard.*

Rayon (mm)	Épaisseur (mm)
4,44	2,85
5,38	2,45
4,70	2,86
5,27	2,46
4,54	2,58
4,51	2,36
4,56	2,75
4,60	3,04
4,59	2,50
4,44	2,36
5,13	2,51
4,83	2,98
5,64	2,74
5,3	2,8
4,64	2,32
5,2	2,52
4,54	2,51
5,22	2,74
4,52	2,89
4,75	2,93
4,63	3
4,54	2,77
4,53	2,64
5,25	2,75
4,9	2,22
5,31	2,36

5,1	2,92
4,54	2,96
4,69	2,75
5,16	2,76

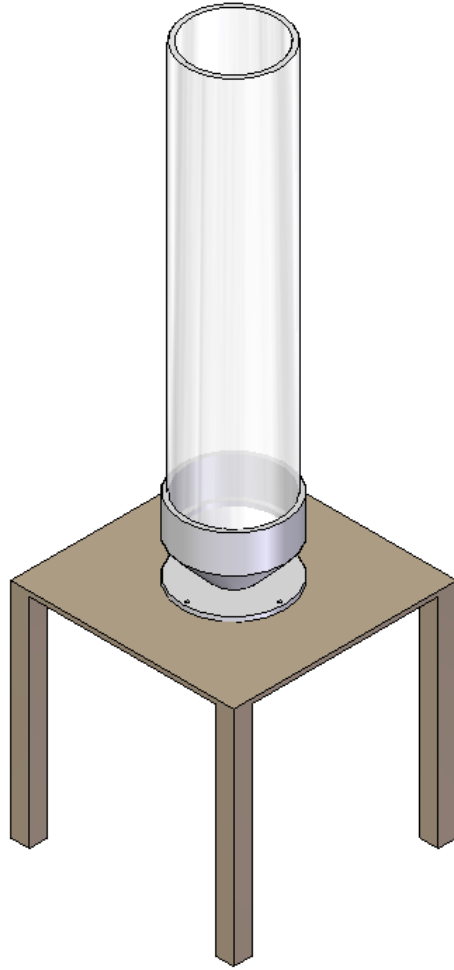
Lorsqu'on regarde la distribution des dimensions (graphique 1 ci-dessous), il est possible de voir une forte ressemblance au niveau des dimensions. Il sera ainsi possible d'émettre comme hypothèse lors des simulations (puisque les particules ont des rayons et des épaisseurs fortement similaires) que leurs dimensions de rayon et d'épaisseur sont identiques.

*Graphique 1. Distribution des dimensions de rayon et d'épaisseur des particules à l'étude.*



### **Présentation du montage expérimental**

Tout d'abord, pour la partie expérimentale, un banc de test fut conçu afin d'effectuer les prises de données nécessaires (voir figure 2).



*Figure 2. Montage expérimental.*

Le but de la conception était de reproduire le phénomène d'écoulement présent dans un silo. Ainsi, la forme du montage est de forme cylindrique avec un embout en son bas étant conique. Sa sortie présente une trappe afin de pouvoir déclencher l'écoulement lorsque désirée (voir figure 3). Les expériences seront donc effectuées à partir d'un embout fermé lorsque le matériel y sera présent. L'ouverture sera effectuée lors des prises de mesure.

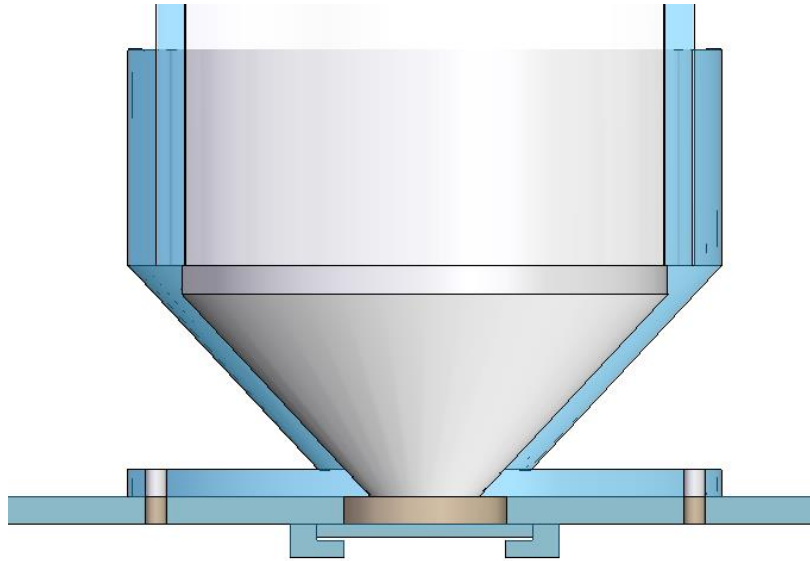


Figure 3. Partie conique du banc de tests en vue de coupe.

### Étude expérimentale

Pour ce qui est des expériences basées sur le montage expérimental, la principale donnée facilement mesurable est la masse de matériel initiale et le temps d'écoulement total. Ainsi, une expérience a été effectuée en étudiant la relation entre le temps d'écoulement total des particules de polyéthylène et la masse de matériel initiale.

D'abord, 16 mesures ont été effectuées avec un chronomètre lors d'écoulements de masses variables. Le tableau 2 ci-dessous présente les résultats.

Tableau 2. Prises de mesures avec un chronomètre.

Masse (kg)	Temps d'écoulement mesuré (s)
0	0
0,238	3,87
0,224	3,65
0,505	8,28
0,736	12,41
0,98	16,63
1,175	20,03
1,662	28,21
2,2	37,73
0,83	14,05
1,446	24,72
1,036	17,6



0,486	8,12
0,375	6,17
1,453	25,12
1,203	20,45

En étudiant les données à l'aide du logiciel *Minitab*, il est possible d'effectuer une analyse de variance (voir tableau 3).

*Tableau 3. Analyse de variance des données de la prise de mesure par chronomètre.*

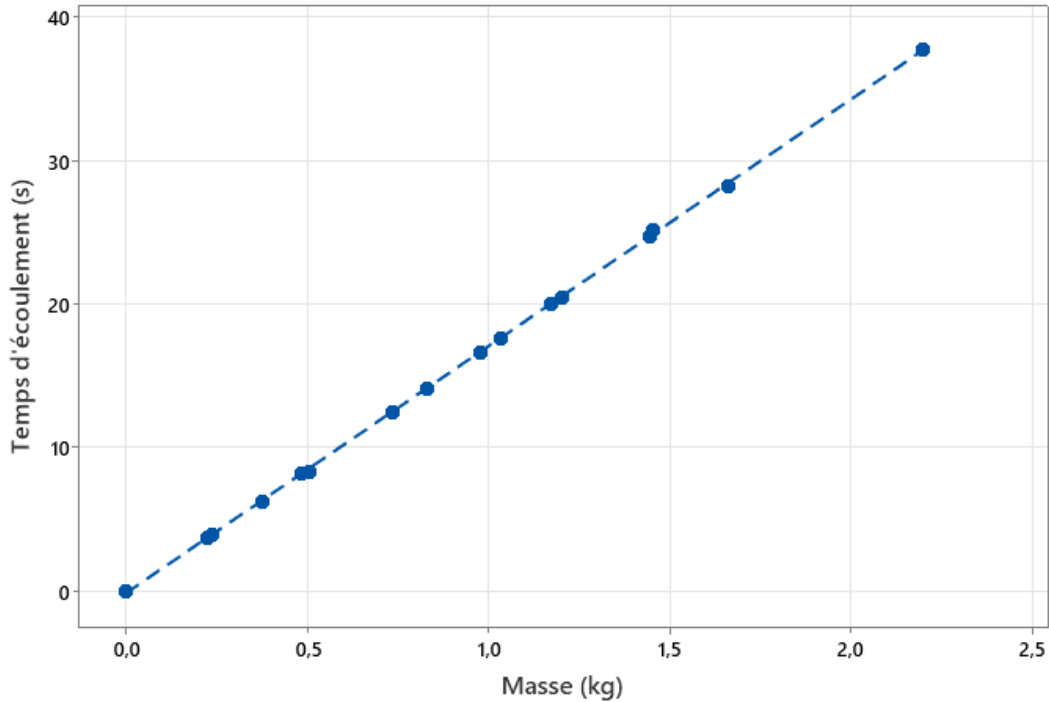
<b>Source</b>	<b>Degrés de liberté</b>	<b>Variance</b>	<b>Contribution</b>	<b>Valeur F</b>
Régression	1	1604,9	99,98%	93017,83
Masse	1	1604,9	99,98%	93017,83
Erreur	14	0,24	0,02%	
<b>Total</b>	<b>15</b>	<b>1605,14</b>	<b>100%</b>	

Il est possible de constater un  $R^2$  très élevé présentant une corrélation directe entre les deux variables.

$$R^2 = \frac{1604.90}{1605.14} = 0.9998$$

Il est alors possible de constater que pour un matériau très simple ne présentant aucune cohésion (ou autres phénomène complexe), une corrélation linéaire entre la masse ajoutée et son temps d'écoulement est présente (voir le graphique 2 ci-dessous).

Graphique 2. Corrélation linéaire du temps d'écoulement en fonction de la masse de matériel ajouté pour les mesures avec le chronomètre.



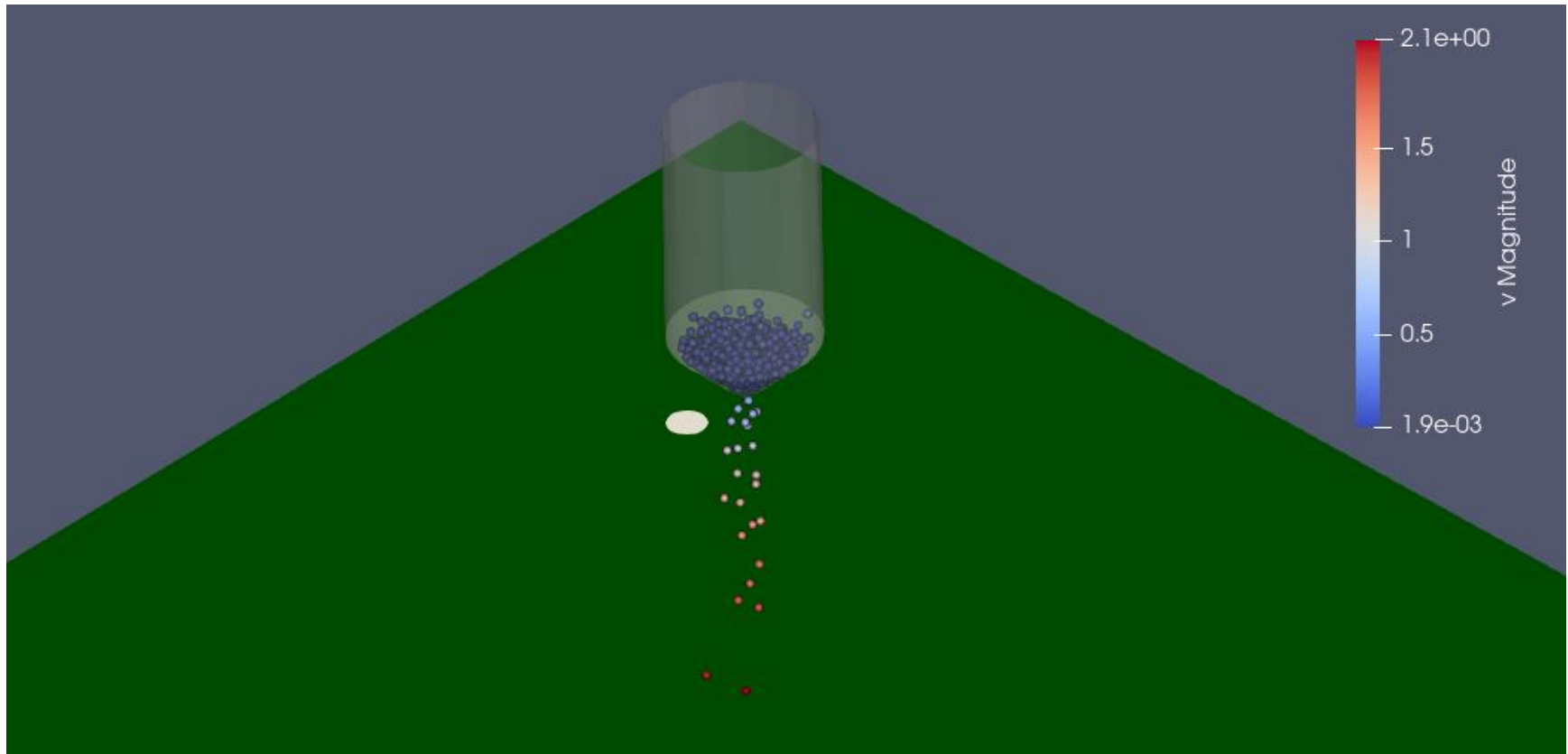
Il est donc possible de conclure cette première étude avec l'équation ci-dessous permettant de prédire le temps d'écoulement total (en seconde) en fonction de la masse ajoutée (en kilogramme) pour le modèle étudié.

$$\text{Temps d'écoulement total} = -0.2281 + 17.2307 * \text{Masse ajoutée}$$

### Présentation du logiciel de simulation

Afin d'étudier l'effet des paramètres du matériel sur l'écoulement via la méthode par simulation par éléments discrets, le logiciel libre d'accès *LIGGGHTS* sera utilisé. Le terme *LIGGGHTS* veut dire *LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations* (Kloss et al., 2023), où *LAMMPS* veut dire *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (S. et al., 2023). En résumé, il s'agit d'un logiciel utile à la simulation du comportement d'atomes ou de molécules dans un quelconque système. Celui-ci fonctionne à partir de *LINUX* et est commandé à partir d'interfaces telles que *WINDOWS POWERSHELL*.

À partir d'un fichier de l'entrée des paramètres de simulation choisis (voir Annexe A) ainsi que de fichiers STL modélisant le système à l'étude, il est possible d'effectuer une simulation et d'obtenir des fichiers de résultats de simulation. Ceux-ci peuvent être lus avec plusieurs logiciels de visualisation 3D, par exemple *PARAVIEW* (voir figure 4).



*Figure 4. Visualisation de la simulation par éléments discrets à partir de PARAVIEW.*

## Présentation des expériences réalisées avec la simulation

Dans le cadre de cette analyse, les cinq paramètres ci-dessous seront étudiés selon les bornes de variation indiquées :

- Cohésion ( $\text{kJ/m}^2$ ) — 0 à 600 ;
- Densité ( $\text{kg/m}^3$ ) — 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.

Chaque expérience a été réalisée avec la même masse de matériel initial (soit de 0.25 kg) afin de pouvoir bien comparer chaque écoulement.

Selon ceux-ci, les expérimentations présentes au tableau 4 ont été effectuées, où le temps d'écoulement est la sortie étudiée.

*Tableau 4. Expérimentations à quatre niveaux.*

	Cohésion ( $\text{kJ/m}^2$ )	Densité ( $\text{kg/m}^3$ )	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

Il est à noter que pour des fins de temps de calcul, le modèle de silo à l'étude fut légèrement réduit en taille. Les résultats en sortie (temps d'écoulement) ne seront donc pas comparables à ceux de la section expérimentale précédente, mais l'observation de l'effet des facteurs physiques est tout autant valide.

Tout d'abord, en effectuant une analyse de la variance du temps d'écoulement en fonction des différents paramètres, il est possible d'obtenir les résultats vus au tableau 5 ci-dessous.

Tableau 5. Analyse de variance des paramètres à l'étude sur le temps d'écoulement.

Source	Degrés de liberté	Variance	Contribution	Valeur F
Régression	5	7,79183	96,96%	25,53
Cohésion (kJ/m <sup>2</sup> )	1	0,88596	11,02%	0,11
Densité (kg/m <sup>3</sup> )	1	6,74764	83,97%	98,26
Diamètre des particules (m)	1	0,15314	1,91%	0,98
Coefficient de poisson	1	0,00064	0,01%	0
Module de Young (Pa)	1	0,00445	0,06%	0,07
Erreur	4	0,24417	3,04%	
Total	9	8,036	100,00%	

Selon les résultats, il est possible d'observer un R<sup>2</sup> de 96.96%.

$$R^2 = \frac{7.79183}{8.036} = 0.9696$$

Il est donc possible de déterminer l'équation ci-dessous permettant de prédire le temps d'écoulement total (en seconde) en fonction des propriétés du matériel étudiées pour une masse de produit de 0.25 kg.

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

Il est cependant à noter que la formule présente ne prend pas en compte le blocage du produit. Il s'agit d'un élément complexe à simuler via la méthode par éléments finis puisqu'il crée toujours le même comportement lorsque les variables sont fixées (n'étant pas comme ça dans la réalité).

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<sup>2</sup>) — 350 ;
- Densité (kg/m<sup>3</sup>) — 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 5).

Tableau 6. 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%

La formule peut ainsi être jugée fiable pour les conditions définies dans l'étude.

## Conclusion

Pour conclure, ces deux analyses ont permis de réaliser les constats suivants :

- *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.
- Il est possible de modéliser l'écoulement de particules de polyéthylène à l'aide de mesures simples.
- 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.

Sur la même voie que l'étude présentée dans ce rapport, des tests de modélisations de particules non sphériques seront effectués dans le futur afin d'avoir une meilleure idée sur la démarche future à entreprendre.

## **ANNEXE A : Entrées du logiciel LIGGGHTS**

```
##Header for General commands##  
atom_style granular #Simulation of particles  
boundary f f f #fixed boundaries -> particles will be deleted if leaving the  
simulation box  
units si  
communicate single vel yes #default  
newton off #default  
hard_particles yes
```

```
##System variables##
```

```
#Definition of boundaries
```

```
variable xmin equal -2.55
```

```
variable xmax equal 2.55
```

```
variable ymin equal -2.55
```

```
variable ymax equal 2.55
```

```
variable zmin equal -0.05
```

```
variable zmax equal 5.0
```

```
#Definition of the timestep
```

```
variable dt equal 1e-5 #timestep = 0.00001 second; Each iteration step represents  
0.00001 seconds.
```

```
##Specific variables for current simulation##
```

```
variable natoms equal 2 #1 -> particle #2->hopper,frame and ground, lid
```

```
#####variable for material properties#####
```

```
#####Young Modulus#####
```

```
variable youngmodulus1 equal 1.5e9 #N/mm2
```



variable youngmodulus2 equal 3.5e9 #N/mm<sup>2</sup> — PLA

#####Poisson ratio#####

variable poisson1 equal 0.3

variable poisson2 equal 0.33

#####variable for contact properties#####

#####coefficient of restitution#####

variable CoR11 equal 0.49

variable CoR12 equal 0.64

variable CoR21 equal 0.64

variable CoR22 equal 0.64

#####sliding friction coefficient#####

variable sf11 equal 0.05

variable sf12 equal 0.01

variable sf21 equal 0.01

variable sf22 equal 0.01

#####rolling friction coefficient#####

variable rf11 equal 0.153

variable rf12 equal 0.128

variable rf21 equal 0.128

variable rf22 equal 0.128

#####variable for particle#####

#Number of particle radius

variable nradii equal 1

```
variable    radius1equal 0.003 #m
variable    frac1    equal 1.0
variable    densityequal 910  #kg/m3
```

### ##filling parameters##

```
variable    filltimeequal 0.2      #seconds
variable    fillmass    equal 0.1   #kg
variable    fillmassrate equal ${fillmass}/${filltime} #kg/s
variable    fillsteps   equal  ${filltime}/${dt}      #Transform time to iteration
steps
```

### ##settle time##

```
variable    settletime  equal 0.25 #second
variable    settlesteps equal  ${settletime}/${dt}    #Transform time to iteration
steps
```

### ##open parameter of the lid##

```
variable    openvel      equal 0.2   #m/s
variable    opentime     equal 0.25 #second
variable    opensteps    equal  ${opentime}/${dt}    #Transform time to iteration
steps
```

### ##discharge time##

```
variable    dischargetime equal 10 #seconds
variable    dischargesteps equal  ${dischargetime}/${dt}  #Transform time to iteration
steps
```

### ##Definition of simulationbox##

```
region      reg block ${xmin} ${xmax} ${ymin} ${ymax} ${zmin} ${zmax} units box
create_box  2 reg
```

```

neighbor      0.004 bin          #default
neigh_modify delay 0          #default

###Definition of the contact models###

pair_style gran model hertz tangential history rolling_friction epsd2      #contact model -
NoCohesion

pair_coeff    * *              #default

timestep ${dt}

fix          integrator all nve/sphere          #default

fix          gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0          #gravity of 9.81 m/s2 in
negative z direction

###Definition of Material properties###

fix          m1 all property/global youngsModulus peratomtype ${youngmodulus1}
${youngmodulus2}

fix          m2 all property/global poissonsRatio peratomtype ${poission1} ${poission2}

fix          m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair ${natoms}
${CoR11} ${CoR12} ${CoR21} ${CoR22}

fix          m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair ${natoms} ${sf11}
${sf12} ${sf21} ${sf22}

fix          m5 all property/global coefficientRollingFriction peratomtypepair ${natoms}
${rf11} ${rf12} ${rf21} ${rf22}

###Generation and Loading of the Geometry .stl###

fix          tube all mesh/surface file Tube.stl      type 2 scale 0.001
          #load mesh from STL file. Type 2 for geometry. Scale down to transform mm to meters

fix          door all mesh/surface file Door.stl      type 2 scale 0.001

fix          floor all mesh/surface file Floor.stl      type 2 scale 0.001

fix          walls all wall/gran model hertz tangential history rolling_friction epsd2 mesh
n_meshes 3 meshes tube door floor

```

##Generation and Insertion of the particles##

```
fix      pts1 all particletemplate/sphere 10487 atom_type 1 density constant ${density}
radius constant ${radius1}

fix      pdd1 all particledistribution/discrete 32452867 ${nradii} pts1 ${frac1}

fix      ins_mesh all mesh/surface/planar file Insertionface.stl type 1 scale 0.001

fix      ins all insert/stream seed 86028157 distributiontemplate pdd1 &
      mass ${fillmass} massrate ${fillmassrate} overlapcheck yes all_in yes vel constant 0 0 -0.1
&
      insertion_face ins_mesh extrude_length 0.25
```

##Dumping of the data for post-processing to visualize##

```
shell  mkdir post
```

#Definition of the dumptime

```
variable dumptime equal 0.05      # Every 0.05 s 1 image
variable dumpstep equal ${dumptime}/${dt}      #Transform to iteration steps
```

```
dump  dmpparticle all custom/vtk ${dumpstep} post/particles_*.vtk id type x y z vx vy vz fx fy
fz radius mass
```

```
dump  dmptube all mesh/stl ${dumpstep} post/Tube_*.stl tube
```

```
dump  dmpdoor all mesh/stl ${dumpstep} post/Door_*.stl door
```

```
dump  dmpfloor all mesh/stl ${dumpstep} post/Floor_*.stl floor
```

##RUN the simulation filling##

```
run    ${fillsteps}
```

```
unfix  ins
```

##RUN the simulation settling##

```
run    ${settlesteps}
```

```
##RUN the simulation Open Door##
```

```
fix          MoveDoor    all move/mesh mesh door    linear ${openvel} 0. 0.
```

```
run    ${opensteps}
```

```
unfix  MoveDoor
```

```
##RUN the simulation Outflow##
```

```
run    ${dischargesteps}##Header for General commands##
```

## Références

- Boudoire, F. (2011). Optimisation de l'écoulement granulaire dans une machine de pesage et d'ensachage de matériau en vrac à alimentation gravitaire [Mémoire de maîtrise, Université du Québec à Rimouski].
- Côté, J., Cyr-Cormier, L., Darisse, A., & Lessard, G. (2022). *Optimisation de systèmes d'ensachage à haute vitesse pour le paillis* [Description de projet].
- Degouet, C. (2005). Caractérisation de matériaux granulaires et de leurs écoulements dans les silos verticaux [Thèse de doctorat, Université du Bretagne Occidentale Brest].
- Gaudel, N., de Richter, S. K., Louvet, N., Jenny, M., & Skali-Lami, S. (2016). Granular avalanches down inclined and vibrated planes. *Physical Review E*, 94(3), Article 032904. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.032904>
- Kloss, C., Seil, P., Amberger, S., & Aigner, A. (2023). *LIGGGHTS OPEN SOURCE DISCRETE ELEMENT METHOD PARTICLE SIMULATION CODE*. <https://www.cfdem.com/liggghts-open-source-discrete-element-method-particle-simulation-code>
- Kumaran, V. (2015). Kinetic theory for sheared granular flows. *Comptes Rendus Physique*, 16(1), 51-61. <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2014.11.008>
- Mitarai, N., & Nori, F. (2006). Wet granular materials. *Advances in Physics*, 55(1-2), 1-45. <https://doi.org/10.1080/00018730600626065>
- S., P., Thompson, A., Moore, A., Kohlmeyer, A., & Berger, R. (2023). *LAMMPS Molecular Dynamics Simulator*. <https://www.lammps.org/#gsc.tab=0>