PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif
Auteur: Author:	Christine Beaulieu
Date:	2020
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Beaulieu, C. (2020). Impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif [Thèse de doctorat, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/5371/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/5371/
Directeurs de recherche: Advisors:	François Bertrand, Jamal Chaouki, & David Vidal
Programme: Program:	Génie chimique

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif

CHRISTINE BEAULIEU
Département de génie chimique

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
Génie chimique

Août 2020

© Christine Beaulieu, 2020.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Cette thèse intitulée :

Impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif

présentée par **Christine BEAULIEU**
en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

Louis FRADETTE, président
François BERTRAND, membre et directeur de recherche
Jamal CHAOUKI, membre et codirecteur de recherche
David VIDAL, membre et codirecteur de recherche
Jean-Philippe HARVEY, membre
Jean-Michel GHIDAGLIA, membre externe

DÉDICACE

À ma famille, pour m'avoir donné la force et l'énergie de ne pas abandonner.

*****

Optimism is the faith that leads to achievement. Nothing can be done without hope or confidence.
-Helen Keller

*****

La liberté, est-ce que ce ne serait pas de rester en un tout petit espace d'où l'on peut sortir si l'on veut ?
-Gabrielle Roy

REMERCIEMENTS

Je ne croyais plus qu'il y aurait vraiment un moment où j'en serais à écrire mes remerciements. Le cheminement à travers mon doctorat a comporté pour moi plusieurs défis et plusieurs épreuves aux niveaux scientifique, professionel, mais surtout personnel. Et jamais, au grand jamais, je n'aurais réussi à me rendre jusqu'au fil d'arrivée si ce n'était de la panoplie de personnes merveilleuses qui m'ont entourée, encouragée, épaulée, supportée et conseillée pendant toutes ces années.

Premièrement, je veux remercier mes trois directeurs de recherche : François Bertrand, Jamal Chaouki et David Vidal. Je veux les remercier d'abord pour m'avoir fait confiance et pour m'avoir permis de réaliser une multitude de projets. Vous m'avez permis d'aller à des conférences et à des formations autour du monde, j'ai eu la chance d'enseigner, de participer à des activités de vulgarisation scientique et même d'aller faire un séjour d'un an et demi à Vancouver. Grâce à vous, j'ai l'impression de terminer mon doctorat avec beaucoup plus qu'une thèse, mais une expérience de vie qui m'en aura autant appris sur les mélanges granulaires que sur moi-même. Merci François, pour ton écoute et pour avoir été là quand j'en avais besoin. Merci de m'avoir encouragée à continuer sans me mettre de pression. Merci Jamal, pour ta confiance et pour m'avoir placée dans des situations exigeantes qui m'ont fait grandir. Merci David, pour ton aide quotidienne depuis le tout début. Merci pour ta bienveillance, ta patience et ton temps. Tu me dois sûrement plusieurs cidres à cause de ce foutu montage, mais moi je te dois une grande partie de cette thèse.

Merci à ma gang de l'URPEI, le meilleur bureau de toute Poly sans aucun doute ! Jean-Michel, Tiffany, Asher, Igor, Charlotte et Bastien. Je suis tellement triste que la covid nous ait volé ces derniers mois ensemble. L'ambiance au bureau que j'adorais m'a motivée à me lever plusieurs matins ! Merci pour votre aide, les pauses-café, les gâteaux d'anniversaire, notre seul et unique dîner de sushis à volonté qui demeurera mémorable. Vous me manquez déjà. Merci aussi à Ahmad, Guillaume, Manon, Bruno, Rémi, Shuli, Olivier, Hamed et Bahman pour avoir rendu l'URPEI si accueillant dès le début de mon doctorat et pour l'avoir agrémenté de rires au fil des années.

Merci à tous ces autres étudiants de Poly, notamment Faezeh pour ton écoute et ton empathie, JC pour ton humour, pour tes encouragements du début jusqu'à la fin ! Thank you to Ghazaleh, my dear friend, you came to Poly right at the good time. I will miss our talks, our walks around the 6th floor. Thank you for our laughter that made many days much brighter.

Merci à plusieurs autres personnes à Poly qui m'ont remonté le moral quand c'était plus dif-

ficile, notamment Élise Saint-Jacques et Nick Virgilio. Merci aux responsables de laboratoire pour m'avoir aidée dans toute cette facette expérimentale si différente, mais si complémentaire, à la modélisation numérique. Merci à Maxime, Sylvain, Gino et Martine.

De l'autre côté du pays, j'ai eu la chance de rencontrer des gens incroyables qui m'ont fait mûrir scientifiquement... et qui m'ont accompagnée dans les plus belles randonnées de ma vie ! Merci d'abord à Anthony pour m'avoir accueillie dans son groupe de recherche et pour m'avoir encadrée pendant un séjour de 6 mois... qui ne finissait plus de s'allonger ! Merci à Daniel, Can, Sarvesh, Carmen, Robert, François et Chantal pour m'avoir fait aimer Vancouver et UBC dès la première journée. Vancouver is a gorgeous city where I really enjoyed staying, but it would be nothing without the amazing friends that I met there : David, Emma, Mohammad and Seoeun, thank you so much for all the times that we spent together in Van and for your encouragements. I can't wait to see you again soon.

Merci à l'*Espace Thèsez-vous*, qui est un organisme extraordinaire pour aider les étudiants en thèse à structurer leur temps de travail en groupe. Vos tomates m'ont sauvée ! Merci à Luc Panneton pour nos nombreux rendez-vous matinaux pour parler de mon avancement. Tes conseils, ton intérêt et tes encouragements m'ont aidée probablement davantage que tu ne pourrais l'imaginer !

Merci à mes amis. Merci de m'avoir écoutée parler de mon doc depuis... beaucoup trop longtemps ! Merci de m'avoir supportée dans ce long périple ! Vous méritez tous une place dans ce projet : Alexandra, Andréanne, Ariane, Audrey, Ben, Catherine, Corinne, Éric, Évelyne, Gab, Julie, Laurence, Mayer, Mike, Nicola, Nicolas, Paule, Petterson, Stéphanie-coloc et Vanessa. Vous n'avez aucune idée combien votre support constant m'a aidée.

Merci à ma famille. Papa et Maman, je ne sais même pas comment vous remercier. Votre confiance sans limite, votre support, votre ouverture. J'ai vécu pas mal de choses à travers ce doc et vous avez toujours été là pour moi. Toujours. C'est grâce à vous si j'ai réussi à écrire jusqu'à la dernière phrase et que j'en suis fière. Marie-Jo, Simon, Vincent, Stéphanie, Julie et Olivier, je vous aime tellement. Merci d'être là et de former cette famille exceptionnelle où j'ai toujours trouvé du réconfort, des rires, du respect et beaucoup beaucoup d'amour. La fin de ma thèse se sera entremêlée avec un été bien chargé pour nous tous et marqué par cette pandémie qui apportait bien des inquiétudes, mais je savais que je pourrais toujours compter sur vous, et que je le pourrai toujours. Et bien sûr, merci à Nathan et à Loïc, les enfants les plus merveilleux au monde, pour vos sourires, votre country road, vos casse-têtes, vos câlins. Vous êtes des boules d'amour et de motivation sur deux pattes !

Finalement, merci aux membres de mon jury qui ont accepté si promptement la tâche de lire cette thèse, même pendant une période de pandémie où tout est en changement.

RÉSUMÉ

Alors que les conséquences de la crise environnementale se font sentir partout autour de la planète, il devient urgent de trouver des sources d'énergie alternatives pour remplacer les ressources fossiles. Ecolomondo, une compagnie montréalaise, désire répondre à cette recherche d'énergie propre en proposant un procédé de pyrolyse de pneus usés. Ce procédé permet de convertir des pneus usés, qui représentent souvent de hauts risques de contamination des sols, des nappes phréatiques et de l'air, en biodiésel pouvant remplacer l'essence issue du pétrole. Cependant, lors de la conversion thermique des morceaux de pneus dans un four rotatif à l'échelle industrielle, plusieurs problèmes peuvent survenir. Entre autres, la température à l'intérieur du réacteur, mesurée à un endroit précis grâce à un thermocouple, subit des changements brusques et imprévus de valeurs. Ces mesures de température variables rendent le contrôle et l'optimisation de la réaction très difficiles, voire dangereux.

La pyrolyse de pneus usés n'est qu'un exemple parmi plusieurs procédés faisant intervenir un transfert de chaleur hasardeux dans des matériaux granulaires. En effet, un processus similaire est utilisé dans la fabrication du ciment, dans le séchage de copeaux de bois ou dans la production de composés entrant dans les piles au lithium. Ainsi, le sujet de cette thèse cherche à mieux comprendre le transfert de chaleur dans les milieux granulaires afin de pouvoir expliquer des comportements pour le moment incompris, comme ces changements brusques de température. Notre hypothèse de recherche est que les matériaux granulaires, de par leur nature discrète, ont tendance à se ségréguer dans un équipement en rotation. Cette ségrégation pourrait créer des zones de température hétérogènes dans le système. Le phénomène de ségrégation granulaire, qui tend à diviser un mélange granulaire en regroupant les particules aux propriétés similaires, est bien connu dans la littérature pour des particules sphériques. Dans un four rotatif, la ségrégation granulaire tend à rassembler les plus petites et denses particules au centre de l'équipement. Cependant, l'impact de cette ségrégation sur le transfert de chaleur demeure un sujet très peu examiné dans la littérature.

Les fours rotatifs, aussi appelés cylindres ou tambours rotatifs lorsqu'ils ne sont pas chauffés, sont des équipements fréquemment utilisés en industrie, car ils sont très versatiles et faciles à opérer. Ils peuvent traiter une grande diversité de matières premières, dont des matériaux sensibles au cisaillement et ne contiennent pas de pièces mécaniques de mélange. Étant donné leur popularité en industrie, plusieurs études ont déjà analysé le mouvement de particules dans ce type d'équipements, autant expérimentalement que numériquement. Pourtant, peu d'études se sont penchées sur le transfert de chaleur. De plus, la grande majorité des travaux

ont étudié des particules parfaitement sphériques, alors que les matériaux granulaires dans la vraie vie le sont rarement. L'objectif principal de ce projet de recherche est donc de quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un four rotatif, et ce, en utilisant principalement la modélisation numérique qui permet de connaître la température de chaque particule dans le système. Une meilleure compréhension de ce phénomène pourrait aider à concevoir des équipements mieux adaptés et à déterminer des conditions d'opération optimales pour favoriser le transfert de chaleur.

La modélisation numérique des matériaux granulaires a connu un réel essor avec le développement de la méthode des éléments discrets (*Discrete element method - DEM*), qui permet de connaître la position de chaque particule dans le temps à l'aide d'un bilan de forces. Les simulations DEM ont notamment permis de mieux comprendre les mécanismes de ségrégation dans les fours rotatifs. Plus récemment, la méthode des éléments discrets thermiques (*Thermal discrete element method - TDEM*) a vu le jour et permet d'étudier le transfert de chaleur dans ces matériaux. La TDEM a donné des résultats très prometteurs. Cependant, les modèles proposés dans la littérature sont multiples et chacun demeure incomplet.

La première partie de cette thèse présente donc le développement d'un nouveau modèle de TDEM en monodisperse qui répond à certains gaps de la littérature. Le modèle développé se base sur un réseau de résistances thermiques et a l'avantage, contraitement aux autres modèles, de considérer l'effet de la rugosité de surface des particules. Ce paramètre, souvent négligé, s'est avéré pourtant très important et influant pour déterminer le bon transfert de chaleur dans un lit de particules hautement conductrices. Le modèle est validé expérimentalement à l'aide de lits de particules de quatre matériaux différents s'étendant sur une vaste gamme de conductivité thermique : du verre, de l'acier et deux alliages d'aluminium. L'accord entre le modèle et ces quatre matériaux s'est révélé satisfaisant. Le modèle a donc été utilisé par la suite pour confirmer l'importance des gaz interstitiels dans le calcul de la conductivité thermique effective et pour expliquer la grande variabilité de résultats expérimentaux de la littérature par rapport aux conductivités thermiques effectives de matériaux très conducteurs, ce qui n'avait jamais été élucidé auparavant.

En deuxième lieu, le modèle développé est étendu aux mélanges bidisperses pour étudier le transfert de chaleur jumelé à la ségrégation granulaire. Le modèle est donc modifié et validé grâce à des expériences en laboratoire dans un entassement de billes de verre et d'aluminium. Ensuite, le modèle est appliqué à différents lits de particules avec des patrons et des intensités de ségrégation différents. Chaque cas de ségrégation est obtenu naturellement en mélangeant les particules dans un cylindre rotatif. Deux ratios de taille de particules ainsi que l'ajout de chicances dans le cylindre rotatif sont utilisés, étant donné que ces paramètres influencent

énormément les patrons et l'intensité de ségrégation obtenus. Il est démontré que, pour un ratio de taille donné, le coefficient de transfert de chaleur effectif entre les particules et le mur du four diminue significativement avec l'intensité de ségrégation, entraînant des temps de chauffage plus longs. Lorsque le ratio de taille favorise une ségrégation nette et la création d'un coeur de petites particules au centre de l'équipement, une très grande différence de température se développe entre les deux tailles de particules, les plus petites demeurant beaucoup plus froides dans le temps. Par contre, lorsque le ratio de taille permet aux petites particules de percoler à travers les plus grosses et de rejoindre la paroi chauffante, le transfert de chaleur est amélioré grâce au réseau de contacts plus complexe qui se crée entre les particules. Ces résultats démontrent l'importance de considérer la ségrégation granulaire pour prédire le profil de température dans tout lit de particules.

Finalement, la troisième partie de cette thèse étend les connaissances de la ségrégation granulaire dans des cylindres rotatifs à des particules non sphériques, dans le but de se rapprocher le plus possible des particules rencontrées dans la réalité. Des particules cubiques et icosahédriques sont analysées et comparées à des sphères. Plusieurs vitesses de rotation sont étudiées et une carte des patrons de ségrégation en fonction de la vitesse de rotation est obtenue, pour la première fois pour ces deux formes de particules, et s'étenlant du régime de roulement à la centrifugation. Il est démontré que, lorsqu'elles sont dans le même régime d'écoulement, les particules non sphériques exhibent les mêmes patrons de ségrégation que les sphères, mais à des intensités moindres pour une vitesse de rotation donnée. L'intensité de ségrégation diminue avec l'angularité de la forme. La principale différence entre les sphères et les cubes est leur capacité à transmettre efficacement l'énergie de rotation du cylindre à l'intérieur du lit de particules, les cubes étant beaucoup plus efficaces grâce à leurs nombreux points de contact avec le mur et à leur difficulté à tourner sur eux-mêmes. Cela résulte en des points de transition entre les régimes d'écoulement différents pour chaque forme. Ces transitions sont très importantes, car le régime d'écoulement est l'un des principaux facteurs influençant le patron de ségrégation dans le cylindre rotatif. Ces points de transiton apparaissent lorsque l'index de ségrégation est tracé en fonction de la vitesse de rotation du cylindre, et ils peuvent être réunifiés lorsu'ils sont tracés en fonction d'un nombre de Froude modifié.

Pour conclure, nous reviendrons sur les contributions scientifiques spécifiques à chaque aspect de cette recherche et proposerons diverses avenues pour poursuivre le travail entamé.

Mots-clés Matériaux granulaires ; Transfert de chaleur ; Ségrégation granulaire ; Modélisation numérique ; Validation expérimentale ; Cylindre rotatif ; Conductivité thermique effective ; Particules non sphériques

ABSTRACT

Climate change consequences have started to be omnipresent all around the world. To respond to these challenges, many industries are trying to find renewable energy sources to lower our dependency to fossil fuels. One example of these new technologies is the production of biofuel from waste, such as scrap tire pieces. In addition of producing biofuel that can replace fuel from oil resources, the pyrolysis of scrap tires is a good avenue to get rid of a waste that accumulates in many places in the world and represents a hazard for wild fires, which can pollute soils, waters and airs. However, pyrolysis of scrap tires is not easy to scale up at an industrial level to be competitive. In the big rotary kilns that are used to heat up the pieces of tires, the temperature is measured at a specific location using a thermocouple probe. This temperature fluctuates a lot in time and makes the process very hard to control and optimize.

Scrap tire pyrolysis is only one example of industrial processes that deal with granular materials and problematic heat transfer within them. Indeed, similar issues can be found in the wood industry, cement production or lithium battery production processes. The main objective of this research project is thus to better understand heat transfer in granular materials in rotary kilns, in order to provide an explanation of these temperature fluctuations that are, so far, not understood or foreseeable. Our research hypothesis is that granular segregation, which occurs for any granular assembly in a rotating equipment, could be the cause of these temperature changes. We thus want to confirm this hypothesis and quantify the impact of granular segregation.

Granular segregation is a well-known phenomenon now. It tends to bring particles with similar properties together in a moving geometry and, therefore, it decreases the homogeneity of the mixture. In a rotating drum, small and dense particles will, most of the times, conglomerate in the middle of the drum, while larger particles will remain by the walls. This phenomenon has been studied extensively, both numerically and experimentally. Nonetheless, the effect of this segregation on heat transfer has received much less attention.

Rotary kilns, also known as rotating drums or tumblers when they do not include a heating wall, are frequently used in industry because they are easy to operate and they can handle a large variety of feedstock. Because of their widespread use, a lot of work has been done, both experimentally and numerically, on them. However, most of this work has been done using spherical particles, while most particles in real life are not spherical, and very few has studied heat transfer. The aim of this thesis is thus to quantify the impact of granular segregation

on heat transfer in a rotary kiln. To do so, we will mainly resort on numerical simulations. A better understanding of this phenomenon would lead to safer and more optimized equipment operations and the design of more adapted tumblers.

Numerical simulations in granular materials has seen a significant increase with the development of the discrete element method (DEM) which allows to track every particle in movement in a system by means of a force balance. DEM simulations have helped to better understand segregation mechanisms and patterns in rotating drums, among others. More recently, the thermal discrete element method (TDEM) was created and consists of adding a heat balance on every particle to study heat transfer in granular materials. The results obtained with TDEM so far are promising and interesting, despite the fact that many models were suggested, which makes the literature confusing, and none of them seems to be complete.

The first part of this thesis is thus to develop a new and more complete TDEM model that considers the particle roughness in the calculation of heat transfer. Indeed, this parameter was often neglected in previous works, but our results showed its relevance on heat transfer, especially for materials with a high thermal conductivity. The proposed model is based on a thermal resistances network and considers two main heat transfer pathways in parallel: through the solid contact where the roughness influences the quality of the contact, and through the gas macrogaps. The model is validated in four different packed beds made of glass, steel and two aluminum alloys, respectively. Good agreement was obtained for the four materials. The model is then used to quantify the contribution of the gas conduction in the total heat transfer and to reconcile many experimental data of effective thermal conductivity of packed beds in the literature.

In the second part of this work, the TDEM model is extended to bidisperse blends in order to study heat transfer and granular segregation. The model is modified to take into account a contact between particles differing in size and validated with a blend of glass and aluminum beads in a packed bed. Then, the model is used to study heat transfer in beds of particles showing different patterns and intensities of segregation. Every segregated bed was obtained naturally by mixing particles in a rotating drum. Two size ratios and the addition of baffles in the drum were studied. It is shown that, for a given size ratio, the heating time of the bed increases significantly with the segregation intensity. When the size ratio promotes a clear segregation and that small particles are trapped in the middle of the drum, a large temperature difference develops between the two particle sizes, the smaller remaining much colder over time. This also explains the longer heating time. However, when the size ratio allows smaller particles to percolate through to larger ones and reach the drum heated walls, the heat transfer is enhanced thanks to the better and more complex network of contacts

between particles. These results show the importance of considering granular segregation when predicting temperature profiles in an assembly of particles differing in size.

Lastly, the third part of this work studies granular segregation in non-spherical particles, in order to get as close as possible to the particles encountered in reality. The behavior of cubic and icosahedral particles in a rotating drum are examined and compared to spheres. Many rotational speeds are studied and a full map of segregation patterns versus the rotational speed is obtained for the first time for these two shapes, ranging from rolling to centrifuging regimes. It is shown that, when they are in the same flowing regime, non-spherical particles exhibit the same segregation pattern than spheres, but with a lower intensity, for a given rotational speed. The segregation intensity decreases with the shape angularity. The main difference observed between cubes and spheres is that cubes are more efficient at transferring the energy of the wall rotation into particle motion, having more contact points at the wall and more difficulty to spin on themselves. This results in lower transition points between flowing regimes for non-spherical particles. These transitions are really important, because the flowing regime is the main factor to determine the segregation pattern in a rotating drum. It is demonstrated that these transition points can be reunited when plotting the segregation index against a modified Froude number .

To conclude, we will come back on the specific scientific contributions to each aspect of this research and propose various avenues to continue the work.

Keywords Granular materials ; Heat transfer ; Granular segregation ; Numerical simulations ; Experimental validation ; Rotating drum ; Effective thermal conductivity ; Non-spherical particles

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ vi

ABSTRACT ix

TABLE DES MATIÈRES xii

LISTE DES TABLEAUX xvi

LISTE DES FIGURES xviii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xxvii

LISTE DES ANNEXES xxviii

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1
1.1 Les matériaux granulaires 1
1.2 La ségrégation et les noix du Brésil 2
1.3 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires 3
1.4 Hypothèse de recherche et objectif principal 4

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE 6
2.1 Les écoulements de matériaux granulaires 6
2.1.1 Les matériaux granulaires dans un cylindre rotatif 7
2.1.2 La ségrégation granulaire dans un cylindre rotatif 11
2.1.3 Les particules non sphériques 16
2.2 La modélisation numérique appliquée aux matériaux granulaires 17
2.2.1 Les bases de la méthode des éléments discrets (DEM) 18
2.2.2 La modélisation des particules non sphériques 25
2.3 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires 26
2.3.1 Les mécanismes de transfert de chaleur 29
2.3.2 L'importance du gaz interstitiel 32
2.3.3 La validation des modèles existants 33

2.3.4 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires de tailles différentes 40

CHAPITRE 3 SYNTHÈSE ET ORGANISATION DE LA THÈSE 41
3.1 Synthèse 41
3.2 Sous-objectifs 42
3.3 Organisation de la thèse 42

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE 46
4.1 Plateformes et codes numériques 46
4.1.1 La plateforme LIGGGHTS 46
4.1.2 Le code Grains3D 47
4.2 Géométries utilisées et tests de validation 49
4.2.1 Validation du transfert thermique 49
4.2.2 Validation du mouvement de particules cubiques 49
4.3 Grandes hypothèses de la thèse 51
4.3.1 Aucune réaction chimique 51
4.3.2 Forces en jeu 51
4.3.3 Mécanismes de transfert de chaleur négligés 51

CHAPITRE 5 ARTICLE 1 : IMPACT OF SURFACE ROUGHNESS ON HEAT TRANSFER THROUGH SPHERICAL PARTICLE PACKED BEDS 53
5.1 Introduction 53
5.2 Methodology 62
5.2.1 DEM governing equations 63
5.2.2 Modified TDEM model considering roughness 64
5.2.3 Experimental set-up and model validation 72
5.2.4 Numerical simulations to assess the impact of roughness on effective thermal conductivity 78
5.2.5 Time step selection 81
5.3 Results and discussion 83
5.3.1 Model validation 84
5.3.2 Local heat transfer mechanisms 90
5.3.3 Impact of roughness on the effective thermal conductivity of packed beds 93
5.4 Conclusions 96
5.5 Acknowledgments 97

CHAPITRE 6 ARTICLE 2 : IMPACT OF GRANULAR SEGREGATION ON HEAT

TRANSFER IN A HORIZONTAL ROTATING DRUM 101
6.1 Introduction 101
6.2 Methodology 105
6.2.1 Dynamical and thermal governing equations 105
6.2.2 Simulation characteristics 109
6.2.3 Four-step numerical approach 111
6.2.4 Segregation index and temperature profile calculations 114
6.3 Model validation with a bidisperse packed bed 116
6.4 Results and discussion 121
6.4.1 Segregation evolution over time 121
6.4.2 Temperature evolution over time 125
6.4.3 Temperature difference between the two types of particles 130
6.4.4 Effective heat transfer coefficient 132
6.5 Conclusions 135
6.6 Acknowledgments 136

CHAPITRE 7 ARTICLE 3 : EFFECT OF PARTICLE ANGULARITY ON FLOW REGIME TRANSITIONS AND SEGREGATION OF BIDISPERSE BLENDS IN A ROTATING DRUM 137
7.1 Introduction 137
7.2 Simulation methods and conditions 145
7.2.1 Governing equations of DEM 145
7.2.2 Time step selection 147
7.2.3 Simulation domain geometry and boundary conditions 148
7.2.4 Particle properties 150
7.3 Segregation characterization 151
7.3.1 Segregation index 152
7.4 Model validation 154
7.5 Results and discussion 156
7.5.1 Typical time evolution 156
7.5.2 Effect of particle shape on segregation in the pseudo-steady state . . 160
7.5.3 Effect of particle shape on flow regime transitions 166
7.6 Conclusions 173
7.7 Acknowledgments 176

CHAPITRE 8 DISCUSSION GÉNÉRALE 179

CHAPITRE 9 CONCLUSION 185
9.1 Synthèse des travaux 185
9.2 Limitations de la solution proposée 187
9.3 Améliorations futures 188

RÉFÉRENCES 191

ANNEXES 205

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 Classification générale des écoulements granulaires. 7
Tableau 2.2 Caractéristiques des régimes d'écoulement dans un cylindre rotatif. . 8
Tableau 2.3 Intervalles du nombre de Froude et la vitesse angulaire correspondante pour délimiter les régimes d'écoulement dans un cylindre rotatif. . . . 10
Tableau 2.4 Exposants du modèle de la force de contact caractéristiques des modèles de Hooke et de Hertz. 22
Tableau 2.5 Propriétés de la particule nécessaires aux simulations DEM. 23
Tableau 5.1 Summary of the experimental conditions used for the data collected from the literature. 61
Tableau 5.2 DEM parameters. 65
Tableau 5.3 Expressions used for the thermal resistances present in our proposed model. 69
Tableau 5.4 Thermal resistance model parameters (inspired for the most part from [92], [87] and [118]. 70
Tableau 5.5 Mechanical and thermal properties of the four materials used for the validation simulations. 76
Tableau 5.6 Alloy chemical compositions (%) 76
Tableau 5.7 Wall properties for the simulations. 77
Tableau 5.8 Fluid properties (air at 50°C and 1 atm). 77
Tableau 5.9 Mechanical and thermal properties used for the study of the impact of roughness on k_e. 82
Tableau 5.10 Comparison of the effective thermal conductivity of the packed bed normalized by the fluid thermal conductivity measured experimentally and predicted by TDEM models and correlations from the literature. 90
Tableau 5.11 Comparison of the various resistance and conductance values obtained on average for all four materials examined in the validation study. . . 91
Tableau 6.1 Expressions used for the thermal resistances in our proposed model. . 108
Tableau 6.2 Different equivalent radius definitions to calculate R_G in a bidisperse blend. 108
Tableau 6.3 Mechanical and thermal properties of the simulated particles and walls. 110
Tableau 6.4 Characteristics of the two blends of particles used in the simulations. 111
Tableau 6.5 Mechanical and thermal properties of the materials used for the validation. 117

Tableau 6.6	Fluid properties (air at 50°C and 1 atm).	117
Tableau 6.7	Average relative error (%) of the four radius definitions.	119
Tableau 6.8	Contact network characteristics for the six configurations.	127
Tableau 7.1	Froude number and rotational speed ranges for the different flow regimes in a rotating drum for spherical particles.	139
Tableau 7.2	Contact force model parameters.	147
Tableau 7.3	Hooke model parameter definition.	148
Tableau 7.4	Particle properties.	152
Tableau 7.5	Modeling parameters used for the model validation.	155
Tableau 7.6	Physical drum configurations used for the model validation.	155
Tableau 7.7	Fraction of particles centrifuging at high rotational speeds. The more there are particles centrifuging, the lower is I_{seg} for the three shapes.	166
Tableau C.1	DEM parameters.	212
Tableau C.2	Thermal resistance model parameters.	213

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Les différents régimes d'écoulement obtenus dans un cylindre rotatif pour des particules sphériques lorsque le nombre de Froude (Équation 2.1) augmente (adapté de [14]). 9

Figure 2.2 Dans le régime d'écoulement du roulement, deux couches principales distinctes se forment sous la surface libre. Les particules subissent une réorganisation dans la couche active alors qu'elles bougent en un seul bloc dans la couche passive. 11

Figure 2.3 La ségrégation par taille (a) est causée par la percolation, entraînant les plus petites particules dans les interstices des plus grosses. La ségrégation par masse volumique (b) est causée par la flottabilité. . . . 13

Figure 2.4 Dans un cylindre rotatif, la ségrégation axiale prend la forme de strates causées par les effets de bout. 14

Figure 2.5 Il existe cinq patrons de ségrégation radiale répertoriés dans un cylindre rotatif : le coeur classique (a), le patron par bandes (b), le patron en étoile (c), le patron inversé (d) et le cas bien mélangé (d). 15

Figure 2.6 Schéma des forces agissant sur la particule i en contact avec la particule j, proche de la particule k et entraînée par un fluide f. 20

Figure 2.7 Schéma du chevauchement dans la direction normale lors d'un contact entre les particules i et j. 21

Figure 2.8 Représentation des forces de contact normale et tangentielle selon un système de ressort-amortisseur proposé par Cundall et Strack [64]. . . 21

Figure 2.9 Dans les matériaux granulaires, le transfert de chaleur peut s'effectuer à travers différents mécanismes de conduction (1,2 et 5), de convection (4) et de rayonnement (3) qui agissent à différents endroits dans la structure granulaire. 28

Figure 2.10 La comparaison de la conductivité thermique effective prédite à l'aide de deux modèles de TDEM présentés dans la littérature avec des données expérimentales montre un très bon accord pour des valeurs de κ entre 30 et 2500 environ. Les points expérimentaux et les points utilisés pour tracer les courbes numériques sont tirés de [96, 99] et [104], respectivement. 34

Figure 2.11 Pour des valeurs de κ plus élevées, les données expérimentales de la littérature présentent une variabilité significative dans les valeurs de conductivité thermique effective rapportées. Les modèles de TDEM existants semblent surestimer plusieurs de ces données expérimenatles. 35

Figure 2.12 Représentation des résistances thermiques sur les deux chemins en parallèle du transfert de chaleur entre les particules i et j en contact (a) et réseau de résistances thermiques associé (b). Les résistances en rouge R_G et R_g font référence à des résistances de conduction dans la phase gazeuse alors que toutes les autres résistances font référence à la phase solide. Toutes les résistances thermiques sont exprimées en K/W. . . 38

Figure 3.1 Schématisation de l'organisation de la thèse avec les trois articles qui y sont présentés, ainsi que leurs liens pointant vers l'objectif général. 43

Figure 4.1 L'utilisation de la plateforme LIGGGHTS qui simule la DEM nécessite la compréhension des logiciels SALOME (génération de maillages), Python (calculs de post-traitement), Paraview (visualisation des résultats) et Excel (création de graphiques) ainsi que la connaissance du langage BASH, car la majorité du travail s'effectue sur Linux en utilisant les lignes de commande. 48

Figure 4.2 Montages expérimentaux et leur représentation numérique utilisés pour valider nos modèles de transfert de chaleur dans les Articles 1 et 2 (a) et notre modèle dynamique de particules non sphériques dans l'Article 3 (b). 50

Figure 5.1 Effective thermal conductivity predictions from TDEM models in the literature show good agreement with some reported experimental data with κ in the range of 30 to 2500. Simulation and experimental data are taken from [99, 104] and [96], respectively. 59

Figure 5.2 When experimental data for a wider range of κ are plotted, significant scattering in the effective conductivity measured at higher κ values is revealed. Current TDEM models overpredict the effective conductivity for these cases and are unable to explain the scattering. 60

Figure 5.3 When two particles are in contact, heat must go through many resistances in parallel and in series to transfer from particle i (hotter) to particle j (colder). Here, R_G and R_g are in red because they refer to the gas phase whereas all the other resistances are in the solid phase. All thermal resistances are expressed in K/W. 66

Figure 5.4 The thermal contact between two particles can be represented by an electrical resistance network, where $R_{c,i}$ and $R_{L,i}$ are, respectively, the solid conduction resistance and the constriction/spreading resistance of the particle i, and R_G, R_g and R_s are, respectively, the gas macrogap, the gas microcontact and the solid microcontact resistances. 67

Figure 5.5 To calculate the thermal contact radius a, the dynamical overlap is corrected into a so-called thermal overlap that accounts for the real Young's modulus (Y_0) of the particles. 69

Figure 5.6 The parameters L_s and A_s used in the calculation of $R_{c,i}$ are geometrical. 72

Figure 5.7 Schematic (a) and actual picture (b) of the set-up consisting of an insulated 10 cm × 10 cm × 20 cm box with thermocouples installed at different heights that was used to validate the heat transfer model with monodisperse and rough beads of four different materials (here with glass beads). 73

Figure 5.8 Glass (a) and steel (b) beads have more uniform and smoother surfaces than 7A03 (c) and 1100 (d) aluminum alloy beads, as characterized by the AFM images taken at a resolution of 77 nm pixels. 75

Figure 5.9 To study the impact of roughness on k_e and to compare our model with data from the literature, we numerically generated different packed beds of dimensions $13d \times 13d \times 16d$ with varying κ, d and σ using the DEM features of LIGGGHTS. The heat flux at steady state q was obtained using the proposed TDEM implemented in LIGGGHTS to account for particle roughness. 80

Figure 5.10 Experimental evolution of the temperature at three different heights in the packed bed of 7A03 aluminum alloy. The dashed lines represent the experimental errors of the measurements. 84

Figure 5.11 Temperature evolutions as predicted by the TDEM model for beads of 7A03 aluminum alloy at 0 s (a), 800 s (b), 1600 s (c), 2400 s (d), 3200s (e) and 4000 s (f) with the top plate set at 327.15 K (54°C). 85

Figure 5.12 Comparison of experimental data and numerical predictions for the evolution of temperature over time at different heights (noted h_1, h_2 and h_3 as per Figure 5.7(a)) in packed beds of glass (a), stainless steel (b), 7A03 aluminum alloy (c) and 1100 aluminum alloy (d) beads, with a hot plate at temperature T_h placed on the top of the packing. The shaded area (±2.0°C) represents the overall estimated experimental error. 88

Figure 5.13 Fraction of the average total heat contact conductance for the two pathways calculated from the thermal resistances for the four materials : glass (a), steel (b), 7A03 alloy (c) and 1100 alloy (d) beads. 92

Figure 5.14 By varying the roughness and the diameter of the beads, the proposed TDEM model is able to reconcile the numerical predictions and the experimental measurements of k_e for all κ values and explain the scattering of the experimental data at high κ values. 94

Figure 6.1 Schematic of the heat transfer process at the contact point between two particles of different sizes (a) and equivalent thermal resistance network (b), where $R_{c,i}$ and $R_{L,i}$ are, respectively, the solid conduction resistance and the constriction/spreading resistance of the particle i, and R_G, R_g and R_s are, respectively, the gas macrogap, the gas microcontact and the solid microcontact resistances. Thermal resistances in the gas phase are in red. All thermal resistances are expressed in K/W. (Adapted from [153]) 107

Figure 6.2 Dimensions of the three drums used for the simulations : a regular drum (a), a drum with four baffles fixed to the rotating wall (b) and a drum with an axially located baffle (c). All baffles have the same depth as the drum length, i.e. 5 cm. 109

Figure 6.3 Our numerical approach is divided into four steps, thus decoupling the dynamical (a) and the thermal (b) processes. The four steps are illustrated here for the size ratio of 2. 113

Figure 6.4 A cartesian grid of 3.4 cm $\times$ 5.0 cm $\times$ 3.4 cm was used to calculate the segregation index I_{seg} (a) and a radially divided grid of six concentric rings of 2.0 cm width was used to calculate the volume fraction of each type radially. 115

Figure 6.5 Real image of the top view (a) and schematic side view (b) of the set-up consisting of an isolated 10 cm $\times$ 10 cm $\times$ 20 cm box with thermocouples installed at different heights, and filled with bidisperse beads of glass (small) and aluminum (large). 116

Figure 6.6 Temperature at different heights in a packed bed made of a bidisperse blend of glass (3 mm) and aluminum (10.4 mm) beads. Solid lines are from experiments and symbols are the predictions obtained with our TDEM model using the harmonic mean radius. Error bars on experimental data represent the total estimated errors due to the exact positioning of the thermocouple and the accuracy of the thermocouple probe. The black line is the recorded temperature evolution (averaged over 60 s) of the aluminum lid and the black crosses are the actual boundary condition used over time for the upper wall in our TDEM model. 120

Figure 6.7 Visualization of the segregation patterns obtained in the drum for a blend of 3-mm (blue) and 6-mm (red) particles (a-d) and another blend of 3-mm (blue) and 15-mm (blue) particles (e-f). Configurations (a) and (e) represent well-mixed states obtained right after the loading step. Configurations (b) and (f) represent segregated states after 10 full rotations at 15 RPM without baffles. Configurations (c) and (d) represent the states obtained after 10 full rotations at 15 RPM with four baffles (c) and a middle baffle (d). Baffles were removed when studying the heating process as their role was only to generate different segregation patterns. 122

Figure 6.8 The segregation index (I_{seg}) of all drum configurations studied increases with time as particles get reorganized in the drum. A size ratio S_r of 2 without baffle promotes segregation whereas the addition of baffles lowers significantly the segregation index. A size ratio of 5 without baffle allows spontaneous percolation and leads to a realtively smaller index than for a size ratio of 2. The starting points of the curves purple (circles) and blue (diamonds) at $t = 0s$ represent the segregation index of the well-mixed states for the two size ratios. 123

Figure 6.9 Impact of size ratio (without baffles) (a) and baffle configuration (b) on the volume fraction of small particles (values for large particles are the mirror of the values presented here) in concentric disks versus the radial position in the drum. 124

Figure 6.10 Visualization of temperature patterns obtained in the drum for a blend of 3-mm and 6-mm particles (a-d) and a blend of 3-mm and 15-mm particles (e-f) after 2 hours of heating. Configurations (a) and (e) represent well-mixed states obtained right after the loading step. Configurations (b) and (f) represent segregated states after 10 full rotations at 15 RPM without baffles. Configurations (c) and (d) represent the states obtained after 10 full rotations at 15 RPM with four baffles attached to the wall (c) and a middle baffle (d). Baffles were removed for the heating process. The drum wall was maintained at 773.15 K and a convective flux was applied at the free surface. 126

Figure 6.11 Evolution of the average energy-weighted temperature over time for the six segregation patterns. t_{600} represents the required heating time for each system to reach 600 K. 127

Figure 6.12 Comparison of the radial temperature profiles between the well-mixed state (dashed lines) and a segregated state (solid lines) for a size ratio of 2 (a) and 5 (b) without baffle, and for a size ratio of 2 with four baffles (c). The case with the middle baffle is not presented here because of results similar to those with four baffles. The black line represents the initial temperature (294.15 K) of all particles at $t = 0$ s. 129

Figure 6.13 Temperature difference between the large and small particles (a) and temperature of the small particles (b) over time for the six configurations. 131

Figure 6.14 Evolution of the effective heat transfer coefficient at the wall over time for all configurations (a) and the ratio of the effective heat transfer coefficient of the segregated states after two hours over the corresponding well-mixed coefficient ($H_{w,end(w-m)}$) against the segregation index, for a size ratio of 2 (blue) and 5 (pink) (b). 134

Figure 7.1 Different rolling modes of spherical particles in a horizontal drum when increasing the Froude number (see Equation 7.1) at a constant filling degree (adapted from [14]). 139

Figure 7.2 In the rolling regime, segregation mechanisms occur in the active layer, whereas particles in the passive layer move as a solid body (adapted from [32]). 140

Figure 7.3 Segregation patterns encountered in a rotating drum. In the core segregation, smaller/heavier particles (gray) go to the middle of the bed (a) ; in double segregation, smaller/heavier particles go to the middle of the bed, but a second region in the form of an annulus around the core is also present (b) ; in streak segregation, smaller/heavier particles form a star-shape pattern in the middle of the bed (c) ; while, in inverse segregation, smaller/heavier particles accumulate in the vicinity of the wall (d). 141
Figure 7.4 Simulations were halted when a pseudo-steady state was reached based on criterion defined in Equation 7.8. 149
Figure 7.5 Lateral (left) and perspective (right) views of the domain geometry and its discretization. 150
Figure 7.6 The segregation index I_{seg} is calculated using a Cartesian sampling grid. 153
Figure 7.7 Experimental set-up used for the model validation 154
Figure 7.8 The dynamic angle of repose is calculated using image analysis (a) and is plotted over time (b). 157
Figure 7.9 There is good agreement between the experiments and the simulations according to the mean dynamic angle of repose at pseudo-steady state for both the Drum 1 (a) and Drum 2 (b) configurations. The error bars represent the standard deviation around the mean value over time. . 158
Figure 7.10 Discrete Fourier spectrum of the angle of repose signal over time for the Drum 1 (a) and Drum 2 (b) configurations, with amplitudes averaged over 0.5-Hz frequency intervals. 159
Figure 7.11 The radial core segregation for a blend of 4-mm and 6-mm cubes rotating at 25 RPM intensifies as time goes by and is represented by the increase in the segregation index I_{seg} over time. 161
Figure 7.12 The segregation index (I_{seg}) at the pseudo-steady state for a bidisperse blend of cubes, spheres and icosahedra with a size ratio of 1.5 evolves through the same trends with variations in the Froude number. The error bars represent the standard deviation of all the values in the last rotations used to calculate the average value. The lines are a guide for the eye. 162

Figure 7.13 Porosity of the active layer for bidisperse systems of cubes and spheres at different rotational speeds in the rolling and cascading regimes. As the rotational speed increases, the porosity of the active layer increases, leading to a less selective segregation. The porosity obtained for cubes is always higher than for spheres, explaining why cubes are less segregated. Values besides each point represent the intensity of the segregation (I_{seg}) of that point. The porosity value is calculated by looking at the volume occupied by particles found in the active layer at $X = 0$. . . . 164

Figure 7.14 The transitions from cascading to cataracting and from cataracting to centrifuging occur at a lower rotational speed for cubes (bottom) than for spheres (top). 167

Figure 7.15 At 80 RPM, cubes near the wall travel at the same speed as the drum whereas spheres travel significantly slower according to the dimensionless translational mean velocity of the particles. 169

Figure 7.16 Because of their angularity, cubes and icosahedra have a higher total translational kinetic energy and a lower total rotational kinetic energy than spheres for all the speeds studied. Note that not all speeds were simulated for icosahedra, which explains the absence of some green bars. 170

Figure 7.17 Comparison of the flow patterns of spheres at 80 RPM, with μ_r =0 (a) 0.001, (b) 0.05, (c) 0.1, (d) 0.25, (e) 0.5, (f), 1 (g), and cubes (h). . . 172

Figure 7.18 The apparent Froude number reconciles the transitions between the flow regimes according to the segregation index (I_{seg}) at pseudo-steady state for a bidisperse blend of spheres, cubes and icosahedra with a size ratio of 1.5. The error bars represent the standard deviation on all the values in the last rotations used to calculate the average value. The lines are a guide for the eye. 174

Figure A.1 Validation du module de DEM de LIGGGHTS en dynamique en comparant les profils de vitesse obtenus dans un cylindre rotatif de 24 cm de diamètre obtenus par LIGGGHTS (a) avec les profils obtenus dans un cylindre de mêmes dimensions à l'aide de la méthode de suivi de particules radioactives (b). Le graphique en (b) est adapté de [8] . . . 205

Figure A.2 Vérification de notre modèle de TDEM en régime permanent implémenté dans LIGGGHTS. 206

Figure B.1 Afin de calculer la conductivité thermique effective d'un lit de particules à partir de l'évolution des températures en temps à trois hauteurs différentes, nous avons linéarisé la solution analytique du chauffage d'une dalle semi-infinie et avons extrait la valeur de k_e des pentes de ce graphique. 209

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

AFM	Atomic force microscopy
DEM	Discrete element method
LAMMPS	Large-scale atomic molecular massively parallel simulator
LIGGGHTS	LAMMPS improved for general geometry and granular heat transfer simulations
TDEM	Thermal discrete element method

LISTE DES ANNEXES

Annexe A Vérification et validation supplémentaires du code LIGGGHTS 205
Annexe B Calcul de la conductivé thermique effective en transitoire 207
Annexe C DEM and TDEM models (Chapitre 6) 210

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Il existe une vieille histoire concernant un sage professeur désirant donner une leçon de vie à ses brillants et ambitieux étudiants. Muni d'un gros bac vide, il demande à sa classe quel est le meilleur moyen d'y faire rentrer de gros cailloux, de petites pierres, ainsi que du sable. Il démontre que si on veut faire de la place pour tous ses éléments distincts, il est primordial de placer d'abord les gros cailloux et de poursuivre avec les éléments de plus petite taille. En effet, si on remplit le bac en premier avec le sable, il sera impossible d'y insérer par la suite nos gros cailloux. Cette métaphore met en évidence l'importance de faire d'abord de la place dans nos vies pour ce qui compte vraiment avant de la remplir avec des futilités [1]. Elle illustre également le comportement particulier du sujet de cette thèse, les matériaux granulaires. Dans l'exemple ci-dessus, les gros cailloux, les pierres et le sable représentent tous des matériaux granulaires, mais agissent de manière très différente. Alors que les cailloux s'accumulent dans le bac de manière grossière, le sable a la capacité de s'écouler autour des gros morceaux et de remplir les interstices, presque à l'instar d'un liquide. Cette double nature représente l'un des nombreux défis des matériaux granulaires, présents dans notre quotidien et dans plusieurs industries.

1.1 Les matériaux granulaires

Les matériaux granulaires sont utilisés dans la vie de tous les jours et dans plusieurs industries. Ils peuvent prendre plusieurs formes et plusieurs tailles. Des exemples de matériaux granulaires sont les grains de sable qui glissent sous nos pieds lorsque nous marchons sur une plage, les comprimés pharmaceutiques qui nous sauvent d'un mal de tête, nos céréales préférées qui tombent dans notre bol au déjeuner ou les noix et les fruits séchés dans un mélange du randonneur [2]. Les **matériaux granulaires** sont définis comme des assemblages de particules solides distinctes qui ne sont pas liées par des liaisons chimiques. Cette non-continuité fait en sorte que leur comportement ne peut pas être représenté par des équations classiques de la physique continue. Les industries nécessitant l'utilisation de matériaux granulaires sont également très variées, incluant notamment les industries minières, agro-alimentaires, chimiques ou pharmaceutiques. Il a été calculé que le traitement de matériaux granulaires dans le monde requiert environ 10% de l'énergie mondiale extraite sur la planète [1], rendant leur étude pertinente.

1. Une maxime qui est toujours bon de se rappeler lorsque l'on se perd dans les méandres d'un doctorat.
2. Mélanges que j'affectionne particulièrement durant mes nombreuses explorations de montagnes autour du monde.

1.2 La ségrégation et les noix du Brésil

Selon le produit final désiré en industrie, les matériaux granulaires doivent être transformés chimiquement, mélangés, transportés, entreposés, séchés, chauffés ou refroidis. Comme exemples, dans le procédé de pyrolyse de pneus usés, qui a pour but de créer du biodiésel, des petits morceaux de pneus déchiquetés sont insérés dans un réacteur cylindrique rotatif, aussi appelé four rotatif. On agite les morceaux de pneus tout en les chauffant afin d'atteindre une température initiale nécessaire au démarrage de la réaction de pyrolyse. Les molécules de caoutchouc dans les pneus se brisent alors en de plus petites molécules, utilisées dans la fabrication de biodiésel. Dans le procédé de fabrication de levures alimentaires, les levures sont également disposées dans un gros cylindre rotatif dans lequel de puissants jets d'air sont introduits afin de faire évaporer l'eau des levures. Dans les procédés miniers, les minerais extraits du sol sont transportés sur d'énormes convois et subissent des chutes importantes afin de les concasser et de les séparer.

Afin qu'un procédé soit sécuritaire et efficace énergétiquement et économiquement [3], toutes ces opérations doivent être bien comprises et optimisées. Cependant, les matériaux granulaires peuvent présenter plusieurs comportements contre-intuitifs qui rendent leur manutention complexe. En effet, selon leur taille, leur forme, leur friction, leur masse volumique ou d'autres caractéristiques spécifiques à chaque particule de l'ensemble, le comportement global du système de particules à l'échelle de l'oeil humain va changer. Les interactions locales entre chaque particule sont donc d'une grande importance pour prédire le mouvement macroscopique des matériaux granulaires. Ainsi, des phénomènes particuliers, désirés ou non, peuvent apparaître dans les différents équipements utilisés pour traiter les matériaux granulaires, tels que le colmatage, l'effet de voûte ou la ségrégation granulaire. Des problèmes de voûte peuvent apparaître lorsque plusieurs particules forment un ensemble stable soutenu audessus du vide par quelques points de contact. Les contraintes de poids sont ainsi redirigées vers les parois [1]. Un autre problème à mentionner est le colmatage. Celui-ci consiste en le durcissement de particules inactives en voûte ou en agglomérats. Ce durcissement peut être dû à l'humidité ou à des processus internes physico-chimiques mal connus qui provoqueraient une adhésion entre les grains demeurés immobiles et collés ensemble trop longtemps [2].

Notre travail s'intéresse particulièrement à la ségrégation granulaire, qui a de nombreux impacts dans plusieurs opérations de génie chimique. La **ségrégation granulaire** est le phénomène par lequel, dans un système composé de matériaux granulaires, les particules dotées de propriétés similaires se regroupent ensemble. Cela a pour effet de créer un mélange non-uniforme. La ségrégation granulaire est également connue, de manière imagée, sous le

3. Malheureusement, c'est encore l'argent qui gère plusieurs sphères de notre monde.

terme de phénomène des Noix du Brésil [3,4]. En effet, il semblerait qu'en cueillant des noix au Brésil et en les transportant sur de longues distances dans la jungle sur des routes cahoteuses, des cueilleurs auraient remarqué qu'une fois arrivés à leur destination finale, toutes les petites noix se trouvaient dans le fond de leur camion, alors que les grosses noix avaient migré à la surface. Dans ce cas-ci, cela se produit grâce au phénomène de percolation. Lors du transport, les mouvements du camion font bouger les noix et créent suffisamment d'espace entre elles pour que les petites, sous l'effet de la gravité, se faufilent entre les grosses. Ce mouvement préférentiel des petites vers le bas encourage également la remontée des grosses vers le haut. Le système final est donc ségrégué : les petites dans le fond et les grosses sur le dessus. Ce cas-ci en particulier est causé par une ségrégation par taille, mais une ségrégation peut également être déclenchée pour des particules de même taille, mais avec d'autres propriétés différentes, notamment la masse volumique.

Ce comportement caractéristique des matériaux granulaires qu'est la ségrégation fait en sorte qu'il est difficile de prévoir précisément le comportement dynamique, c'est-à-dire le mouvement, du système granulaire dans l'un ou l'autre des équipements utilisés en industrie. Ainsi, les industries utilisent souvent des résultats empiriques afin de faire la conception des leurs équipements. Elles obtiennent par le fait même des analyses intéressantes pour des cas très particuliers reliés à leur domaine d'expertise, mais difficilement généralisables. De plus, si les intrants du procédé industriel venaient à changer légèrement, la ségrégation granulaire pourrait se révéler plus ou moins importante et les conditions d'opération sélectionnées *a priori* ne seraient plus valables.

1.3 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires

Lorsque vient le temps de chauffer les matériaux granulaires, comme c'est nécessaire dans tout traitement thermique de déchets (incinération, gazéification, pyrolyse) ou dans la fabrication de ciment, très en vogue dans nos sociétés actuelles qui semblent prôner une certaine expansion des villes et la création de gratte-ciels de plus en plus hauts, les problèmes sont multipliés. En effet, d'un point de vue thermique, les transferts de chaleur dans les matériaux granulaires sont fort complexes. De manière analogue au mouvement macroscopique du système qui dépend de chaque collision entre deux particules, l'évolution globale de la température dans le système granulaire dépend du transfert de chaleur local entre chaque particule. À ce jour, il n'existe pas de consensus dans le monde scientifique à savoir comment devrait être calculé précisément ce transfert de chaleur. Cela est dû, encore une fois, au caractère discret des matériaux granulaires qui fait intervenir des dizaines de paramètres pouvant influencer le transfert de chaleur. La difficulté principale au niveau thermique réside

dans le fait que les matériaux granulaires sont des systèmes poly-phasiques dans lesquels nous retrouvons une phase solide (la particule) ainsi qu'une phase gazeuse (le gaz entre les particules). Ainsi, les trois modes de transfert de chaleur connus, soient **la conduction, la convection et le rayonnement**, peuvent jouer un rôle dans le transfert de chaleur au niveau de l'assemblage de particules, avec chacun plus ou moins d'intensité.

Un équipement qui est souvent utilisé dans différentes industries pour traiter les matériaux granulaires est un **four rotatif**. Ce dernier est présent autant dans les industries de traitement de déchets que dans les industries minières, car il est très versatile et plutôt facile à opérer, étant donné qu'il ne comporte pas beaucoup de pièces mécaniques susceptibles de briser. Un four rotatif est tout simplement un gros cylindre dans lequel on introduit des réactifs et qui tourne selon son axe de rotation [4]. Cet équipement peut être utilisé pour mélanger, pour sécher ou pour chauffer les matériaux granulaires. Le chauffage peut se faire de manière directe (chauffage par une flamme ou par microondes) ou indirecte (chauffage à la paroi par une chemise). Aujourd'hui, c'est encore le chauffage direct qui est le plus répandu et c'est sur ce concept que se concentrera cette thèse.

La majeure partie du temps, les opérations se produisant dans un four rotatif font intervenir des particules solides de tailles ou de masses volumiques différentes, donnant lieu au phénomène de ségrégation. Comme ce phénomène est très sensible aux propriétés des particules et aux conditions d'opération, il est souvent très difficile de connaître l'état final dans lequel se trouvera le système de particules. Lorsque l'opération désirée nécessite une température précise optimale, le contrôle de l'opération pour atteindre cette température est d'autant plus difficile à effectuer au niveau industriel. En effet, la ségrégation génère des zones riches en un type de particules, lesquelles transfèrent la chaleur plus ou moins bien, créant ainsi des zones plus chaudes ou plus froides dans le four rotatif, le cauchemar de la plupart des industries qui souhaitent un mélange homogène et une température uniforme. Ce contrôle difficile résulte en une opération non optimale. Comme exemple, le four rotatif ne sera pas rempli à pleine capacité pour s'assurer qu'on puisse réagir si l'opération tournait mal. Cela occasionne des pertes de temps, d'argent, et du gaspillage d'énergie.

1.4 Hypothèse de recherche et objectif principal

Ainsi, les matériaux granulaires, bien qu'utilisés en grandes quantités dans différentes industries et dans notre quotidien, renferment plusieurs défis aux niveaux dynamique et thermique. Et évidemment, ces deux réalités sont très souvent entremêlées. La ségrégation granulaire est

4. Un peu comme un camion bétonnière.

un phénomène assez rapide. Vous pouvez vous-mêmes l'expérimenter facilement en versant des grains de couscous par-dessus quelques grosses amandes enrobées de chocolat dans un petit plat en plastique. En brassant votre contenant, vous remarquerez qu'en quelques secondes, les grosses amandes migreront vers la surface, à la manière des Noix du Brésil. Inversement, le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires est très lent. En effet, les matériaux granulaires s'apparentent à des milieux poreux, étant composés de cavités remplies d'air qui ralentissent la progression de la chaleur. Ainsi, il est raisonnable de penser que **le mouvement occasionné par la ségrégation granulaire a un impact sur le transfert de chaleur global du système granulaire, bien que cela n'a jamais été démontré.** Il s'agit là de notre hypothèse de recherche. Selon nous, la ségrégation granulaire dans le four rotatif influence le transfert de chaleur, rend impossible l'homogénéité du mélange et empêche par le fait même d'avoir recours à des corrélations ou à des équations générales qui considèrent un milieu continu aux propriétés et conditions uniformes.

Obtenir le profil de température dans un four rotatif dans lequel il y a présence de ségrégation granulaire aiderait à concevoir des équipements plus adaptés et à prédire des conditions d'opération optimales. De plus, le profil de température combiné avec la cinétique de la réaction permettrait de mieux prédire le comportement du système et aiderait à mettre à l'échelle des réacteurs de niveau laboratoire.

Ainsi, **l'objectif principal de cette thèse est de quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif.** Cet objectif requiert donc une meilleure connaissance de la dynamique des matériaux granulaires ainsi que de leur comportement thermique. Encore une fois, pour bien comprendre le comportement macroscopique (à l'échelle humaine) d'un matériau granulaire, nous devrons nous pencher sur les interactions entre chaque particule en contact avec une autre particule. Afin de bien cibler les lacunes et les apports potentiels dans ce domaine de recherche, une revue de la littérature sera d'abord présentée. À la lumière de cette revue, les objectifs spécifiques de cette thèse seront établis et constitueront les trois pierres angulaires de ce travail.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

De plus en plus de recherches sont réalisées partout dans le monde afin de mieux comprendre les deux sujets qui nous intéressent ici, soit le mouvement des matériaux granulaires et leur comportement thermodynamique. Aujourd'hui, les chercheurs ont accès à de nombreux outils pour tenter de percer les mystères de la Science. Les travaux de recherche se déclinent en trois grandes familles : les travaux théoriques se basant sur des équations mathématiques, les travaux pratiques se basant sur des observations prises en laboratoire sur des systèmes de tailles réelles ou réduites et finalement, les travaux numériques se basant sur des résultats issus de modèles physiques implémentés sur des ordinateurs pour représenter la réalité. Comme les écoulements granulaires représentent des systèmes opaques, il est d'autant plus difficile d'obtenir expérimentalement certaines quantités à l'intérieur de l'écoulement, surtout sans perturber ce dernier. De nombreux efforts sont ainsi fournis mondialement afin de développer de nouvelles techniques de caractérisation non invasives. En complément à ces données expérimentales, la simulation numérique permet d'avoir accès à des données intrinsèques du système granulaire. Les travaux reliés à la simulation numérique dans tous les domaines de la mécanique connaissent un énorme essor dans les dernières années. Dans le domaine des matériaux granulaires, l'état de l'art comprend autant de données expérimentales que de résultats numériques et nous tenterons d'en faire le survol dans cette revue de littérature afin de bien situer le présent projet de recherche.

2.1 Les écoulements de matériaux granulaires

Les matériaux granulaires agissent de manière contre-intuitive et souvent très différente des fluides, avec lesquels nous sommes plus habitués à travailler. Il n'existe pas de lois théoriques décrivant le mouvement de particules solides, à l'instar des équations de Navier-Stokes pour les fluides. À l'inverse, le mouvement des particules solides en écoulement dépend fortement des interactions et des contacts entre les particules elles-mêmes. Qui plus est, il existe divers types d'écoulement de matériaux granulaires, ce qui a rendu le développement d'une seule équation gouvernante impossible à ce jour.

De manière générale et acceptée dans la littérature, on distingue trois types d'écoulement de matériaux granulaires, regroupés principalement selon leur vitesse. Ces types d'écoulement sont définis dans le Tableau 2.1 ci-dessous [5].

Parmi ces trois types d'écoulement, l'écoulement dense est le plus largement utilisé en indus-

Tableau 2.1 Classification générale des écoulements granulaires.

Écoulement	**Caractéristiques**
Quasi-statique	– Processus qui se déroule de manière infiniment lente – Tous les états intermédiaires sont stables et à l'équilibre
Gazeux	– À l'opposé de l'écoulement quasi-statique – Processus rapide – Particules solides éloignées les unes des autres et très agitées – Très peu de collisions entre les particules, pour la plupart binaires
Dense	– Entre les deux premiers – Plusieurs collisions – Contacts multiples entre les particules

trie. C'est donc par rapport à cet écoulement que portera notre revue de littérature.

2.1.1 Les matériaux granulaires dans un cylindre rotatif

Comme stipulé dans l'Introduction, un équipement souvent utilisé dans la manipulation des particules solides est le cylindre rotatif. Celui-ci peut être employé dans plusieurs applications, car il est très flexible et permet de considérer une grande variété de matières premières, sans avoir à les prétraiter. Sa géométrie simple et son mode d'opération expliquent également sa dominance au niveau industriel. Du point de vue académique, le cylindre rotatif présente également un grand avantage. En effet, il permet d'étudier la dynamique des particules de manière simplifiée, car celles-ci s'y déplacent principalement selon deux dimensions : axiale et radiale [6].

Les régimes d'écoulement

Lors de la rotation d'un cylindre dans lequel se trouvent des particules, ces dernières peuvent agir selon différents types d'écoulement reconnus dans la littérature [2,7]. Ces régimes d'écoulement spécifiques au cylindre rotatif sont détaillés dans le Tableau 2.2 et illustrés schématiquement à la Figure 2.1.

Tableau 2.2 Caractéristiques des régimes d'écoulement dans un cylindre rotatif.

	Description	**Références**
Glissement	– Rotation solide en bloc du lit granulaire – Ne conduit à aucune réorganisation du lit granulaire	[2]
Avalanche	– Écoulement des particules du haut du lit vers le bas, en glissant sur la surface libre – Écoulement discontinu – Formation d'un cœur solide au centre	[2]
Roulement	– Avalanche continue – Apparition de deux phases : active et passive – Mouvement dans la phase active – Déplacement en bloc dans la phase passive – Interface entre les deux phases parabolique – Surface libre inclinée selon un angle dynamique de repos – Type d'écoulement recherché dans la majorité des applications, car il permet une bonne circulation des particules, favorisant ainsi les transferts de masse et de chaleur	[2, 8–11]
Cascade	– Équivalent au roulement, mais avec une vitesse de rotation plus élevée – Perte de la surface plane	[2, 12, 13]
Déferlement	– Les particules sont envoyées dans les airs, mais n'adhèrent pas encore à la paroi	
Centrifugation	– Entraînement des particules et adhésion aux parois	[2]

Le régime qui apparaîtra dans le cylindre rotatif dépend principalement du nombre de Froude, défini à l'Équation 2.1, ainsi que du niveau de remplissage du cylindre [7, 10]. Cependant, il a été démontré que le point de transition exact entre chaque régime dépend également de manière significative de la nature du matériau granulaire. Le coefficient de friction entre

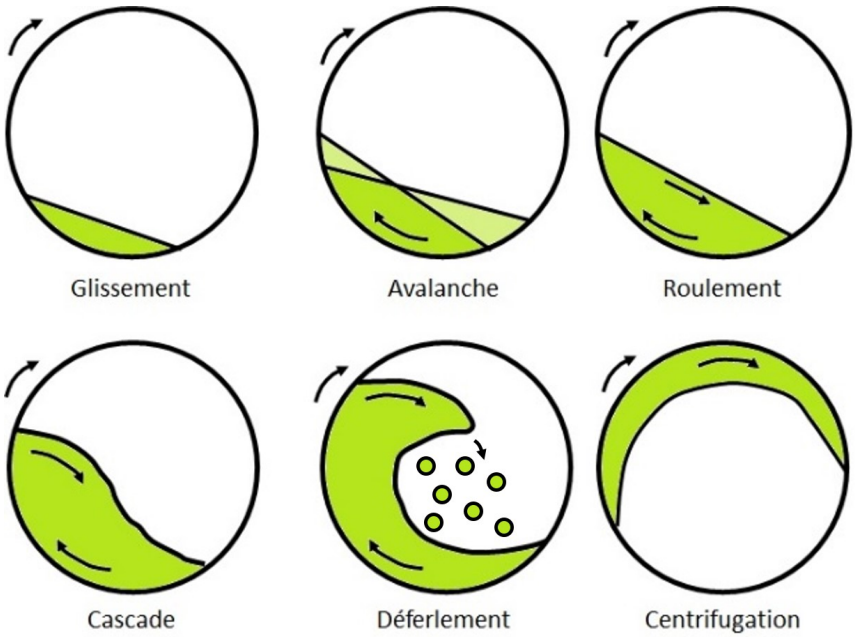


Figure 2.1 Les différents régimes d'écoulement obtenus dans un cylindre rotatif pour des particules sphériques lorsque le nombre de Froude (Équation 2.1) augmente (adapté de [14]).

les particules et entre les particules et le mur a entre autres un gros impact sur les points de transition entre les régimes [13, 15]. Le nombre de Froude représente le ratio des forces inertielles sur la force gravitationnelle dans le cylindre rotatif et se calcule comme suit :

$$Fr = \frac{\omega^2 R}{g} \tag{2.1}$$

où ω, R et g représentent, respectivement, la vitesse angulaire du tambour, son rayon et la force gravitationnelle. Le Tableau 2.3 représente les limites approximatives reportées par Dubé [6] afin de délimiter les régimes d'écoulement pour un cylindre rotatif fictif de 10 cm de rayon.

Parmi ces écoulements, **le roulement** est le type d'écoulement recherché dans la majorité des applications, car il permet une bonne circulation des particules, favorisant ainsi les transferts de masse ou de chaleur [2, 8–11]. Lorsque le cylindre atteint un régime permanent dans ce régime d'écoulement, la surface libre du lit de particules devient pratiquement plate et crée un angle stable θ avec l'horizontale, appelé l'angle dynamique de repos [1]. Cet angle varie selon le

1. Bel oxymore...

Tableau 2.3 Intervalles du nombre de Froude et la vitesse angulaire correspondante pour délimiter les régimes d'écoulement dans un cylindre rotatif.

Régime d'écoulement	**Intervalle du nombre de Froude**	**Intervalle de la vitesse de rotation* (RPM)**
Avalanche	10^{-5} à 10^{-3}	0.2 à 2
Roulement	10^{-4} à 0.1	0.7 à 21
Cascade/Déferlement	0.1 à 1	21 à 67
Centrifugation	1 et plus	67 et plus

*Calculé pour un cylindre rotatif de 10 cm de rayon.

niveau de remplissage, la vitesse de rotation du cylindre ainsi que les propriétés des particules, comme l'a démontré Höhner et al. [16] [2]. À l'intérieur du lit de particules, deux couches distinctes se forment : la couche active et la couche passive (Figure 2.2). Dans la couche active, les particules déboulent le long de la surface. Il y a donc beaucoup de mouvement relatif entre les particules et de collisions. C'est dans cette couche que les particules se mélangent, se réorganisent ou se ségrèguent. Dans la couche passive, située au fond du cylindre près de la paroi rotative, les particules sont immobiles les unes par rapport aux autres. Elles suivent la rotation du cylindre à l'instar d'un gros bloc solide. La Figure 2.2 représente une vue transversale d'un cylindre rotatif qui serait rempli à 50%. Lors d'une révolution complète, une particule peut traverser les deux couches, suivant une ligne de courant donnée (flèches bleues sur la Figure 2.2). La frontière entre les couches active et passive se nomme la ligne solide (*yield line*) et est illustrée par la ligne $\delta(x)$ à la Figure 2.2. Elle se caractérise par l'endroit dans le cylindre où les particules cessent de se comporter comme un bloc solide [17], c'est-à-dire lorsque la vitesse translationnelle des particules ne répond plus à l'équation :

$$v_i = R_i \omega \tag{2.2}$$

où v_i, R_i et ω représentent, respectivement, la vitesse translationnelle d'une particule, sa position radiale dans le cylindre ainsi que la vitesse angulaire du cylindre. Il est également possible de définir la frontière entre les couches active et passive à l'aide de la ligne de changement de direction (*turning point line*). Cette dernière ($\alpha(x)$) se définit comme étant l'endroit où la composante X de la vitesse des particules change de signe, comme illustré à la Figure 2.2. La couche de transition, normalement très mince, se trouve entre ces deux définitions. Un régime permanent est établi dans un cylindre en rotation lorsque toutes ces

2. À titre indicatif, l'angle θ vaut environ 30° dans un cylindre à demi rempli de particules de verre

quantités sont stables et ne varient plus dans le temps.

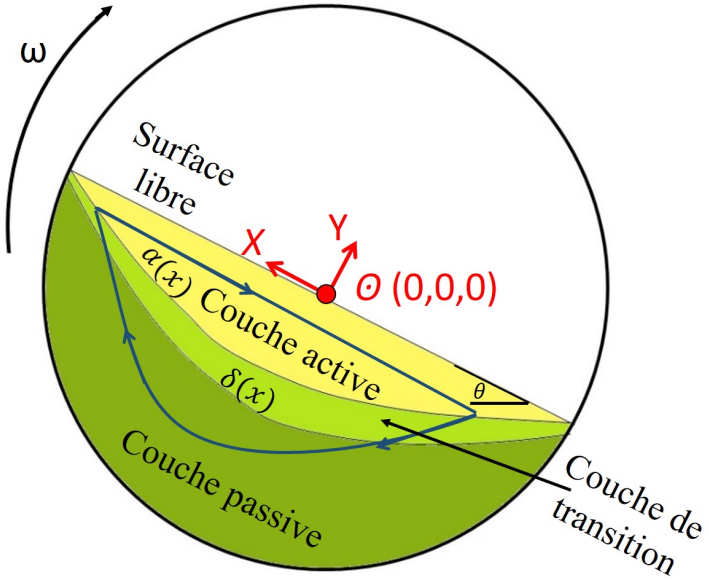


Figure 2.2 Dans le régime d'écoulement du roulement, deux couches principales distinctes se forment sous la surface libre. Les particules subissent une réorganisation dans la couche active alors qu'elles bougent en un seul bloc dans la couche passive.

2.1.2 La ségrégation granulaire dans un cylindre rotatif

Comme nous l'avons vu, plusieurs phénomènes caractéristiques peuvent survenir dans les matériaux granulaires denses. Ces phénomènes sont propres aux particules solides et sont la cause de plusieurs défis en industrie. L'une des opérations les plus effectuées sur les poudres dans les procédés de génie chimique est le mélange [18], et cette opération est souvent accomplie dans un cylindre rotatif. Pourtant, dans son livre *Sables, poudres et grains*, Jacques Duran stipule que «Toute agitation du mélange [granulaire] tend à séparer les deux constituants qui le composent.» [1]. L'action de *mélanger*, qui est plutôt intuitive, a donc l'effet inverse de celui désiré dans bien des cas impliquant un mélange granulaire. On parle alors de *démélange*. Paradoxalement, dans plusieurs sphères du génie, l'uniformité de contenu d'un mélange granulaire est primordiale. Par exemple, dans le domaine pharmaceutique, l'homogénéité du mélange et la bonne teneur en éléments actifs sont cruciales afin de garantir la qualité des médicaments mis sur le marché et d'assurer la sécurité des consommateurs. Dans tout procédé réactif, les opérations de mélange représentent une opération déterminante. Souvent

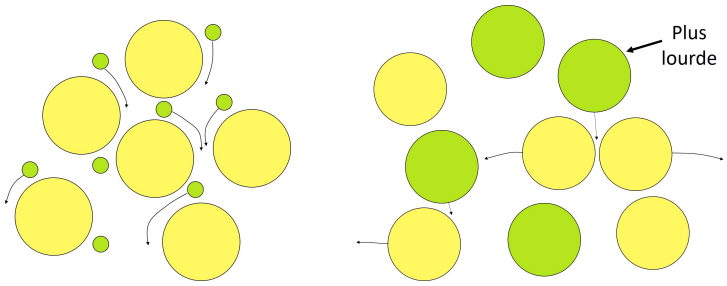
placé en amont ou au sein même d'un réacteur, le mélange impacte grandement le rendement de la réaction. Un mauvais mélange peut mener à des zones mortes où aucun produit n'est formé ou, à l'inverse, à des zones chaudes où un dégagement de chaleur accentué est très risqué. C'est pourquoi il est primordial de comprendre les causes et les répercussions de la ségrégation granulaire qui met en péril cette uniformité de contenu.

En 1996, Mosby et al. [19] ont répertorié dix mécanismes pouvant expliquer l'apparition d'une ségrégation granulaire dans différents équipements. Dans un cylindre rotatif, la majorité des auteurs s'entendent pour dire que les deux mécanismes dominants sont la percolation (causée par une différence dans la taille des particules) et la flottabilité [3] (causée par une différence dans les masses volumiques des particules) [20–23]. Tel qu'illustré avec les noix du Brésil, la percolation se définit par le passage des petites particules à travers les espaces vides formés par les grandes (Figure 2.3(a)). Il existe deux types de percolation : la percolation spontanée et la percolation générée par une couche en mouvement (tamisage ou *sieving*) [19, 20]. Dans le premier cas, les petites particules se faufilent entre les grosses sous l'effet de la gravité seulement. Cela ne peut survenir que lorsque la différence de taille entre les particules est grande. Bridgewater et Ingram [24] ont déterminé que **le ratio de taille S_r, défini dans cette thèse comme le diamètre de la grande particule sur le diamètre de la petite particule,** devait être supérieur à 6.46 dans un mélange bidisperse pour que la percolation spontanée ait lieu. Dans un cylindre rotatif, Yari et al. ont plutôt observé une ségrégation spontanée pour un ratio de taille de 4 [25]. Plus le ratio de taille est grand, plus les particules diffèrent en taille. À l'inverse, lorsque le ratio de taille s'approche de 1, les tailles des particules sont presque identiques. Le résultat de la percolation générée par une couche en mouvement est le même que la percolation spontanée, c'est-à-dire que les petites particules se faufilent entre les interstices formés par les grosses. Cependant, pour que ce mécanisme voie le jour, la couche de grosses particules doit être en mouvement. Ainsi, les espaces entre elles s'élargissent selon les collisions occasionnées par le mouvement, ce qui permet aux petites particules de s'y glisser [19], malgré le plus petit ratio de taille. La percolation générée par une couche en mouvement, ci-après mentionnée comme percolation seulement pour éviter de surcharger le texte [4], est quant à elle possible et observée pour des ratios de taille aussi petits que 1.03 [19]. Le mécanisme de flottabilité, quant à lui, a pour résultat de rassembler les particules plus lourdes au fond d'un lit granulaire en mouvement alors que les particules plus légères remontent vers la surface [20]. Cela est dû au fait qu'une particule plus lourde qui tombe sur deux particules plus légères aura tendance à pousser ces deux particules vers le côté et de se

3. aussi connue comme l'effet de poussée

4. Plusieurs auteurs ne font pas du tout la distinction entre la percolation spontanée et le tamisage et font référence à ces deux mécanismes sous le terme unique de *percolation*.

faufiler entre elles [19]. Ainsi, dans un cylindre rotatif, ces deux mécanismes peuvent travailler en collaboration ou en compétition, donnant lieu à différents patrons de ségrégation.



(a) (b)

Figure 2.3 La ségrégation par taille (a) est causée par la percolation, entraînant les plus petites particules dans les interstices des plus grosses. La ségrégation par masse volumique (b) est causée par la flottabilité.

Les patrons de ségrégation Dans un cylindre rotatif, la ségrégation granulaire peut prendre deux formes : la ségrégation radiale et axiale. La **ségrégation axiale** représente une séparation en strates selon l'axe de rotation du cylindre (Figure 2.4). Il n'existe pas encore de théorie qui explique exactement pourquoi les particules se séparent de la sorte [26]. Cette ségrégation serait néanmoins causée par les effets de bout (interactions avec les murs solides) et pourrait être représentée à l'aide d'équations de diffusion [27]. Étant donné que la seule force qui peut pousser les particules à bouger selon l'axe de rotation dans un cylindre horizontal est la dispersion, la ségrégation axiale est très lente et peut prendre des centaines de rotations avant d'apparaître [8, 26, 28, 29]. Après des centaines et voire même des milliers de rotations [29], certaines recherches démontrent que les strates se combinent et que le lit se sépare complètement en ses constitutants [29, 30]. Certains auteurs suggèrent même que la ségrégation axiale dépend de la ségrégation radiale et qu'elle peut être contrôlée et accélérée en créant un équipement rotatif avec une section transversale de formes variables [31].

En ce qui concerne la **ségrégation radiale** dans un cylindre rotatif, qui fera l'objet de cette thèse, elle a un impact clair et rapide sur l'homogénéité du lit granulaire, ce qui explique la grande quantité de travaux qui ont été faits à son sujet pour tenter d'en comprendre les mécanismes et les répercussions [8, 10, 20–22, 26, 30, 32] (pour n'en citer que quelques-uns). La ségrégation radiale se produit très rapidement, normalement dès les premières rotations du cylindre [8, 28, 30].

Ainsi, selon les propriétés des particules en jeu (ratio de taille, ratio de densité, friction), selon les propriétés du cylindre rotatif (forme et dimensions) et selon les conditions d'opé-

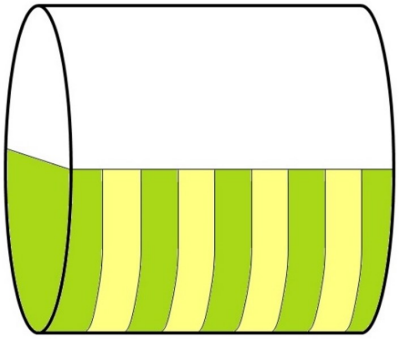


Figure 2.4 Dans un cylindre rotatif, la ségrégation axiale prend la forme de strates causées par les effets de bout.

ration (vitesse de rotation, niveau de remplissage et fraction volumique de chaque type de particules), les mécanismes de percolation et de flottabilité vus précédemment peuvent donner naissance à plusieurs patrons de ségrégation radiale schématisés à la Figure 2.5. Cinq patrons de ségrégation sont notamment répertoriés dans la littérature : le coeur classique, les bandes, l'étoile, la ségrégation inverse et le cas bien mélangé (l'absence de ségrégation).

La Figure 2.5(a) illustre le patron de ségrégation le plus commun, c'est-à-dire le coeur classique. Dans un système où la percolation est le mécanisme dominant, les plus petites particules s'accumulent au centre du cylindre et forment un coeur lisse sur lequel glissent les particules plus grosses [22, 33]. Dans un cas dominé par la flottabilité, ce sont les particules plus lourdes qui se retrouvent au centre [21]. En se basant sur des travaux numériques effectués pour un mélange de particules avec un ratio de taille de 1.5, Arntz et al. [22] donnent une explication très détaillée et instructive sur les détails de la percolation et des patrons de ségrégation en fonction de la vitesse de rotation du cylindre. À l'aide de figures représentant la vitesse de chaque particule, ils illustrent bien la capacité des petites particules à s'immiscer entre les plus grosses et à ainsi acquérir une vitesse vers le bas lorsqu'elles traversent la couche active du lit (Figure 2.2). Lorsque la vitesse de rotation du cylindre augmente et que le mode d'écoulement subit une transition vers un régime de cascade (Figure 2.1), la couche active du lit granulaire connaît une telle expansion que le mécanisme de percolation perd de son efficacité [22]. En effet, étant donné la plus grande énergie du système due à la vitesse de rotation plus élevée, les collisions entre les particules créent des interstices assez larges pour que les petites et les grosses particules s'y introduisent, annulant ainsi l'effet de la ségrégation. Cela donne naissance à un cylindre bien mélangé (Figure 2.5(e)). Par contre, si la vitesse de rotation dépasse un certain seuil et qu'un mode de déferlement prend place

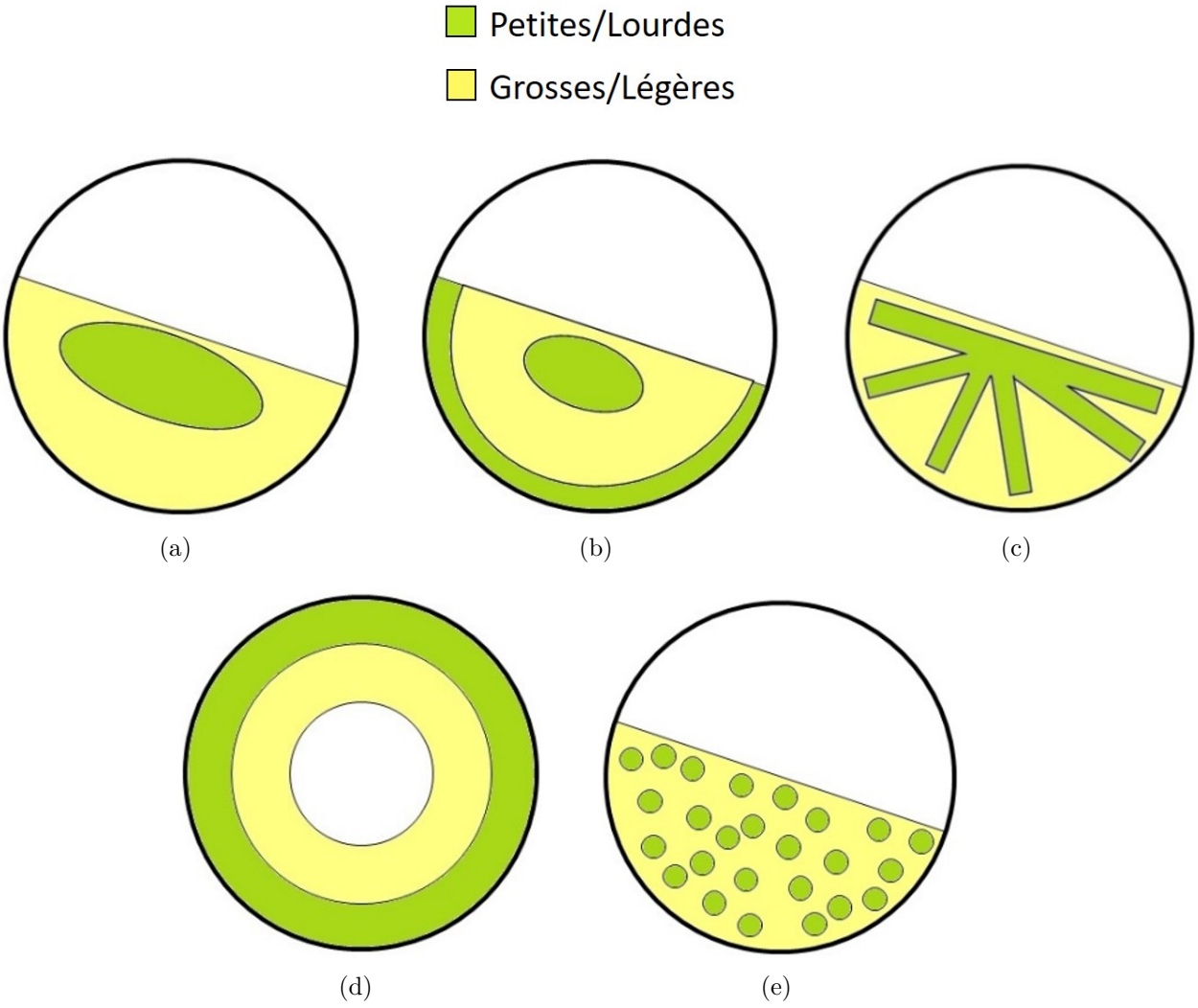


Figure 2.5 Il existe cinq patrons de ségrégation radiale répertoriés dans un cylindre rotatif : le coeur classique (a), le patron par bandes (b), le patron en étoile (c), le patron inversé (d) et le cas bien mélangé (d).

(Figure 2.1), la ségrégation inverse peut entrer en jeu. En effet, à cette vitesse, le mécanisme de percolation ne se passe plus dans la phase active du cylindre, mais dans la région supérieure de ce dernier. Les petites particules ont donc toujours la capacité de percoler à travers les grosses, mais cela ne les amène plus vers le centre du lit, mais vers la paroi du cylindre, menant à un patron de ségrégation inverse (Figure 2.5(d)). Dans un mode de roulement, lorsque les mécanismes de percolation et de flottabilité sont en compétition, ou lorsque le ratio de taille est assez élevé pour permettre la ségrégation spontanée des petites à travers les grosses particules de la couche passive, un patron de ségrégation par bandes peut apparaître (Figure 2.5(b)). Finalement, lorsque les mécanismes de percolation et de flottabilité agissent en collaboration dans un cylindre tournant à des vitesses très faibles, définissant un mode d'écoulement d'avalanche (Figure 2.1), le patron en étoile peut prendre forme pour des ratios de taille et de densité précis [21, 33]. À travers plusieurs expériences avec des mélanges de particules différents, Jain et al. [21] ont établi une carte de patron de ségrégation selon le ratio de taille et de densité des particules afin de prédire quel patron de ségrégation est le plus propice d'apparaître dans un cylindre rotatif.

2.1.3 Les particules non sphériques

Ces nombreuses recherches concernant la ségrégation granulaire dans un cylindre rotatif ont été effectuées avec des particules sphériques. Toutefois, les particules utilisées dans les différentes applications industrielles sont rarement parfaitement sphériques. Il suffit de penser à des comprimés pharmaceutiques, à des copeaux de bois, à des morceaux déchiquetés de pneus usés dans le processus de réutilisation de déchets, à des levures ou à des grains de riz dans le milieu alimentaire pour avoir une idée de la gamme de formes qui se retrouvent dans l'industrie. Toutes ces formes ont un impact sur l'écoulement des particules solides dans un cylindre rotatif et peuvent influencer l'efficacité du transfert de masse ou d'énergie. Malgré cela, beaucoup moins de travaux ont été effectués concernant des particules non sphériques.

Selon la littérature, l'effet de la forme se ferait notamment sentir dans la transition entre les différents régimes d'écoulement dans un cylindre rotatif (Figure 2.1), notamment en devançant les régimes de cascade, de déferlement et de centrifugation à des vitesses de rotation plus faibles [34–37], mais aussi en étendant le régime d'avalanche à des vitesses plus élevées. Cela a comme effet de réduire la gamme de vitesses potentielles pour le mode de roulement. Le fait de prolonger le régime d'avalanche s'expliquerait en partie par la résistance accrue des particules non sphériques au mouvement [37]. En effet, plusieurs auteurs ont remarqué que l'angle dynamique de repos θ (Figure 2.2) augmentait lorsque des particules non sphériques étaient utilisées [16, 38, 39], confirmant le fait qu'elles résistent plus longtemps à l'écoulement [37].

Cette résistance à l'écoulement témoigne d'une certaine structure cohésive supplémentaire qui n'est pas observée avec les sphères [34]. Cette particularité des particules non sphériques a un impact assuré sur leur écoulement dans les cylindres rotatifs, mais les conclusions des auteurs ne sont pas unanimes et ne permettent pas d'expliquer les différences d'écoulement entre les sphères et les particules non sphériques sur toute la gamme des régimes d'écoulement.

En ce qui concerne les mécanismes de ségrégation granulaire dans un cylindre rotatif, des résultats étonnants concernant des particules non sphériques ont été obtenus, suggérant que les mécanismes développés pour les sphères ne peuvent pas être utilisés tels quel pour les particules non sphériques. Expérimentalement, Dubé et al. [32] ont obtenu des patrons de ségrégation avec un coeur classique dans lequel se sont agglomérés les plus gros ellipsoïdes, suggérant que le mécanisme de percolation agissait inversément lorsqu'il était appliqué à des particules non sphériques. Numériquement, Pereira et al. [40] ont obtenu des coeurs remplis de cubes alors que les sphères s'amassaient à la périphérie. Ils expliquent ce comportement en ajoutant un nouveau mécanisme responsable de la ségrégation dans les particules non sphériques, soit la fluidité des particules, mécanisme qui est également repris par He et al. [41]. Ce mécanisme stipule que lors de leur chute dans la couche active, les particules détenant des arêtes et des coins perdraient plus facilement leur énergie cinétique. Leur vitesse ralentirait ainsi et les particules ne pourraient pas finir leur trajectoire jusqu'à la paroi du cylindre et se retrouveraient emprisonnées au milieu du lit.

2.2 La modélisation numérique appliquée aux matériaux granulaires

À travers les années, différentes techniques se sont raffinées afin d'étudier les mélanges granulaires, autant au niveau expérimental que numérique. En effet, dans les sections précédentes, nous avons vu que plusieurs recherches sur les matériaux granulaires étaient menées soit à l'aide d'expériences ou à l'aide de simulations numériques, lesquelles ont gagné en popularité dans les dernières années grâce aux avancées informatiques et à la rapidité de calcul accrue des ordinateurs [42]. Au niveau expérimental, plusieurs méthodes non perturbatrices de pointe telles que l'imagerie par résonance magnétique (MRI) [29,43], le suivi de particules par émission de positrons (PEPT) [44] ou le suivi de particules radioactives (RPT) [10, 45] permettent d'obtenir de l'information précise sur la trajectoire et la position de particules en mouvement dans un système.

Dans cette thèse pourtant, notre choix s'est davantage porté sur les méthodes numériques pour étudier les matériaux granulaires. Des expériences seront présentées, mais elles auront principalement comme but de valider les modèles numériques utilisés. Nous reviendrons sur ce point dans le Chapitre 4. Ainsi, nous concentrons notre revue de littérature sur les méthodes

numériques appliquées aux matériaux granulaires.

Afin de modéliser les phénomènes de la nature, plusieurs options sont présentes dans la littérature. Celles-ci se distinguent par leur représentation du milieu (lagrangienne ou eulérienne) et leur échelle de modélisation (atomique, microscopique, mésoscopique ou macroscopique). Dans le contexte de l'étude des matériaux granulaires et étant donné le caractère discret de ces milieux, une représentation lagrangienne est souvent favorisée. Une représentation lagrangienne a la particularité de suivre chaque particule dans l'écoulement. Une telle méthode donne la valeur de la quantité mesurée de chaque particule à un temps. Cela signifie que le référentiel se déplace avec la particule. À l'inverse, une représentation eulérienne donne la valeur de la grandeur mesurée de la particule qui occupe un point précis dans l'espace à un temps. Les échelles de modélisation sont décrites sommairement ci-dessous :

- Échelle atomique : modélisation se basant sur les mécanismes élémentaires de l'atome
- Échelle microscopique : étude de la position, de la vitesse et des forces de chaque particule dans un ensemble
- Échelle macroscopique : étude de l'écoulement global
- Échelle mésoscopique : intermédiaire entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique

Plusieurs méthodes de simulation numérique ont ainsi vu le jour pour représenter chaque particule de manière discrète dans un espace lagrangien. Certaines de ces méthodes de simulation numérique discrètes sont : la cellular automata [46], la dissipative particle dynamics [47], la simulation directe de Monte Carlo [48, 49], la *stochastic rotation dynamics* [50] et la méthode des éléments discrets (DEM) [51, 52].

Cependant, ces méthodes ne sont pas toutes appropriées pour représenter notre sujet d'étude, c'est-à-dire un grand nombre de particules solides, une grande géométrie et un écoulement dense avec beaucoup de collisions, menant à la ségrégation granulaire. Dans cette optique, la méthode des éléments discrets (DEM) a été retenue, car elle a déjà prouvé l'exactitude de ses équations pour représenter le dynamisme des matériaux granulaires dans des géométries complexes. Les prochaines sections feront un survol des principales caractéristiques de cette méthode.

2.2.1 Les bases de la méthode des éléments discrets (DEM)

La méthode des éléments discrets (DEM) permet donc de simuler le mouvement de chaque particule individuellement dans un système. Elle fait partie des méthodes regroupées sous le terme général de dynamique moléculaire. Celles-ci permettent entre autres d'obtenir la position et les vitesses linéaire et angulaire de chaque particule et la force qui agit sur elle.

Dans les dernières décennies, l'utilisation de la DEM pour résoudre les écoulements granulaires a augmenté de manière exponentielle, grâce à sa simplicité et à son exactitude dans des applications diversifiées [53]. Elle a entre autres permis des analyses détaillées des écoulements granulaires dans des empilements de particules [54], dans des procédés de moulage [55], dans le transport pneumatique [56], dans des broyeurs rotatifs [57, 58], dans des tambours rotatifs non-circulaires [59, 60], dans des gazéificateurs [61] ou dans des silos à grains [62]. Étant donnée la popularité croissante de la DEM dans les milieux académique et industriel, plusieurs logiciels ont vu le jour qui permettent de résoudre cette méthode : YADE, Esys, ESPRESSO, MULTICOR, EDEM et plusieurs codes maison. Pour notre projet, la plateforme LIGGGHTS [63] a été sélectionnée pour ses nombreux avantages qui seront discutés au Chapitre 4.

La DEM est une méthode numérique lagrangienne qui revient à résoudre la deuxième loi de Newton sur chaque particle afin de suivre sa trajectoire dans le temps et de monitorer ses contacts avec ses particules voisines ou avec les murs de la géométrie [18,51]. Selon la deuxième loi de Newton et pour un corps de masse constante, la dérivée de la quantité de mouvement est égale à la somme des forces qui lui est appliquée. Dans la DEM, la seconde loi de Newton s'énonce comme suit pour une particule i, en translation et en rotation, respectivement :

$$m_i \frac{d\mathbf{v_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{F_{c,ij}} + \sum_k \mathbf{F_{nc,ik}} + \mathbf{F_{g,i}} + \mathbf{F_{i,f}} \tag{2.3}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{T_{ij}} \tag{2.4}$$

où m_i, $\mathbf{v_i}$, I_i et ω_i sont respectivement la masse, la vitesse, le moment d'inertie et la vitesse angulaire de la particule i. La somme des forces pouvant influencer la translation de la particule englobe les forces de contact entre cette particule et toutes les particules j auxquelles elle touche ($\mathbf{F_{c,ij}}$), les forces sans contact représentant les interactions à longue portée entre la particule i et toutes les particules k dans un intervalle de distance donné ($\mathbf{F_{nc,ik}}$), la force de gravité ($\mathbf{F_{g,i}}$) et les forces induites par un fluide avoisinant ($\mathbf{F_{i,f}}$). Les moments de force pouvant agir sur la rotation de la particule sont les torques ($\mathbf{T_{ij}}$) et seront présentés plus bas. La Figure 2.6 illustre l'application de ces forces et moments pour une particule i. Le cœur de la DEM repose donc dans la représentation numérique de chacune de ces forces, qui sont décrites dans les sections qui suivent.

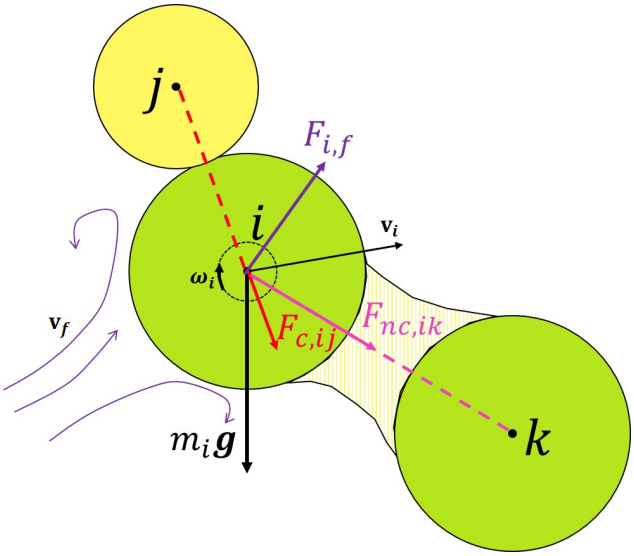


Figure 2.6 Schéma des forces agissant sur la particule i en contact avec la particule j, proche de la particule k et entraînée par un fluide f.

Les forces de contact

Lorsque deux particules entrent en collision, si elles ne sont pas parfaitement élastiques, elles subissent une légère déformation plastique qui dissipe de l'énergie cinétique. Dans la DEM, la déformation est remplacée par un chevauchement entre les deux particules, représenté de manière exagérée à la Figure 2.7. Plus ce chevauchement est élevé, plus la force répulsive résultante de ce contact sera importante. Cundall et Strack ont proposé, en 1979, un modèle linéaire composé d'un ressort et d'un amortisseur afin de représenter cette force de contact [64] (Figure 2.8). Le ressort assure la composante de répulsion alors que l'amortisseur représente le caractère inélastique de la collision et l'énergie dissipée [65]. De plus, il est commun de décomposer la force de contact selon deux composantes, l'une dans le plan normal et l'une dans le plan tangentiel à la collision. La force normale se situe toujours selon l'axe reliant les deux centres des particules, alors que la force tangentielle est dans le plan perpendiculaire à la force normale. Chacune de ces forces est donc représentée par un système ressort-amortisseur.

Une expression générale pour représenter la force de contact entre les particules i et j est

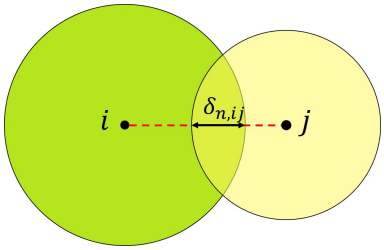


Figure 2.7 Schéma du chevauchement dans la direction normale lors d'un contact entre les particules i et j.

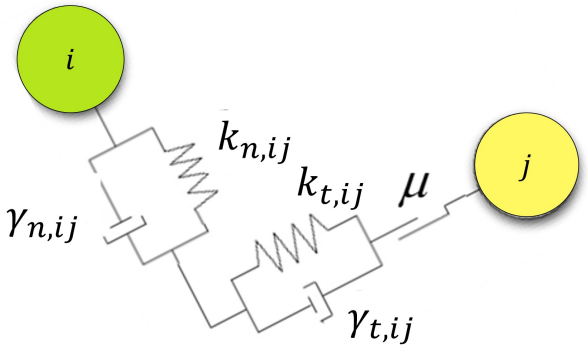


Figure 2.8 Représentation des forces de contact normale et tangentielle selon un système de ressort-amortisseur proposé par Cundall et Strack [64].

proposée par Blais et al. [52] et est énoncée ci-dessous [5] :

$$\mathbf{F_{c,ij}} = \underbrace{\left(k_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{a}\,\delta_{\mathbf{n,ij}} - \gamma_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{b}\,\mathbf{v_{n,ij}}\right)}_{\mathbf{F^{n}_{c,ij}}} + \underbrace{\left(k_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{c}\,\delta_{\mathbf{t,ij}} - \gamma_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{d}\,\mathbf{v_{t,ij}}\right)}_{\mathbf{F^{t}_{c,ij}}} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{F^{t}_{c,ij}} \leq \mu_C \mid \mathbf{F^{n}_{c,ij}} \mid \quad (2.6)$$

où $\mathbf{F^{n}_{c,ij}}$ et $\mathbf{F^{t}_{c,ij}}$ sont les composantes normale et tangentielle de la force de contact. $k_{n,ij}$ et $\gamma_{n,ij}$ sont les coefficients du ressort et de l'amortisseur représentant la force normale, $k_{t,ij}$ et $\gamma_{t,ij}$ définissent la force tangentielle, $\delta_{\mathbf{n,ij}}$ et $\delta_{\mathbf{t,ij}}$ sont les chevauchements normal et tangentiel, $\mathbf{v_{n,ij}}$ et $\mathbf{v_{t,ij}}$ sont les vitesses d'approche normale et tangentielle (qui sont exprimées à l'aide de la dérivée en temps des chevauchements) et μ_C est le coefficient de friction de Coulomb. Les exposants a, b, c et d sont des constantes non négatives dont les valeurs exactes définissent le modèle utilisé. Les coefficients $k_{n,ij}$, $\gamma_{n,ij}$, $k_{t,ij}$ et $\gamma_{t,ij}$ dépendent des propriétés des particules et du chevauchement normal, selon le modèle utilisé. Les torques responsables de la rotation des particules sont calculés à l'aide du produit vectoriel entre la force tangentielle et le rayon de la particule :

$$\mathbf{T_{ij}} = \mathbf{F^{t}_{c,ij}} \times \mathbf{r_i} \quad (2.7)$$

Les deux modèles les plus souvent utilisés en DEM sont le modèle linéaire de Hooke et le modèle non-linéaire basé sur la théorie de contact de Hertz, tous deux caractérisés par les exposants donnés dans le Tableau 2.4. Chaque modèle donne également des définitions différentes des coefficients du ressort et de l'amortisseur. Alizadeh et al. ont effectué une revue de plusieurs modèles de force normale proposés dans la littérature [42].

5. Vous risquez de recroiser cette équation à quelques reprises au courant de la thèse. Il s'agit de la base de la DEM.

Tableau 2.4 Exposants du modèle de la force de contact caractéristiques des modèles de Hooke et de Hertz.

	Hooke	**Hertz**
a	0	1/2
b	0	1/4
c	0	1/2
s	0	1/4

Les forces sans contact

Il existe trois formes de forces sans contact reconnues dans la littérature : les forces capillaires, les forces de van der Waals et les forces électrostatiques. Les forces capillaires sont causées par les tensions de surface. Les forces van der Waals trouvent leur source dans les dipôles entre les molécules. Puis, les forces électrostatiques sont induites par des particules chargées électriquement [51, 66].

Les forces de van der Waals et électrostatqiues prennent de l'importance et peuvent influencer le mouvement des particules lorsque le diamètre des particules en jeu est inférieur à 10 μm [18]. Aussi, lorsque les particules sont humides, les forces capillaires deviennent significatives et font en sorte que les particules se déplacent davantage en pain [67]. Pour des particules sèches et inertes, il est coutume de négliger les forces capillaires et les forces électrostatiques par rapport aux forces de van der Waals [66]. Différentes approches ont été développées afin de représenter et modéliser chacune de ces forces [66, 68, 69], mais cela dépasse le cadre de ce projet et ne sera donc pas détaillé dans la revue de littérature.

Les propriétés physiques des particules nécessaires

Comme mentionné précédemment, les coefficients $k_{n,ij}$, $\gamma_{n,ij}$, $k_{t,ij}$ et $\gamma_{t,ij}$ utilisés dans le calcul de la force de contact dépendent des propriétés des matériaux en jeu et de leurs interactions. Les propriétés de base des matériaux nécessaires pour faire rouler une simulation de DEM sont énoncées dans le Tableau 2.5.

Tableau 2.5 Propriétés de la particule nécessaires aux simulations DEM.

Propriété	**Symbol**	**Units**
Diamètre	d	m
Masse volumique	ρ	kg.m^{-3}
Module de Young	Y	Pa
Coefficient de Poisson	ν	(-)
Coefficient de restitution‡	e	(-)
Coefficient de friction en glissement‡	μ_C	(-)
Coefficient de friction en roulement‡	μ_r	(-)

‡Propriétés qui se mesurent pour un couple de matériaux

La détection des contacts

Nous venons de voir comment les contacts sont modélisés mathématiquement. Par contre, avant même de calculer une force de contact, il faut d'abord détecter tous les contacts présents dans le système de particules èa un temps donné. Dans la DEM, la détection de contact est effectuée grâce à une liste de Verlet, aussi connue sous le nom de liste de voisins [70]. Chaque particule est assignée à une boîte dans l'espace. Puis, une liste de voisins est établie pour chaque particule en regardant quelles particules se trouvent dans les boîtes adjacentes. Cette manière de faire évite de devoir balayer l'ensemble de l'espace de simulation pour détecter d'éventuels contacts. Cette assignation dans des boîtes et la liste de voisins sont réévaluées à chaque fois qu'une particule se déplace d'une distance suffisante pour changer de boîte. Le principal avantage d'une liste de voisins est de diminuer énormément le temps de calcul.

La sélection du pas de temps

Le choix du pas de temps dans les simulations de DEM est critique. En effet, un pas de temps assez petit est requis pour respecter les hypothèses du modèle. Cependant, un pas de temps trop court mène à des temps de simulation abusivement longs. L'objectif est donc de sélectionner le pas de temps le plus grand possible, qui garantit toutefois la stabilité du modèle. Ainsi, Li et al. proposent d'utiliser le temps de Rayleigh comme seuil [71]. Les ondes de Rayleigh sont des ondes acoustiques se propageant près de la surface de solide. Elles permettent de transférer l'énergie due à un choc. Selon Miller et Pursey [72], 67% de l'énergie d'impact due à une collision se propagent par les ondes de Rayleigh, alors que 26% se propagent par des ondes de distorsion et seulement 7% se propagent par des ondes de dilatation. De plus, les ondes de Rayleigh et de distorsion ont des vitesses de propagation similaires, ce qui valide l'hypothèse de Li et al. Le temps de Rayleigh t_R représente donc le temps que prend cette onde de choc pour parcourir une particule en entier. Il dépend des propriétés de la particule selon l'équation ci-dessous, retrouvée dans l'article de Dubé et al. [73] :

$$t_R = \frac{\pi r}{\beta}\sqrt{\frac{\rho}{G}} \tag{2.8}$$

avec :

$$\beta = 0.8766 + 0.163\nu \tag{2.9}$$

$$G = \frac{Y}{2\,(1+\nu)} \tag{2.10}$$

Le pas de temps Δt est sélectionné de sorte que :

$$\Delta t = \xi t_R \tag{2.11}$$

Ainsi, en sélectionnant une fraction ξ du temps de Rayleigh, l'idée est de restreindre l'effet des forces calculées sur les particules voisines seulement. Ce pas de temps permet d'ignorer les effets des particules lointaines par propagation d'ondes de choc. Selon plusieurs auteurs, une fraction ξ=0.2 est suffisante pour assurer la stabilité des résultats numériques [52, 73, 74]. Cependant, il convient de rappeler qu'il s'agit d'heuristiques et qu'il est toujours essentiel de vérifier la sensibilité des résultats au pas de temps choisi.

Une autre manière d'estimer le pas de temps proposée par Rakotonirina et al. [34] est d'utiliser une fraction du temps de contact minimal théorique entre deux particules, de sorte que chaque contact dure au moins 10 itérations. Cependant, l'évaluation du temps de contact minimal nécessite l'estimation d'une vitesse de collision moyenne dans le système et cette évaluation dépend du modèle de DEM utilisé, pouvant devenir plutôt complexe pour un modèle non linéaire [75].

2.2.2 La modélisation des particules non sphériques

Comme nous l'avons vu précédemment, la plupart des matériaux granulaires en industrie ne sont pas parfaitement sphériques et réagissent par le fait même de manière caractéristique lorsqu'ils sont mélangés dans un cylindre rotatif. Afin d'en apprendre davantage sur les écoulements de particules non sphériques, plusieurs recherches ont été réalisées dans les dernières années afin d'adapter la forme des particules simulées dans la DEM.

La première approche en DEM afin de modéliser la non-sphéricité des particules a été d'ajouter un coefficient de friction en roulement à des particules toujours sphériques [76]. Ainsi donc, les particules simulées sont toujours des sphères, mais l'ajout d'une friction supplémentaire artificielle tend à simuler la perte de l'énergie cinétique rotationnelle ainsi que la microfriction au point de contact qu'engendrerait une forme non sphérique. Cette technique, bien que très simple, est évidemment limitée à des formes très rapprochées de la sphère. De plus, les chercheurs ne s'entendent pas à savoir comment déterminer expérimentalement ce coefficient de friction en roulement. Wensrich et Katterfeld [77] ont proposé d'utiliser l'excentricité des particules ainsi qu'un rayon équivalent pour calculer ce coefficient, mais concluent cependant que le coefficient de friction en roulement n'est pas suffisant pour représenter la complexité du mouvement obtenu avec de vraies particules non sphériques.

Ainsi, différentes astuces ont vu le jour afin de non pas simuler des sphères avec des propriétés

de friction accrues, mais de représenter numériquement la vraie forme de la particule. Il est évident que ce type de simulations est plus coûteux en temps de calcul. En effet, la modélisation de particules non sphériques entraîne de nombreux défis de simulations supplémentaires par rapport aux sphères. Lu et al. [78] et Wachs et al. [79] stipulent dans leur article respectif de revue sur le sujet que les principaux défis sont (1) la détection de contacts entre des particules non sphériques, (2) l'ajout de variables enregistrant l'orientation spatiale de la particule et (3) la mise en rotation de chaque particule. Ces auteurs effectuent également une description exhaustive sur les stratégies utilisées à ce jour pour faire face à ces défis dans différents codes numériques. Ils ont répertorié les modèles pour représenter les particules non sphériques en cinq classes distinctes, soit (1) l'utilisation d'ellipsoïdes, (2) l'utilisation d'équations superquadriques, (3) l'utilisation de polyèdres, (4) l'utilisation de sphères composites [6] et (5) l'utilisation d'éléments composites. Parmi ces stratégies, seules l'utilisation de polyèdres et d'éléments composites a la particularité de représenter les arêtes et les coins des particules. Les autres stratégies approximent plutôt ces aspects par des géométries arrondies, ce qui est également souvent le cas dans la réalité, selon l'échelle à laquelle on observe tout objet.

En bref, il existe à ce jour une grande gamme de modèles déjà éprouvés pour représenter la dynamique des matériaux granulaires sphériques, avec une avancée nette pour les formes non sphériques dans les dernières années. Cependant, lorsque l'on s'intéresse à la modélisation numérique du transfert de chaleur dans les matériaux granulaires, l'état de l'art est plus limité. Selon Shi et al. [80], la question du transfert de chaleur dans les matériaux granulaires a reçu bien peu d'attention, surtout par rapport à l'énorme travail qui se fait au niveau dynamique. Le but de la prochaine section de notre revue de littérature est donc de parcourir ces travaux traitant du caractère thermodynamique des milieux granulaires.

2.3 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires

Rappelons ici que l'objectif général de cette thèse est de quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit de rotatif. Nous avons vu dans la section précédente qu'il était possible de modéliser le mouvement des particules, et donc la ségrégation granulaire, dans tout système grâce aux équations de la DEM. Maintenant, afin d'étudier le transfert de chaleur et d'obtenir des informations sur les températures présentes dans un équipement d'intérêt, il est nécessaire de se pencher sur la théorie du transfert de chaleur au niveau du contact entre chaque paire de particules. Comment la chaleur passe-t-elle d'une particule à l'autre dans un assemblage granulaire et comment calculer ce transfert ? Comme

6. On peut estimer toute forme par un assemblage de plus petites sphères

nous l'avons vu dans l'Introduction, de par leur nature multiphasique, les matériaux granulaires sont le siège des trois modes de propagation de la chaleur : la conduction, la convection et le rayonnement.

La **conduction** représente le transport de la chaleur par l'agitation des molécules à travers une même matière : solide, liquide ou gazeuse. Dans les trois cas, la conduction répond à la loi de Fourier sur la conduction thermique énoncée ci-dessous :

$$q = -k\nabla T \tag{2.12}$$

où q, k et T représentent respectivement le flux de chaleur par unité de surface, la conductivité thermique du matériau et sa température. Il est important de noter que cette équation représente le transfert de chaleur dans un matériau isotrope, car elle se propage dans les trois directions (x,y,z) avec la même conductivité k [81].

La **convection**, quant à elle, représente le transfert de chaleur au sein d'un fluide en mouvement ou entre un fluide et une paroi. Elle peut être naturelle, sous l'effet d'un changement de masse volumique, ou forcée, sous l'effet d'une force externe ajoutée. La transfert de chaleur entre une surface et le fluide avoisinant est souvent calculé à l'aide de la loi de refroidissement de Newton :

$$q = h(T_s - T_\infty) \tag{2.13}$$

où h, T_s et T_∞ représentent respectivement le coefficient de transfert de chaleur entre la surface et le fluide avoisinant, la température de la surface et la température du fluide. Le coefficient h dépend de la vitesse et de la nature du fluide, mais doit être indépendant de la différence de température $(T_s - T_\infty)$ pour que l'Équation 2.13 s'applique.

Finalement, le **rayonnement** est le mode de transfert grâce auquel nous recevons la chaleur du soleil. Ce mode de transfert de chaleur ne nécessite aucune matière, mais les deux corps qui échangent le flux de chaleur doivent se *voir*. Ce transfert de chaleur fait donc entrer en jeu des facteurs de vue, qui quantifient l'intensité du transfert entre les deux corps en fonction de leur forme et de leur position l'un par rapport à l'autre. L'équation décrivant le transfert de chaleur par rayonnement est dérivée de la loi de Stefan-Boltzmann sur l'émissivité des corps [82] et est énoncée ci-dessous :

$$q = \psi S(T_1^4 - T_2^4) \tag{2.14}$$

où ψ est l'émissivité des particules étudiées, S est la constante de Stefan-Boltzmann (5.67×10^{-8} W.m^{-2}K^{-4}) et T_1 et T_2 sont les températures des deux objets qui échangent ce flux de chaleur.

À l'intérieur d'un lit de particules et selon les situations, ces trois modes de transfert de chaleur peuvent avoir lieu. De surcroît, chacun de ces trois modes globaux se déclinent en cinq mécanismes appliqués aux matériaux granulaires qui sont acceptés dans la littérature. Ces mécanismes sont énoncés ci-dessous et illustrés à la Figure 2.9 :

1. Conduction solide à l'intérieur de la particule ;
2. Conduction solide entre deux particules en contact ;
3. Rayonnement entre particules (ou entre une particule et la paroi de l'équipement) ;
4. Convection (naturelle ou forcée) dans le fluide entre les particules ;
5. Conduction dans le fluide stagnant entre les particules.

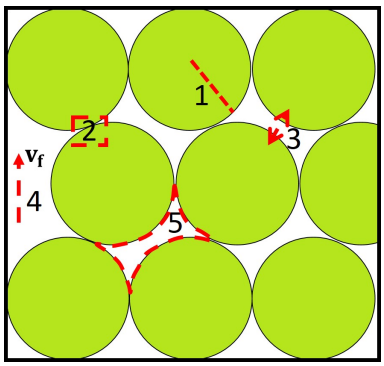


Figure 2.9 Dans les matériaux granulaires, le transfert de chaleur peut s'effectuer à travers différents mécanismes de conduction (1,2 et 5), de convection (4) et de rayonnement (3) qui agissent à différents endroits dans la structure granulaire.

L'implémentation d'un ou de plusieurs de ces mécanismes de transfert de chaleur dans un code de DEM a donné naissance aux modèles de TDEM (Thermal Discrete Element Method) [56, 83, 84]. Il s'agit d'utiliser la structure déjà établie de la DEM, qui repère déjà les voisins de chaque particule pour calculer les forces de contact, et d'ajouter un bilan de conservation d'énergie sur chacuque particules. Ce bilan d'énergie, énoncé à l'Équation 2.15, permet de mettre à jour la température de chaque particule dans le temps.

$$m_i C_i \frac{dT_i}{dt} = \sum_j Q_{ij} + \sum Q_{S,i} \tag{2.15}$$

où C_i est la capacité thermique spécifique de la particule i, Q_{ij} représente le flux de chaleur entre la particule i et j et $Q_{S,i}$ représente un flux de chaleur supplémentaire qui serait dû à une source externe, comme une réaction chimique, un flux convectif ou un chauffage par microondes. Le flux de chaleur Q_{ij} transféré entre les deux particules se calcule comme suit :

$$Q_{ij} = H_{i,j} \left(T_i - T_j \right) \tag{2.16}$$

où H_{ij} représente le coefficient de conductance thermique entre les particules i et j. Ce coefficient définit la capacité des deux particules à échanger de la chaleur pour une certaine différence de température. Ce seul coefficient H_{ij} doit donc renfermer l'information concernant tous les mécanismes illustrés à la Figure 2.9. Le coeur de la TDEM réside donc dans l'élaboration de ce coefficient. Comment représenter mathématiquement chacun des mécanismes de transfert de chaleur entre deux particules ? Puis, comment déterminer la prépondérance d'un mécanisme par rapport à un autre dans une situation donnée ? Dans les prochaines sections, nous montrerons comment les auteurs se sont attaqués à ces problématiques dans la littérature scientifique.

2.3.1 Les mécanismes de transfert de chaleur

La conduction à l'intérieur de la particule (**mécanisme 1)** peut être modélisée à l'aide d'une équation différentielle radiale et assume donc une symétrie sphérique au sein de la particule [85, 86]. Dans plusieurs études de transfert de chaleur pourtant, une température uniforme est considérée au sein de la particule [80, 87]. Cette hypothèse est souvent justifiée à l'aide du nombre de Biot, dont l'équation est présentée ci-dessous, représentant le transfert thermique à la surface d'un corps par rapport à celui à l'intérieur du corps. Un nombre de Biot inférieur à 1 signifie que la conduction à l'intérieur du matériau est beaucoup plus efficace que la convection à sa surface, permettant ainsi de poser une température uniforme au sein de la particule [80].

$$Bi = \frac{h_p d}{k_p} \tag{2.17}$$

où h_p, k_p et d sont le coefficient de transfert de chaleur convectif à la surface de la particule, la conductivité thermique de la particule et son diamètre.

La conduction entre deux particules en contact **(mécanisme 2)** est calculée en utilisant une surface de contact basée sur la déformation des particules dans la DEM et la loi de Fourier [80, 85, 88]. Pour deux particules lisses et élastiques dans le vide, Batchelor et O'Brien [88]

ont montré que le coefficient de conductance thermique pouvait être calculé à l'aide de :

$$H_{ij} = 2k_{p,h}a \tag{2.18}$$

où $k_{p,h}$ est la moyenne harmonique des conductivités thermiques des deux particules, soit $k_{p,h} = \frac{2k_{p,i}k_{p,j}}{k_{p,i}+k_{p,j}}$, et a est le rayon de contact entre les deux particules qui peut être calculé à l'aide du chevauchement et de la position des centroïdes des particules, présentés à la Figure 2.7 [89]. Selon la théorie de contact de Hertz, le rayon de contact dépend du chevauchement des particules, qui dépend aussi de la force de contact appliquée sur chacune. Cette approche a été confirmée par Vargas et McCarthy [84] et Zhang et al. [90], qui ont déterminé que le transfert de chaleur dans un lit de particules dépendait du réseau de lignes de force à l'intérieur de l'empilement. Ils ont conclu que le transfert de chaleur augmentait dans un lit de particules compressé, où les forces de contact sont plus élevées.

Le rayonnement **(mécanisme 3)** est encore très peu implémenté dans les codes de DEM. Amberger et al. [91] ont suggéré d'utiliser une méthode de Monte Carlo pour lancer des rayons d'énergie, calculés selon la loi de Stefan-Boltzmann, dans différentes directions aléatoires à partir d'un point sur la surface de chaque particule. Si ce rayon rencontre une autre particule sur sa trajectoire, l'énergie est absorbée selon le coefficient d'émissivité du matériau. Sinon, le rayon est perdu. Cette manière de faire contourne le problème de définir un facteur de vue entre chaque particule. Ils ont comparé leurs résultats avec des solutions analytiques et ont obtenu un accord très prometteur. Pourtant, cette manière de faire n'est pas encore répandue et il est assez fréquent que le rayonnement soit négligé dans les études, surtout lorsque les températures en jeu sont assez faibles (en bas de 650°C environ) [92–97]. Buonanno et al. [93] ont proposé d'estimer la contribution du rayonnement par rapport à la conduction dans un lit granulaire à l'aide du ratio suivant :

$$\frac{radiation}{conduction} \approx \frac{4S\psi T_m^3 d}{k_e} \tag{2.19}$$

où S est la constante de Stefan-Boltzmann, ψ est l'émissivité des particules étudiées, T_m est la température moyenne du système, d est le diamètre de la particule et k_e est la conductivité thermique effective du matériau granulaire.

Le transfert de chaleur dû à la convection (**mécanisme 4**) peut prendre deux formes différentes : la convection forcée sous l'effet d'un fluide poussé en mouvement mécaniquement et la convection naturelle sous l'effet d'un mouvement d'un fluide engendré par une différence de masse volumique. Un flux de chaleur par convection s'ajoute au bilan de chaleur sur la particule i sous la forme d'un flux additionnel pris en compte par le terme $Q_{S,i}$ dans l'Équa-

tion 2.15. Ce flux convectif sur la particule i peut être calculé selon la loi de refroidissement de Newton (Équation 2.13) adaptée de telle sorte que :

$$Q_{conv,i} = H_{conv,i} A_i (T_f - T_i) \tag{2.20}$$

où $Q_{conv,i}$, $H_{conv,i}$, A_i et T_f sont, respectivement, le flux convectif affecté à la particule i, le coefficient de transfert de chaleur convectif, la surface de la particule i exposée au fluide et la température du fluide. Le coefficient de transfert convectif $H_{conv,i}$ varie selon s'il s'agit d'une convection naturelle ou forcée. Il peut être calculé selon des corrélations basées sur les nombres de Nusselt (Nu), de Prandtl (Pr), de Rayleigh (Ra), de Grashof (Gr) et de Reynolds particulaire (Re_p) [80, 85] définis ci-dessous :

$$H_{conv,i} = \frac{Nu \cdot k_f}{d} \tag{2.21}$$

avec

$$Nu = f(Pr, Ra, Re_p) \tag{2.22}$$

$$Pr = \frac{\mu_f C_f}{k_f} \tag{2.23}$$

$$Ra = Pr \cdot Gr \tag{2.24}$$

$$Gr = \frac{g\beta \Delta T L_c^3 \rho_f^3}{\mu_f^2} \tag{2.25}$$

$$Re_p = \frac{\rho_f U d}{\mu_f} \tag{2.26}$$

où k_f, ρ_f, U et μ_f représentent respectivement la conductivité thermique, la masse volumique, la vitesse relative et la viscosité dynamique du fluide autour de la particule. Pour le nombre de Grashof, β est le coefficient de dilatation du gaz que l'on peut estimer à $\frac{1}{T_m}$ pour un gaz parfait, ΔT est la différence de température dans l'espace étudié et L_c est une longueur caractéristique.

La contribution de la convection forcée prend donc de l'importance lorsque le fluide a une vitesse élevée et nécessite, la plupart du temps, le couplage de la TDEM avec un logiciel de CFD (Computational Fluid Dynamics) afin de connaître la vitesse et la température du fluide autour de chaque particule [98, 99].

Pour la convection naturelle, le nombre de Grashof (Équation 2.25), représentant le ratio des

forces de flottabilité sur les forces visqueuses, est souvent utilisé afin d'estimer la contribution de ce mécanisme. Un nombre de Grashof élevé signifie que le fluide en présence risque d'avoir un mouvement non négligeable du bas vers le haut, ce qui pourrait influencer le transfert de chaleur dans le lit de particules. Arpaci et al. [100] ont démontré que la convection naturelle pouvait être négligée lorsque le nombre de Grashof était en dessous de 2500.

Finalement, nous avons gardé la conduction dans le fluide stagnant entre les particules (**mécanisme 5**) pour la fin, car il a davantage attiré notre attention [7]. En effet, aussitôt que les particules ne sont plus dans le vide, mais dans un fluide, la question se pose à savoir si la chaleur se propage seulement par conduction dans le contact solide, représentée par l'équation de Batchelor et O'Brien (Équation 2.18) ou également par conduction dans les poches d'air immobile entre les particules. Il n'y a pas de consensus dans la littérature à savoir dans quelle situation et de quelle manière il convient de représenter ce mécanisme, qui fera donc l'objet d'une revue plus spécifique dans la section suivante.

2.3.2 L'importance du gaz interstitiel

À première vue, lorsqu'un lit de particules solides est placé dans un gaz, dont la conductivité thermique est beaucoup plus faible que celle des solides [8], la conduction dans ce gaz ne devrait pas être importante par rapport au transfert de chaleur total. Cependant, Swift [101], Moscardini et al. [102] et Shapiro et al. [103] ont démontré dans leurs études expérimentales [101,103] et numériques [102] respectives qu'une diminution de la pression du gaz interstitiel diminuait la conductivité thermique effective du lit granulaire dans tous les matériaux étudiés. Cela confirme que le gaz, bien que beaucoup moins conducteur, influence bien le transfert global. Si le fluide interstitiel est un liquide, il devient évident que ce chemin doit être considéré dans le calcul du transfert de chaleur.

Afin d'étudier la dualité de conduction entre le solide et le fluide, il convient de définir la variable κ, utilisée par plusieurs auteurs, représentant le ratio de la conductivité thermique de la particule sur la conductivité thermique du fluide, tel que :

$$\kappa = \frac{k_p}{k_f} \tag{2.27}$$

De manière instinctive, il est normal de conclure que la conduction dans le fluide peut seulement être négligée si la valeur de κ est très élevée. Qi et Wright [104], Argento et Bou-

7. Façon polie pour dire qu'il nous a fait perdre beaucoup de temps et nous casser la tête plusieurs fois...
8. C'est d'ailleurs pour profiter de cette très faible conductivité thermique que les gaz sont utilisés comme isolants dans des fenêtres ou dans plusieurs matériaux de construction

vard [105], Liang et al. [106], et Zhou et al. [94] ont tenté de déterminer cette valeur seuil de κ précise et ont tous trouvé des valeurs différentes, variant entre 1000 et 4000. En plus de ne pas s'entendre sur le domaine d'applicabilité de ce mécanisme, nous avons trouvé dans la littérature deux manières de le calculer différentes.

Le premier modèle définit le coefficient de conductance total entre deux particules (Équation 2.16) comme la somme du coefficient de Batchelor et O'Brien (Équation 2.18), pour représenter la conduction solide, et un coefficient de conductance dans le fluide égal à :

$$H_f = k_f \frac{A_f}{L_f} \tag{2.28}$$

où A_f est une aire de contact caractéristique perpendiculaire au transfert de chaleur et L_f est une longueur caractéristique dans la même direction que le flux de chaleur. Ce modèle de TDEM a par la suite été jumelé à un code de DEM par Komossa et al. [85] et utilisé pour étudier le transfert de chaleur dans des billes de verre dans un cylindre rotatif.

En parallèle, Cheng et al. [96] ont développé un modèle de TDEM plus complexe. Ils utilisent toujours l'équation de Batchelor et O'Brien (Équation 2.18) pour modéliser le transfert solide. Toutefois, leur coefficient de conductance dans le fluide se calcule comme suit :

$$H_f = \int_{r_{sij}}^{r_{sf}} \frac{2\pi r dr}{l_s \cdot (1/k_{pi} + l/k_{pj}) + l_g/k_f} \tag{2.29}$$

où r_{sij}, r_{sf}, l_s et l_g sont des paramètres géométriques pouvant être calculés à l'aide de la porosité locale du lit granulaire ainsi que des dimensions de polyèdres de Voronoi bâtis autour de chaque particule. Ce modèle de TDEM a par la suite été utilisé, parfois tel quel et parfois avec quelques modifications, et validé par plusieurs auteurs [86, 98, 99, 104, 107].

La plupart des auteurs qui ont utilisé ces deux modèles distincts ont validé leurs résultats numériques à l'aide d'expériences, laissant penser que les deux définitions de H_f présentées ci-dessus donnent de bons résultats, dans certaines gammes d'opérations.

2.3.3 La validation des modèles existants

Afin de valider leurs modèles de transfert de chaleur TDEM, plusieurs auteurs ont recours au calcul de la conductivité thermique effective k_e d'un lit de particules statique. En effet, la conductivité thermique effective d'un lit de particules solides (sous la forme de billes) peut être mesurée expérimentalement selon une méthode en régime transitoire [101, 108, 109] ou en régime permanent [110]. De plus, plusieurs corrélations, basées sur des développements analytiques ou sur des analogies à d'autres phénomènes de transport, peuvent aussi être

utilisées pour estimer cette conductivité effective k_e. Van Antwerpen et al. [111] ont effectué une revue exhaustive de ces corrélations disponibles dans la littérature et les séparent en corrélations considérant seulement le transfert dans le gaz, dans le gaz et le solide, puis avec l'effet du rayonnement.

Ainsi, plusieurs auteurs de modèles de TDEM utilisent des données expérimentales de k_e répertoriées dans la littérature pour valider leurs modèles. Comme exemples, Qi et Wright [104] et Zhou et al. [99] ont utilisé les données expérimentales rassemblées par Cheng et al. [96] pour valider leurs modèles de TDEM. Cette comparaison est rapportée à la Figure 2.10 et montre un très bon accord entre les prédictions numériques et les données expérimentales.

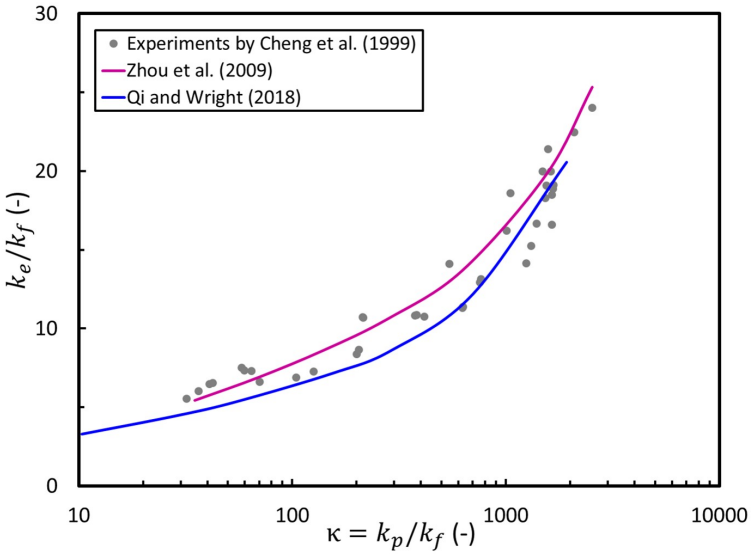


Figure 2.10 La comparaison de la conductivité thermique effective prédite à l'aide de deux modèles de TDEM présentés dans la littérature avec des données expérimentales montre un très bon accord pour des valeurs de κ entre 30 et 2500 environ. Les points expérimentaux et les points utilisés pour tracer les courbes numériques sont tirés de [96,99] et [104], respectivement.

Cependant, il convient de souligner ici que les données expérimentales répertoriées par Cheng et al. [96] se limitent à un faible intervalle de valeurs de κ et que le portrait global diffère énormément [9]. Ainsi, si l'on cherche dans la littérature pour une plus grande quantité de données expérimentales, notamment à des valeurs de κ plus faibles et plus élevées, nous obtenons le graphique présenté à la Figure 2.11. Sur cette figure, nous avons rapporté les données expérimentales que nous avons recensées [93, 96, 101, 109, 110, 112–114] et y avons ajouté les prédictions des modèles de transfert thermique de Qi et Wright [104] (très similaire à celui de Zhou et al. comme le démontre la Figure 2.10) et de Komossa et al. [85]. Chacun

9. Point sur lequel les auteurs des modèles présentés à la Figure 2.10 n'insistent pas nécessairement...

de ces modèles utilise une définition différente de H_f présentée à la section précédente. Nous avons extrapolé les données du modèle de Qi et Wright (ligne pointillée noire) en utilisant une régression combinant une fonction exponentielle et linéaire dont l'équation est $k_e/k_f = 6.87 - 3.89 \times (0.988)^{\kappa} + 7.14 \times 10^{-3}\kappa$ (avec R^2=0.999). Pour le modèle de Komossa et al. [85], nous avons implémenté leur modèle dans la plateforme libre d'accès LIGGGHTS utilisée dans cette thèse et avons donc généré les points nous-mêmes (ligne pointillée bleue).

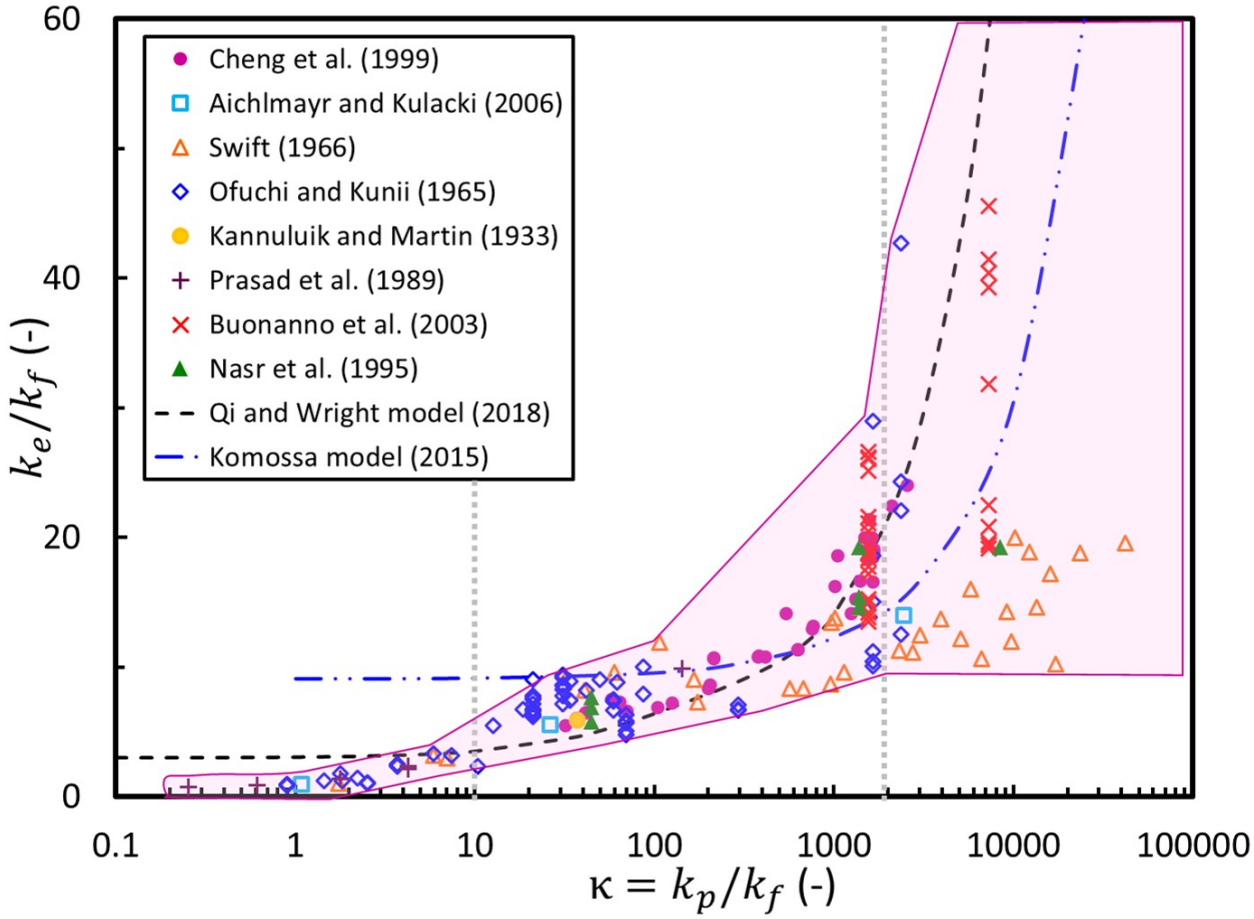


Figure 2.11 Pour des valeurs de κ plus élevées, les données expérimentales de la littérature présentent une variabilité significative dans les valeurs de conductivité thermique effective rapportées. Les modèles de TDEM existants semblent surestimer plusieurs de ces données expérimenatles.

La première chose qu'il convient de soulever à la Figure 2.11 est que la variabilité des résultats expérimentaux (démontrée par l'enveloppe en rose pâle) est beaucoup plus grande pour des valeurs élevées de κ que pour de faibles valeurs. En effet, pour une valeur de κ d'environ 10 000, les données de la littérature rapportant le ratio de la conductive thermique effective

sur la conductivité du fluide (k_e/k_f) s'échelonnent entre environ 10 et 45. Il semble que les données expérimentales se répartissent entre deux tangentes au-delà d'environ $\kappa = 1000$, l'une qui continue à s'élever de manière quasi exponentielle, et l'autre qui demeure plus ou moins constante. Cette variabilité est étonnante et aucun auteur n'a pu fournir d'explication solide à son sujet.

Ensuite, la Figure 2.11 montre que les deux modèles de TDEM existants [85, 104] semblent incapables de représenter les résultats de k_e/k_f à des valeurs de κ élevées et qui demeurent dans la partie inférieure de la zone rose (c'est-à-dire les triangles oranges évidés [101] et le triangle vert plein [114]). À l'autre extrémité du spectre, pour de faibles valeurs de κ, un modèle comme celui proposé par Komossa et al. [85] semble incapable de représenter la décroissance quasi linéaire des résultats expérimentaux en fonction du log de κ et affiche plutôt un plateau.

Certains auteurs ont tenté d'expliquer la grande variabilité des résultats expérimentaux à des valeurs élevées de κ, sans toutefois être capables d'appuyer leurs hypothèses. Zhou et al. [94] ont suggéré que cette variabilité était causée par des tailles de particules utilisées dans les expériences différentes. Cependant, il ne semble pas y avoir de consensus dans la littérature concernant l'impact du diamètre des particules sur la conductivité thermique effective. En effet, Zhou et al. [94], Sangros et al. [115], Gan et al. [107] (numérique) ainsi que Swift [101] et Nasr et al. [114] (expérimental) ont conclu que la conductivité thermique effective augmentait avec le diamètre de la particule. Par contre, Gui et al. [95] (numérique) ont trouvé l'inverse. Ces résultats contradictoires sont intéressants et démontrent un manque dans la littérature, mais ne permettent pas, par le fait même, d'expliquer solidement la variabilité des résultats expérimentaux.

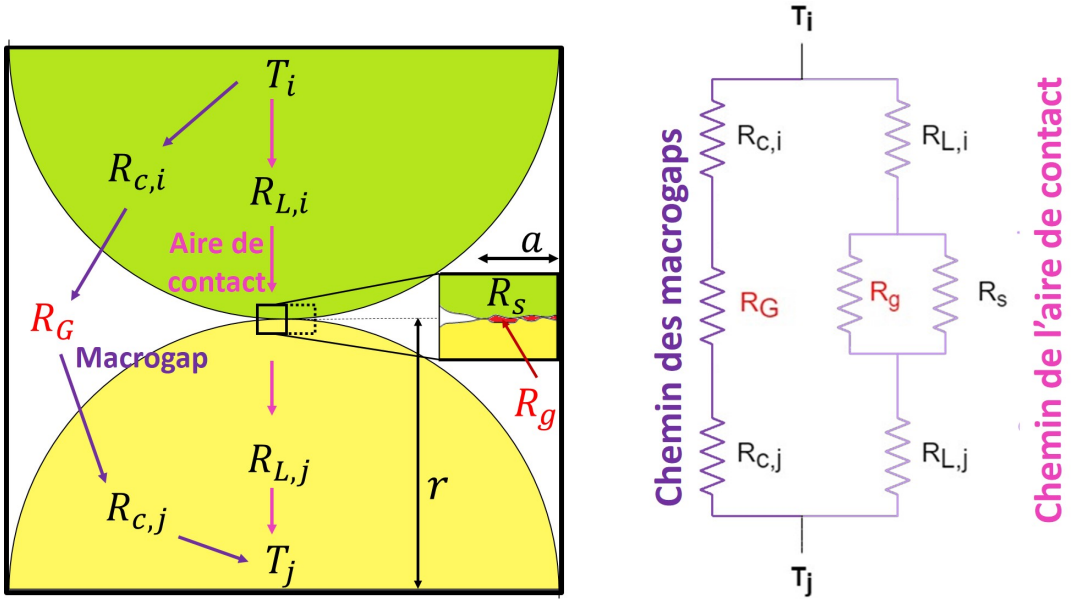
Dans leur travail, Buonanno et al. [116] ont relevé le fait que les valeurs de conductivité thermique effective expérimentales de billes d'aluminium étaient très variables selon les sources consultées. Ils posent l'hypothèse que cette dispersité soit due à un oxyde se formant à la surface des billes d'aluminium, sans pouvoir confirmer ou infirmer cette hypothèse. Leurs observations démontrent qu'il semble se passer un phénomène à la surface des particules qui influence le transfert de chaleur, spécialement lorsque les valeurs de κ sont élevées, et qui n'est pas encore pris en compte dans les modèles.

Dans leur travail analytique portant sur l'impact du contact solide entre les deux particules sur le transfert de chaleur, Luzi et al. [117] ont soulevé le fait que l'hypothèse de particules lisses était très souvent posée dans les études, sans toutefois être validée, malgré le fait que la plupart des matériaux industriels ne sont pas lisses. Dans cet ordre d'idée, Buonanno et al. [116] ont ensuite montré expérimentalement que la conductivité thermique effective de

billes d'aluminium ou d'acier plus rugueuses était diminuée de manière significative (croix rouges sur la Figure 2.11). Ces résultats suggèerent que la rugosité de surface des particules a un impact sur le transfert de chaleur, et que cet impact pourrait peut-être bien expliquer la variabilité des résultats expérimentaux observés à hautes valeurs de κ. À notre connaissance, il n'existe que deux modèles de TDEM, suggérés par Zhang et al. [90] et par Van Lew [92], qui considèrent la rugosité de surface. Grâce èa leur modèle, Zhang et al. [90] ont confirmé que la conductivité thermique effective de particules avec une conductivité thermique k_p de 100 W/m.K diminuait avec la rugosité. Cependant, ils n'ont pas considéré l'impact du gaz interstitiel, ce qui limite leurs résultats à des cas sous vide. Dans sa thèse, Van Lew [92] présente bien un modèle de TDEM considérant la rugosité de surface. Toutefois, il stipule plus tard que n'ayant pas les propriétés expérimentales de rugosité des particules d'intérêt dans sa thèese, la majorité de ses travaux s'est effectuée sans considérer la rugosité. En effet, les propriétés de surface nécessaires pour caractériser une bille d'un certain matériau se mesurent difficilement et sont très rarement rapportées dans les travaux de la littérature.

Finalement, Bahrami et al. [118] ont proposé un développement analytique qui représente le transfert de chaleur entre deux particules à l'aide d'un circuit de résistance thermique, de manière analogue à un circuit électrique (Figure 2.12), et qui consièdere la rugosité de surface. Le coefficient de conductance totale H_{ij} peut ainsi être évalué en prenant l'inverse de la résistance totale équivalente du circuit représenté à la Figure 2.12(b). Selon ces auteurs, la chaleur peut se propager d'une particule à l'autre selon deux chemins principaux en parallèle : le chemin des macrogaps qui considère la conduction dans le fluide et le chemin de l'aire de contact qui considère la résistance au contact solide (Figure 2.12). Au niveau du contact solide, Bahrami et al. [118] font la distinction entre **l'aire de contact nominale**, qui est calculée à l'aide du rayon de contact a entre les particules, et **l'aire de contact réelle**, qui est la somme des aires de contact des aspérités à la surface se touchant réellement (et qui dépend donc de la rugosité). Ce sont ces vrais contacts qui sont pris en considération dans le calcul de la conduction solide au point de contact, alors que les poches d'air emprisonnées entre les aspérités sont prises en compte èa l'aide d'une conduction dans le fluide. Le nombre, la profondeur et la forme des aspérités de surface dépendent de la microdureté W du matériau ainsi que du procédé de fabrication. Les variables utilisées dans la littérature pour caractériser l'état de la surface d'un matériau sont la rugosité σ et la pente de la surface τ [119].

Le circuit proposé par Bahrami et al. [118] comprend cinq résistances différentes (Figure 2.12). Sur le chemin des macrogaps, on retrouve la résistance de conduction solide (R_c) en série avec la résistance de conduction dans le fluide (R_G). Le long du chemin par l'aire de contact, on retrouve la résistance à la constriction ou à l'expansion (R_L) en série avec les résistances du microcontact solide (R_s) et de conduction dans le fluide dans les microgaps



(a) (b)

Figure 2.12 Représentation des résistances thermiques sur les deux chemins en parallèle du transfert de chaleur entre les particules i et j en contact (a) et réseau de résistances thermiques associé (b). Les résistances en rouge R_G et R_g font référence à des résistances de conduction dans la phase gazeuse alors que toutes les autres résistances font référence à la phase solide. Toutes les résistances thermiques sont exprimées en K/W.

(R_g), les deux dernières résistances étant en parallèle. Dans leur travail, Bahrami et al. [118] dérivent des équations pour toutes ces résistances, excepté la résistance de conduction solide R_c. En effet, ces auteurs supposent que la conduction dans le solide est beaucoup plus rapide que celle dans le fluide, permettant de négliger R_c devant R_G dans le chemin des macrogaps. Les équations de chaque résistance seront détaillées dans les Chapitres 5 et 6.

Ainsi, le modèle théorique présenté par Bahrami et al. [118] considère la rugosité de surface à travers les résistances R_s et R_g au niveau du contact solide (Figure 2.12) et semble être un bon candidat pour tester l'effet de la rugosité sur la conductivité thermique de différents matériaux granulaires. Cependant, à part Van Lew [92] dont nous avons discuté précédemment, nous ne connaissons personne qui ait tenté d'implémenter ce modèle dans un code de TDEM. Il est donc impossible de savoir à ce jour si les équations développées par Bahrami et al. [118] décrivant toutes les résistances thermiques représentent bien la réalité et permettent d'expliquer la variabilité des résultats expérimentaux des conductivités thermiques effectives.

Validation de la TDEM en dynamique

La majorité des travaux discutés jusqu'à maintenant concernant un modèle de TDEM ont validé leurs résultats en statique dans des lits de particules et ont calculé la conductivité thermique effective. Dans un lit de particules en mouvement, comme c'est le cas dans un cylindre rotatif, certains auteurs suggèrent que le coefficient de conductance totale H_{ij} doit être calculé différemment. En effet, Yang et al. [98] et Zhou et al. [94] suggèrent de diviser l'apport du contact solide en deux parties : un échange lorsque les particules sont longtemps en contact (représenté avec l'équation de Batchelor et O'Brien [88]) et un échange instantané lors d'une collision qui dépend du temps de contact t_c, dont la conductance $H_{col,ij}$ se calcule ainsi :

$$H_{col,ij} = c' \frac{\pi a^2 t_c^{-1/2}}{(\rho_i C_i k_{p,i})^{-1/2} + (\rho_j C_j k_{p,j})^{-1/2}} \tag{2.30}$$

où c' est un coefficient déterminé par un ensemble de corrélations et t_c est le temps de contact entre les deux particules.

Afin de valider ces modèles en dynamique, il existe beaucoup moins de données expérimentales. En effet, la prise de mesure de température à l'intérieur d'un équipement en mouvement est beaucoup plus complexe qu'en statique pour déterminer la conductivité thermique effective. Chaudhuri et al. [120] présentent l'évolution en temps d'une température moyenne, obtenue en moyennant les valeurs mesurées par dix thermocouples insérés dans un lit rotatif à intervalles réguliers, en stoppant la rotation à chaque fois. Ils ont observé le comportement

de particules d'alumine et de silice. Komossa et al. [85] présentent l'élévation de températures mesurées expérimentalement à différentes hauteurs dans un four rotatif rempli de billes de verre, et pour différentes vitesses de rotation du cylindre. Finalement, Nafsun et al. [121] recensent l'homogénéisation de la température dans un cylindre rotatif dans lequel des particules de sable de quartz de deux températures initiales sont insérées. Ils utilisent des mesures de température effectuées par plusieurs thermocouples insérés à différentes hauteurs dans le cylindre.

2.3.4 Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires de tailles différentes

Enfin, il convient de souligner que la totalité des travaux présentés jusqu'à date dans la revue de littérature concernant le transfert thermique étudie des systèmes de particules monodisperses, c'est-à-dire des particules d'une seule taille. Le nombre de recherches combinant le transfert de chaleur et des particules de tailles différentes est beaucoup plus limité. Nafsun et al. [122] ont étendu leur méthode expérimentale pour étudier l'homogénéisation dans un lit rotatif avec des particules différentes, et donc où une ségrégation radiale avait lieu. Ils ont conclu que la ségrégation générait des gradients de température élevés dans le cylindre et des temps d'homogénéisation plus longs. À notre connaissance, aucun autre travail n'a repris ces travaux pour les pousser plus loin.

Du côté numérique, seuls deux auteurs ont tenté d'étendre leurs modèles de TDEM pour des particules bidisperses. Gan et al. [107] ont présenté des équations pour modéliser le transfert de chaleur dans des ellipses de tailles différentes. Toutefois, tous les résultats qu'ils présentent par la suite concernent des mélanges monodisperses. Leurs travaux ne sont donc pas révélateurs concernant le transfert de chaleur dans des milieux bidisperses. Ils ont par contre conclu que les ellipses avaient des transferts de chaleur plus efficaces que les sphères grâce à leurs nombres de contacts plus élevés. Finalement, tout récemment, Chen et al. [123] ont étendu un modèle de TDEM en bidisperse, mais ont limité leur recherche à des lits de particules statiques. Ils ont néanmoins observé un impact certain de la composition et de la fraction solide des milieux granulaires sur la conductivité thermique effective.

CHAPITRE 3 SYNTHÈSE ET ORGANISATION DE LA THÈSE

3.1 Synthèse

Ainsi, la revue de littérature démontre que plusieurs recherches ont déjà été effectuées afin d'analyser le comportement des matériaux granulaires dans un tambour rotatif. Les mécanismes de ségrégation par taille et par masse volumique, ainsi que les différents patrons de ségrégation, ont été étudiés et confirmés de manières expérimentale et numérique. Il a été démontré que ces patrons de ségrégation favorisent l'apparition de zones riches en un certain type de particules et réduisent ainsi l'homogénéité globale du lit granulaire. La majorité de ces études sur la ségrégation se sont penchées sur des particules sphériques, alors que plusieurs industries doivent faire face à des particules aux formes irrégulières : des morceaux de pneu, des copeaux de bois, des levures, des comprimés pharmaceutiques... Selon la littérature, les arêtes des formes non sphériques semblent jouer un rôle important dans la transmission d'énergie entre les particules, influençant les patrons de ségrégation. Il n'est pas encore certain si les mécanismes connus expliquant la ségrégation radiale dans les particules sphériques peuvent être appliqués tels quels aux particules non sphériques. Cependant, il ne fait aucun doute selon la littérature que, autant dans les particules sphériques que non sphériques, le phénomène de ségrégation est un phénomène d'une grande importance qui survient rapidement dans tout équipement mettant en mouvement des particules solides ayant des propriétés différentes, ce qui est presque toujours le cas en industrie.

Pourtant, nous avons vu que la quasi-totalité des études portant sur le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires ne concernait que des particules identiques. De plus, même au niveau de ces particules monodisperses, il ne semble pas y avoir unanimité dans la littérature par rapport aux modèles à utiliser. Alors que les modèles de la DEM sont bien établis dans la littérature, comme nous l'avons vu, il existe plusieurs modèles afin de représenter le transfert de chaleur, modèles que l'on regroupe sous l'acronyme TDEM (thermal discrete element method). Ces modèles semblent tous avoir des gammes de validité précises basées sur le ratio de conductivité thermique de la particule sur celle du fluide environnant et chaque auteur développe sa propre version de TDEM adaptée à la situation étudiée, ce qui rend la littérature complexe et confuse. Il n'existe pas de modèle de TDEM universel qui s'adapte par lui-même selon les propriétés des particules. De plus, malgré le nombre élevé de modèles de TDEM potentiels, nous avons vu qu'aucun de ces modèles ne semblait en mesure d'expliquer la grande variabilité des résultats expérimentaux mesurant la conductivité thermique effective de lits de particules ayant une conductivité thermique très élevée.

En ce qui concerne la bidispersité, à notre connaissance, seulement deux auteurs se sont penchés sur le cas d'un transfert de chaleur dans un mélange de particules de tailles différentes. Ces deux auteurs ont notamment relevé le manque de données expérimentales pour valider les modèles dans des mélanges bidisperses de particules et l'importance que le ratio de taille pouvait avoir sur l'efficacité du transfert de chaleur. Ainsi, il y a un manque dans la littérature concernant les informations pouvant aider à comprendre l'évolution de température dans un four rotatif chauffé à la paroi dans lequel se passe un phénomène de ségrégation.

3.2 Sous-objectifs

Ainsi, afin d'atteindre notre objectif principal précédemment énoncé, qui est de **quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif**, nous suggérons les trois sous-objectifs définis ci-dessous.

- Sous-objectif 1 : Développer un modèle de transfert de chaleur TDEM en monodisperse, qui prend en compte les propriétés de surface des particules, notamment la rugosité, et qui s'applique à toute particule sur une vaste gamme de conductivité thermique (Article 1)
- Sous-objectif 2 : Quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans différents lits de particules ségréguées dans un cylindre rotatif (Article 2)
- Sous-obectif 3 : Différencier la ségrégation granulaire dans un cylindre rotatif entre des particules sphériques et des particules non sphériques (Article 3)

3.3 Organisation de la thèse

Chaque sous-objectif présenté ci-dessus représente donc un chapitre de cette thèse. Avant de se lancer dans le coeur du sujet, nous commencerons avec une méthodologie générale (Chapitre 4) qui présentera les plateformes et les codes numériques utilisés tout au long de ce projet, les géométries étudiées ainsi que les grandes hypothèse posées pendant ce projet. L'organisation de la thèse est schématisée à la Figure 3.1, où chaque article est résumé à l'aide de quelques mots-clés.

Ainsi donc, le premier article présenté au Chapitre 5 examine de plus près les mécanismes de transfert de chaleur dans un matériau granulaire, étudiant le transfert à l'échelle du contact entre deux particules. À l'aide d'expériences réalisées en laboratoire dans des lits de particules statiques, nous avons développé un nouveau modèle de transfert de chaleur complet, applicable à une beaucoup plus grande gamme de particules, notamment celles avec des conductivités thermiques plus faibles et plus élevées et celles ayant une forte rugosité de surface. Étant donné que ces paramètres n'étaient pas très connus dans la littérature, nous avons

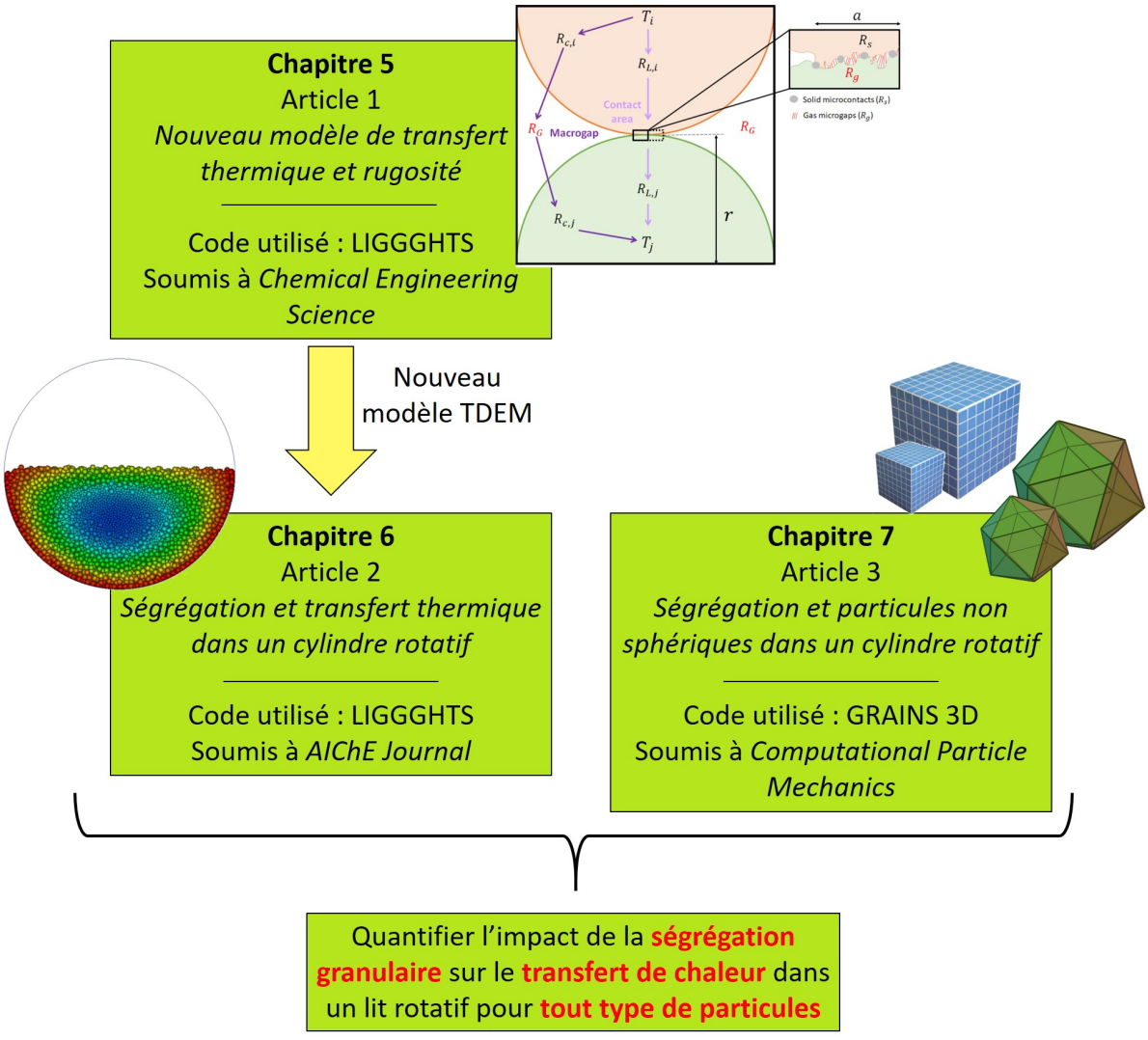


Figure 3.1 Schématisation de l'organisation de la thèse avec les trois articles qui y sont présentés, ainsi que leurs liens pointant vers l'objectif général.

d'abord limité notre étude aux cas monodisperses de particules, donc avec la même taille, afin de pouvoir comparer notre modèle avec plusieurs données de la littérature, expérimentales, numériques et provenant de corrélations. Nous avons implémenté notre modèle TDEM dans la plateforme libre d'accès LIGGGHTS qui sera présentée au Chapitre 4.

Le modèle développé et validé dans le premier article (Chapitre 5) est ensuite utilisé et étendu dans le deuxième article (Chapitre 6). En effet, dans ce chapitre, nous combinons les notions de ségrégation granulaire (bien connues dans la littérature) et celles de transfert de chaleur (étudiées dans le premier article) afin d'étudier le transfert de chaleur dans différents lits de particules ségréguées. Les patrons de ségrégation étudiés sont tous obtenus de manière naturelle à l'aide de simulations dans des cylindres rotatifs. Nous avons d'abord modifié notre modèle de transfert de chaleur afin qu'il soit capable de représenter des cas bidisperses, en prenant soin de le valider avec nos propres mesures expérimentales. Puis, nous avons utilisé ce modèle afin d'étudier les profils de température dans un cylindre rotatif dans lequel différents patrons de ségrégation sont présents.

Finalement, le Chapitre 7 traite de ségrégation granulaire non sphérique dans un cylindre rotatif, sans transfert de chaleur. Nous sommes d'avis que le transfert de chaleur dans des particules non sphériques nécessiterait encore beaucoup de travail afin d'être simulé adéquatement, les points de contact et les surfaces d'échange étant très irréguliers pour des particules non sphériques. Le troisième article représente donc un premier pas vers la combinaison de tous ces aspects ensemble : la ségrégation, le transfert de chaleur et la non-sphéricité. Les résultats de ce travail ont été générés par un code spécialisé dans le traitement de particules non sphériques, Grains3D, créé par le professeur Anthony Wachs. Ce code sera présenté à la Section 4.1. Afin d'apprendre à utiliser ce code, l'auteure de cette thèse s'est envolée vers Vancouver à l'Université de la Colombie-Britannique où enseigne le professeur Wachs [1]. Ce séjour a permis une belle collaboration et la rédaction du troisième article.

Ainsi, les deux premiers articles, traitant du transfert de chaleur, ont été réalisés à l'aide du code LIGGGHTS, un code libre d'accès géré par une compagnie se situant en Autriche [2]. Ce code est également détaillé dans la Section 4.1. Malheureusement, le code Grains3D ne comportait pas de module pour effectuer le transfert de chaleur, alors que LIGGGHTS, au début de ce projet, ne permettait pas la modélisation de particules non sphériques. Cela explique l'utilisation de deux codes différents, tous deux utilisés à la base pour résoudre la dynamique de matériaux granulaires. Au courant de mon projet, les concepteurs de LIGGGHTS ont

1. et aussi parce que j'avais bien besoin de changer d'air à ce moment de ma vie et que j'ai pu profiter de cette incroyable opportunité ! Merci encore à mes directeurs de l'avoir permis !

2. où j'ai également eu la grande chance de me rendre afin de suivre une formation sur l'utilisation du code

rajouté un module pour traiter des particules non sphériques. Aujourd'hui, il serait donc possible de traiter l'entièreté de cette thèse uniquement avec LIGGGHTS, ce qui n'était pas le cas il y a.... 6 ans !

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

Dans ce chapitre, nous présentons certaines notions de méthodologie communes à plusieurs chapitres de cette thèse. Il est évident que la méthodologie spécifique à chaque article est présentée dans le chapitre associé. Ici, nous présentons rapidement les deux plateformes numériques utilisées pour effectuer nos simulations (Section 4.1), les géométries rencontrées tout au long de la thèse (Section 4.2), puis les grandes hypothèses ou cas de figure utilisés (Section 4.3).

4.1 Plateformes et codes numériques

Comme présenté dans la revue de littérature, plusieurs codes numériques ont vu le jour dans les dernières décennies afin de modéliser la dynamique des matériaux granulaires. Pour réaliser cette thèse, notre choix s'est arrêté sur les plateformes LIGGGHTS et Grains3D.

4.1.1 La plateforme LIGGGHTS

La plateforme LIGGGHTS (LAMMPS Improved for General Geometry and Granular Heat Transfer Simulations) est un logiciel libre d'accès de simulations de particules discrètes à l'aide de la DEM (Discrete Element Method). La plateforme LIGGGHTS a été développée en Autriche et est présentement utilisée par un bon nombre de chercheurs et d'industriels à travers le monde afin de répondre à des problématiques qui traitent de matériaux granulaires. Cette grande communauté d'utilisateurs internationaux a d'ailleurs motivé notre choix pour cette plateforme, étant donné qu'elle offre maintenant une large banque de questions et de réponses sur des forums en ligne, ainsi qu'une bonne documentation. La plateforme LIGGGHTS est également très rapide et se prête bien au calcul en parallèle, ce qui est nécessaire pour effectuer des simulations avec un grand nombre de particules. Nous avons utilisé LIGGGHTS pour générer les résultats des deux premiers articles traitant du transfert de chaleur.

La simulation numérique en général comporte trois grandes étapes qui sont (1) le prétraitement, (2) la simulation et (3) le post-traitement. La plateforme LIGGGHTS sert à effectuer la simulation seulement. Les étapes de prétraitement et de post-traitement nécessitent quant à elles l'utilisation de quelques autres logiciels, ainsi qu'illustré à la Figure 4.1. Pour fonctionner, le code LIGGGHTS a besoin de deux items en entrée : un maillage surfacique pour établir la géométrie avec laquelle les particules peuvent entrer en collision, ainsi qu'un script

d'entrée détaillant toutes les conditions de la simulation, notamment les propriétés des particules, les solveurs à utiliser, les dimensions du domaine de simulation, les caractéristiques des conditions frontières (fixes ou périodiques), les fichiers de sortie désirés... Ces étapes font partie du prétraitement. Nous avons choisi le logiciel SALOME afin de générer les maillages, car ce dernier est simple à utiliser et libre d'accès également. À la sortie de la simulation, le code LIGGGHTS génère des fichiers texte à une certaine fréquence dans le temps contenant l'information que nous avons ciblée dans le script d'entrée. Dans notre cas, les informations désirées étaient la position, la vitesse, la vitesse angulaire et la température de chaque particule. Viennent ensuite les étapes de post-traitement. Nous avons ensuite utilisé le langage de programmation Python afin d'extraire de ces fichiers textes des métriques analysables. Pour ce faire, plusieurs scripts automatiques Python ont été élaborés. Le logiciel Excel était préféré pour créer les graphiques. Les fichiers de sortie de LIGGGHTS peuvent également être lus par le logiciel ParaView, spécialisé dans la visualisation 3D de données numériques. C'est grâce à ParaView que cette thèse est davantage colorée qu'un long fichier de chiffres en noir et blanc. Finalement, il est aussi nécessaire de connaître le langage BASH, car LIGGGHTS ne possède pas d'interface graphique et la communication avec le logiciel s'effectue à travers le terminal et les lignes de commande.

Ainsi, l'utilisation de LIGGGHTS et l'analyse numérique qui sera présentée dans cette thèse requièrent l'appropriation de plusieurs autres logiciels et langages [1]. C'est dans la plateforme LIGGGHTS que nous implémenterons notre propre code de TDEM, basé sur les travaux de Bahrami et al. [118], afin d'obtenir tous les résultats en thermique des Articles 1 et 2.

4.1.2 Le code Grains3D

Le code Grains3D représente une alternative à LIGGGHTS. Il s'agit d'un autre code servant à résoudre les équations de la DEM et d'ainsi obtenir la position et la vitesse de chaque particule dans le système. Ce code n'est pas libre d'accès et a été développé par le professeur Anthony Wachs, travaillant présentement à l'Université de la Colombie-Britannique. Il est utilisé dans cette thèse principalement pour simuler des particules non sphériques détenant des coins et des arêtes, particularité pour laquelle il a été développé. L'utilisation de Grains3D s'apparente énormément à LIGGGHTS, dans le sens que les mêmes étapes de prétraitement et de post-traitement présentés à la Figure 4.1 doivent être réalisées. Évidemment, les scripts d'entrée ne sont pas les mêmes et les fichiers de sortie ne se ressemblent pas, ce qui a nécessité la rédaction de scripts Python de post-traitement différents.

1. et multiplient ainsi la possibilité et l'apparition inévitable de ce qu'on appelle si affectueusement des *bugs* ! !

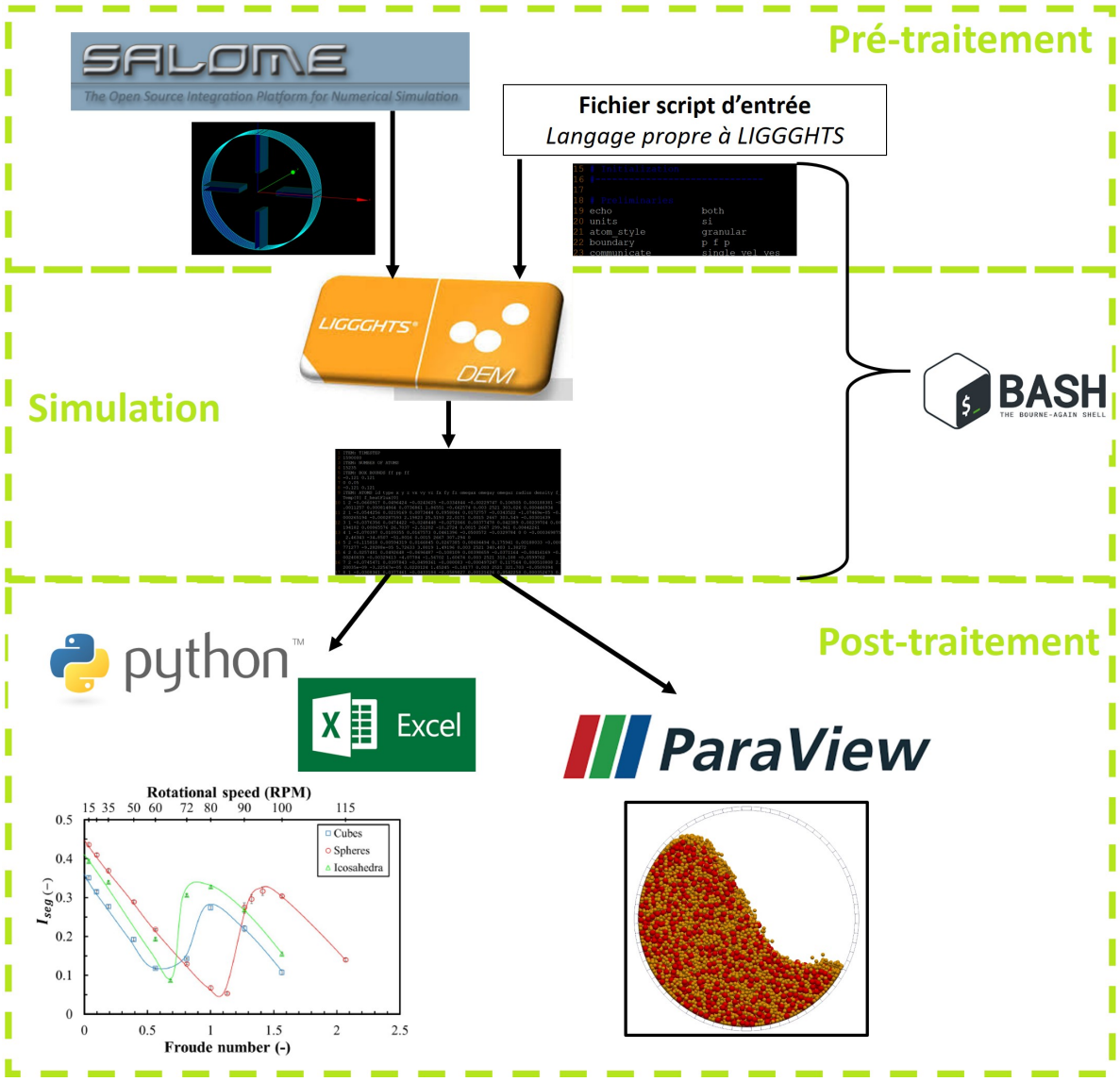


Figure 4.1 L'utilisation de la plateforme LIGGGHTS qui simule la DEM nécessite la compréhension des logiciels SALOME (génération de maillages), Python (calculs de post-traitement), Paraview (visualisation des résultats) et Excel (création de graphiques) ainsi que la connaissance du langage BASH, car la majorité du travail s'effectue sur Linux en utilisant les lignes de commande.

4.2 Géométries utilisées et tests de validation

Lorsque les trois étapes de la simulation numérique telles qu'illustrées à la Figure 4.1 sont effectuées, des résultats numériques sont obtenus. Afin de savoir si ces résultats sont fiables et représentent bien ce que nous voulons étudier, il est nécessaire de bien comprendre une autre facette de la modélisation : **la vérification et validation**. La vérification consiste à comparer les résultats de la simulation avec des solutions analytiques afin de s'assurer que le modèle résout bien les équations désirées. La validation, quant à elle, consiste à comparer les résultats de la simulation avec des résultats expérimentaux afin de s'assurer que le modèle considère bien tous les phénomènes en jeu et représente la réalité dans des circonstances souvent simplifiées et contrôlées. Chacun des articles présentés dans cette thèse comporte un test de validation qui a pour but de créditer le modèle utilisé et de valider les résultats obtenus. Les deux montages expérimentaux utilisés pour ces validations sont présentés ci-dessous. Deux tests de vérification et validation supplémentaires sont présentés en Annexe A.

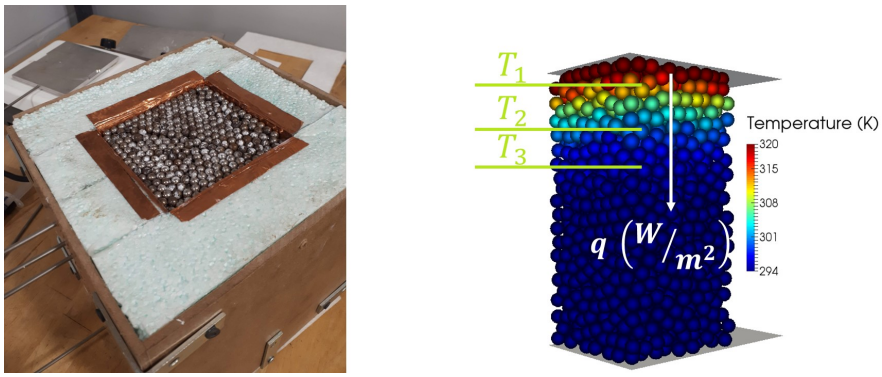
4.2.1 Validation du transfert thermique

Afin de valider notre modèle de transfert de chaleur en monodisperse (Article 1), puis en bidisperse (Article 2), nous avons eu recours au même montage expérimental illustré avec son penchant numérique à la Figure 4.2(a). Ce montage est situé à Polytechnique Montréal.

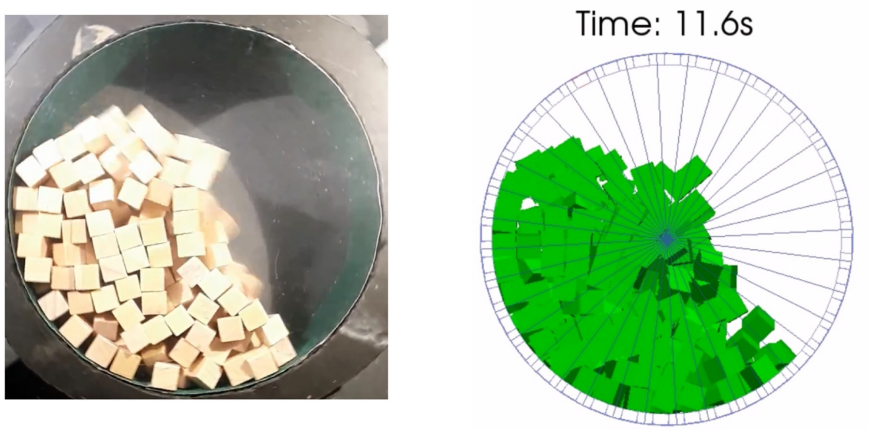
Le lit de particules était inséré dans une boîte isolée par de la styromousse sur les côtés et chauffé par une plaque chauffante déposée sur le dessus. Nous avons fait plusieurs expériences avec plusieurs matériaux différents qui seront expliqués plus en détail dans les Articles associés.

4.2.2 Validation du mouvement de particules cubiques

La géométrie principale d'intérêt de cette thèse demeure néanmoins le cylindre rotatif. Comme mentionné dans la revue de littérature, c'est dans cet équipement que plusieurs opérations faisant intervenir le transfert de chaleur et les mécanismes de ségrégation prennent place. Ainsi, les simulations réalisées dans les Articles 2 et 3 (Chapitres 6 et 7) se tiendront en grande majorité dans un cylindre rotatif. Afin de valider le mouvement de particules non sphériques dans un tel équipement, nous avons inséré des particules cubiques dans un cylindre rotatif situé dans les laboratoires de l'Université de la Colombie-Britannique et avons filmé la dynamique de ces particules pour plusieurs vitesses de rotation de cylindre, comme illustré à la Figure 4.2(b).



(a)



(b)

Figure 4.2 Montages expérimentaux et leur représentation numérique utilisés pour valider nos modèles de transfert de chaleur dans les Articles 1 et 2 (a) et notre modèle dynamique de particules non sphériques dans l'Article 3 (b).

4.3 Grandes hypothèses de la thèse

Toute recherche se base sur certaines hypothèses et certaines conditions spécifiques pour générer des conclusions. Avant de présenter tout résultat, nous tenons à rappeler ici le cadre théorique que nous nous sommes imposé dans le cadre de cette thèse.

4.3.1 Aucune réaction chimique

Il convient de rappeler que bien que le but ultime du modèle développé tend à résoudre des écoulements granulaires dans lesquels une réaction chimique se produit, comme exemple, la pyrolyse, la présente thèse ne considère aucune réaction chimique. En effet, nous nous intéressons principalement au transfert de chaleur par conduction entre les murs d'un équipement et le lit granulaire, et non à la chaleur émise ou absorbée par une réaction chimique. Nos simulations pourraient ainsi correspondre à la première étape de préchauffage d'un lit granulaire, en aval à une réaction chimique. Une telle étape est souvent nécessaire pour toute réaction endothermique qui nécessite l'atteinte d'une température minimale pour que les particules réactives débutent la réaction chimique, comme c'est le cas pour la pyrolyse de pneus. Cette étape pose plusieurs problèmes d'uniformité de température dans l'équipement, ce qui mène à un contrôle difficile.

4.3.2 Forces en jeu

Tout au long de cette thèse, les particules sont considérées assez larges pour négliger les forces interparticulaires, les forces de cohésion et les forces de van der Waals. Les particules sont également considérées neutres et sèches, ce qui permet de négliger les forces capillaires et les forces électrostatiques. Les seules forces agissant sur les particules dans notre étude numérique sont donc la force de contact (particule-particule et particule-mur) et la force de gravité.

4.3.3 Mécanismes de transfert de chaleur négligés

Dans les Article 1 et 2 portant sur le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires, nous avons négligé les mécanismes de transfert suivants, qui sont illustrés à la Figure 2.9 :

1. Conduction au sein même de la particule (mécanisme 1)
2. Rayonnement entre les particules (mécanisme 3)
3. Convection naturelle dans les gaps d'air entre les particules (partie du mécanisme 4)

Afin de justifier ces hypothèses, nous nous basons sur les trois nombres adimensionnels présentés dans la revue de la littérature et rappelés dans chacun des articles concernés : le nombre de Biot, le ratio du transfert radiatif sur le transfert conductif puis le nombre de Grashof.

Ainsi, en ayant en tête ces hypothèses directrices, les outils numériques utilisés ainsi que les géométries rencontrées, la table est mise pour le plat de résistance. Nous pouvons maintenant plonger dans le coeur du sujet et explorer en détail comment nous avons répondu à chacun de nos sous-objectifs par le biais de trois articles qui sont présentés dans les trois prochains chapitres.

CHAPITRE 5 ARTICLE 1 : IMPACT OF SURFACE ROUGHNESS ON HEAT TRANSFER THROUGH SPHERICAL PARTICLE PACKED BEDS

Christine Beaulieu, David Vidal, Bahman Yari, Jamal Chaouki and François Bertrand
Submitted to Chemical Engineering Science Journal

Abstract A new thermal discrete element method-based model relying on a resistance network and considering conduction at the particle contact point, conduction in the surrounding fluid and particle conduction was developed. The model was validated using measurements of temperature evolution in four packed beds of glass, steel and two types of aluminum alloy beads whose roughness was characterized by AFM. The detailed analysis of every resistance in the network for the four materials showed that conduction in the fluid in the macrogap between the particles is not negligible for any material and is even preponderant, especially at low particle-to-fluid thermal conductivity ratios (κ). The model simulations also revealed that roughness has a significant impact on the effective thermal conductivity of packed beds with a $\kappa > 3000$. This finding explains, for the first time, the large increase in the scattering of effective thermal conductivity data observed in the literature as κ is increased.

Keywords Discrete element method ; Heat transfer ; Effective thermal conductivity ; Granular material ; Surface roughness ; Packed bed

5.1 Introduction

In many industrial processes, such as those involving cryogenic insulators, ceramic pebble beds [92], solid waste pyrolysis, fluidized beds and packed bed catalytic reactors [105, 124], granular materials need to be heated up or cooled down. To know the rate at which the temperature evolves in such processes and thus to predict their overall macroscopic behavior, the heat transfer process at the particle scale must be known. Heat transfer through granular materials has been a subject of interest over the past few decades. However, because of their discrete nature, unlike fluid and solid materials, the heat transfer mechanisms in granular materials are more complex and harder to understand. Researchers have tried to predict the temperature evolution and the effective thermal conductivity of packed beds using analytical equations, experiments and/or numerical simulations. Vargas et al. [84] numerically studied heat transfer through a packed bed under vacuum and showed that particle packing and the stress lines that form in the bed have a significant influence on the size and location of hot

spots in a reactor. Non-symmetric stress lines are responsible for a non-uniform temperature elevation in the bed that cannot be adequately predicted by a continuum-based Eulerian approach. Liang et al. [125] developed a theoretical model to predict the effective thermal conductivity of packed beds by representing every static column of particles as a chain of contacting elements. However, they needed to introduce a fitting parameter, calibrated empirically, to account for the heterogeneity and irregularity of the real granular structure. Gan et al. [107] also noted that mathematical heat transfer models used to study granular materials are limited by the complexity of the bed geometry and by overly simplistic assumptions that lose the distinctive character of granular material.

The most common modeling approach in the literature for studying the impact of the discrete nature of granular materials on heat transfer is the Discrete Element Method (DEM) and its derived approach, the Thermal Discrete Element Method (TDEM) [52, 56]. This numerical Lagrangian method has been widely used to calculate the dynamical evolution of a large set of discrete particles and thus to track the position, velocity and angular velocity of each particle over time. It relies on the time integration of Newton's second law of motion for each particle. During the dynamical evolution of the particle assembly, particles are allowed to momentarily overlap slightly. These overlaps are used to relax collisions and calculate contact forces modeled by a system of fictitious springs and dashpots related to the magnitude of the overlap. These springs and dashpots are meant to respectively restitute and dissipate (as most collisions are inelastic) some of the kinetic energy during the collisions [52]. In addition, TDEM, which makes it possible to follow the temperature of each particle by the local heat balance between particles, was more recently introduced to simultaneously track heat transfer across particle systems [56, 83, 84]. According to Shi et al. [80], unlike the large amount of research done on granular materials over the years using numerical simulations, little work has been devoted to heat transfer, despite its importance and complexity.

TDEM relies on calculating the heat transfer between two particles whose temperature differs. This leads to the following global equation :

$$Q_{ij} = H_{i,j} \left(T_i - T_j \right) \tag{5.1}$$

where T_i, Q_{ij} and H_{ij} are, respectively, the temperature of particle i, the total rate of heat transferred between particles i and j, and the total heat conductance that defines the ability of particles i and j to transfer heat between them when their temperatures differ.

However, H_{ij} is a global parameter that lumps different aspects. Indeed, since granular materials are non continuous and multiphase systems, the three modes of heat transfer, that is, conduction, convection and radiation, may occur with different intensities. In addition, the

three main modes can decline in many heat pathways (or channels) in granular materials as listed below.

1. Conduction through the particle itself
2. Conduction through the contact area
3. Conduction through the surrounding fluid
4. Heat transfer by natural or forced fluid convection
5. Heat transfer by particle radiation
6. Heat transfer by particle convection

The complexity of TDEM lies in the determination of which mechanisms are dominant in which situations and how these mechanisms are formulated. In previous studies, conduction inside the particle (mechanism 1) was modeled using a radial differential equation [85, 86] that represents the temperature evolution within every single particle. When the particulate system is large, these calculations become very demanding and can be neglected as long as the Biot number (Bi) is much smaller than 1, meaning that conduction inside the particles is much faster than surface convection, leading to a uniform temperature within the particle [80, 87]. For particles with a small diameter (d), this hypothesis is valid as Bi is defined as :

$$Bi = \frac{h_p d}{k_p} \tag{5.2}$$

where h_p, k_p and d are, respectively, the convective heat transfer coefficient at the surface of the particle, the particle thermal conductivity and the particle diameter.

Convection between particles and the surrounding fluid (mechanism 4) has been modeled by Yang et al. [98] and Zhou et al. [99], with correlations that depend on the surface temperature of the particle, the fluid Prandtl number and the particle Reynolds number. A calculation involving convection implies knowing the velocity and the temperature of the fluid around the particles, which requires that DEM be coupled with CFD. In static packed beds, which is the focus of the present study, Arpaci et al. [100] showed that natural convection (mechanism 4) can be neglected between the particles as long as the characteristic length is very small, leading to a small Grashoff number defined as :

$$Gr = \frac{g\beta\Delta T L_c^3 \rho_{air}^3}{\mu_{air}^2} \tag{5.3}$$

where β is the dilatation coefficient equal to $\frac{1}{T_m}$ for an ideal gas with T_m the mean temperature

of the system, ΔT is the temperature difference in the macrogaps, L_c is the length of the macrogap, ρ_{air} is the air density and μ_{air} is the air dynamic viscosity. Lastly, radiation emissions by the particles themselves can also be neglected when the particle temperatures are low, that is, approximately $T < 650°$ [92–97].

At steady-state under vacuum conditions and without radiation, Batchelor and O'Brien [88] showed that heat conductance between two smooth elastic particles i and j in contact can be calculated as :

$$H_{ij} = 2k_{p,h}a \tag{5.4}$$

where $k_{p,h}$ is the harmonic mean of the heat conductivities of the two particles defined as $k_{p,h} = \frac{2k_{p,i}k_{p,j}}{k_{p,i}+k_{p,j}}$ and a is the contact radius between the two particles. According to the Hertz theory, the contact area between two spheres depends on the force applied to them, which can be obtained in DEM. This approach has been confirmed by Vargas and McCarthy [84] and Zhang et al. [90], who found that heat transfer in a packed bed depends on the network of force lines within the particle packing. They found that heat conductivity increases in a more compressed bed as the forces applied and the contact area are larger.

However, this ideal situation does not occur in most real-life applications. As soon as there is, in real conditions, a fluid between the particles, the question arises as to whether the heat transfers through the fluid as well. Most studies on heat transfer agree that Batchelor and O'Brien's assumption (Equation 5.4) be used to represent the solid conduction at the contact point. However, there is still no consensus for determining in which situations conduction in the fluid (mechanism 3) must be considered nor how to calculate it. Swift [101] and Moscardini et al. [102] respectively experimentally and numerically studied the impact of gas pressure on the effective thermal conductivity of a packed bed. They both found that reducing the pressure decreases the effective thermal conductivity for all the materials they studied, meaning that the gas between the particles has an impact. Intuitively, conduction in the fluid can only be neglected when the particle-to-fluid thermal conductivity ratio is high, i.e., $\kappa = \frac{k_p}{k_f} > \Theta$. Qi and Wright [104], Argento and Bouvard [105], Liang et al. [106], and Zhou et al. [94] reported values of Θ ranging from $\Big[1000 \text{ to } 4000\Big]$. For a packed bed filled with air at normal temperature and pressure conditions ($k_f \approx 0.027$ W/m.K), a Θ value of 4000 would mean that, for any particle with a thermal conductivity smaller than 120 W/m.K (e.g., glass, steel, iron, rubber, etc.), conduction in the fluid would still play an important role. This has thus pushed researchers to find a way to accurately account for that related

heat transfer.

Two families of models can be used to represent conduction in the stagnant fluid within a TDEM model. The first was developed by Vargas and McCarthy [87] and represents the global conductance as :

$$H_{ij} = H_s + H_f = 2k_{p,h}a + k_f \frac{A_f}{L_f} \tag{5.5}$$

where H_s is the conductance as defined by Batchelor and O'Brien (Equation 5.4), H_f is the heat conductance related to conduction in the fluid, A_f is a characteristic area perpendicular to the heat flux, k_f is the fluid conductivity and L_f is a characteristic length in the direction of the heat flux. This model was later used and validated by Komossa et al. [85], who studied heat transfer through glass beads in a rotating drum.

The second was introduced by Cheng et al. [96], who developed a more complex TDEM model based on different heat exchange areas and lengths that depend on Voronoi polyhedra built around each particle and on the local porosity of the system. This model has been used with some modifications and has been validated by many authors. Zhou et al. [99] and Yang et al. [98] coupled the TDEM model developed by Cheng et al. [96] with CFD to study heat transfer in fluidized beds and moving beds, respectively. Oschmann et al. [86] and Qi and Wright [104] added a radiative term into the TDEM model. Qi and Wright [104] studied heat transfer in a screw reactor and investigated at the importance of each mechanism in the granular heat transfer process. Their results showed that conduction in the fluid was predominant for biomass-made particles. Lastly, Gan et al. [107] used a slight modification of Cheng's TDEM model to investigate the effective thermal conductivity of a packed bed of ellipsoidal particles and found that ellipsoids have a larger effective thermal conductivity because they have more contact points throughout their packing structure.

In addition to the non-obvious selection of an appropriate fluid conductance model, different authors came to different conclusions with respect to the impact of particle diameter on the effective thermal conductivity of a packed bed. Indeed, Zhou et al. [94], Sangros et al. [115] and Gan et al. [107] found that the effective thermal conductivity increased with the particle diameter using TDEM. Swift [101] and Nasr et al. [114] also came to the same conclusion experimentally. On the other hand, Gui et al. [95], who studied the impact of the packing structure of packed beds using TDEM, reported the opposite. Sangros et al. [115] and Gui et al. [95] did not consider conduction in the fluid even though their κ value was approximately 4000, i.e., at the transition threshold mentioned previously. In addition, the diameters studied by these authors varied over a range of several orders of magnitude, from 16 μm [115] to 10

mm [94]. Zhou et al. [94] and Gan et al. [107] added the nuance that the effect of particle diameter was only observable at high κ values. These conflicting results make it hard to come to a general conclusion and require a proper resolution of these apparent contradictions.

As can be seen, various TDEM models using different assumptions have been developed and used. Overall, they seem to give good results for various situations. However, there is no clear consensus in the literature as to which model should be used and when. In the light of the above, it is interesting to look at how these authors validated their model. Komossa et al. [85] validated their model by comparing the temperature elevation at different heights in a rotating kiln containing glass beads ($\kappa \approx 37$) only. To gain an insight into how the model reacts at different κ values, many authors used the effective thermal conductivity (k_e) of the granular material, which can be measured experimentally using different transient [101, 108, 109] or steady state [110] techniques in a packed bed. Many authors also developed correlations based on experimental measurements to calculate the effective thermal conductivity of packed beds. Van Antwerpen et al. [111] have exhaustively reviewed the different correlations for predicting the effective thermal conductivity of a packed bed. Amongst the various correlations presented in this review, let us mention here two correlations which consider the heat transfer through the surrounding fluid and the contact area, namely the Hsu et al.'s [126] correlation :

$$k_e/k_f = \gamma_a\gamma_c\kappa + \frac{\gamma_a(1-\gamma_c)}{1+(\kappa^{-1}-1)\gamma_a} + \frac{(1-\gamma_a)}{1+(\kappa^{-1}-1)\gamma_a\gamma_c} \tag{5.6}$$

and the Bauer and Schündler's [127] correlation, also known as the ZBS model :

$$k_e/k_f = (1-\sqrt{1-\epsilon})\epsilon\Big[\Big(\epsilon - 1 + \frac{1}{\kappa_G}\Big)^{-1} + \kappa_r\Big] + \sqrt{1-\epsilon}[\varphi\kappa + (1-\varphi)k_c] \tag{5.7}$$

where ϵ is the porosity of the packed bed, γ_a, γ_c, k_c and φ are geometric adjustable parameters which definitions are given in [111], and κ_G and κ_r are respectively the gaseous conduction parameter related to the Knudsen number and the radiation parameter, also defined in [111]. These two correlations were selected because they take into account both the heat transfer through the gas phase and the solid phase, and because they are often referred to in the literature.

Qi and Wright [104], Zhou et al. [99] and Oschmann et al. [86] all used the experimental data gathered by Cheng et al. [96] to validate their TDEM models. They compared the responses of their models for different particle conductivities by calculating k_e at steady state. As shown in Figure 5.1, good agreement between the proposed models and the experimental data, with a quasi-exponential increase of k_e as a function of $\log(\kappa)$, was obtained. The data points

presented in Figure 5.1 were directly taken from the papers of the corresponding authors.

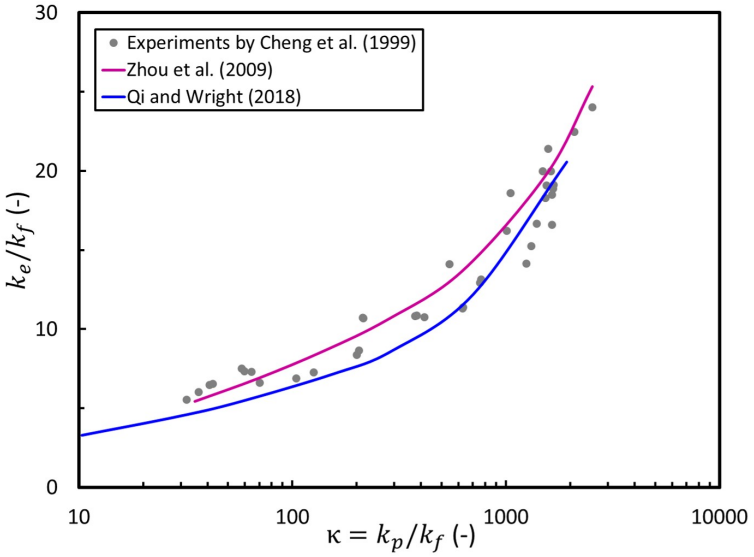


Figure 5.1 Effective thermal conductivity predictions from TDEM models in the literature show good agreement with some reported experimental data with κ in the range of 30 to 2500. Simulation and experimental data are taken from [99, 104] and [96], respectively.

However, the experimental data collected by Cheng et al. [96] report the effective thermal conductivity of packed beds of spherical particles as a function of κ, but only in the range of 30 to 2500, when many situations in real life bring into consideration other values of κ, such as glass beads in water ($\kappa \sim 2$) or aluminum beads in air ($\kappa \sim 8200$). Plotting additional experimental data from other sources [93, 96, 101, 109, 110, 112–114] and thus with a wider range of κ revealed a much less clear trend, especially for high κ values (Figure 5.2). We have added the trendline obtained with the TDEM model reported by Qi and Wright [104] to this graph for comparison purposes and extrapolated the trend to higher κ values using a combination of exponential and linear functions for regression of their data points such that $k_e/k_f = 6.87 - 3.89 \times (0.988)^{\kappa} + 7.14 \times 10^{-3}\kappa$ (with R^2=0.999). We also generated data points with the TDEM model presented by Komossa et al. [85], which we implemented in the open-source DEM software LIGGGHTS [89]. We can see that both numerical models seem to overestimate or poorly predict the effective thermal conductivity of aluminum and chrome beads (i.e., for $2{,}300 < \kappa < 41{,}800$) experimentally measured by Swift [101] (orange open triangular symbols) and by Nasr et al. [114] (green closed triangular symbols) by a factor of 2 or more. On the other hand, for low κ values, the model proposed by Komossa et al. [85] reaches a plateau that cannot explain the experimental data and hence appears to be missing a mechanism to explain heat transfer in these conditions. All these experiments were

carried out with various particle diameters and for a large variety of bead materials and fluids as summarized in Table 5.1. In Figure 5.2, it is also quite remarkable that the experimental data (pink area) are significantly more scattered for high values of κ than for lower values. To our knowledge, no complete explanation for this phenomenon has yet been confirmed in the literature and, to date, no numerical model has been able to reconcile numerical predictions and experimental data.

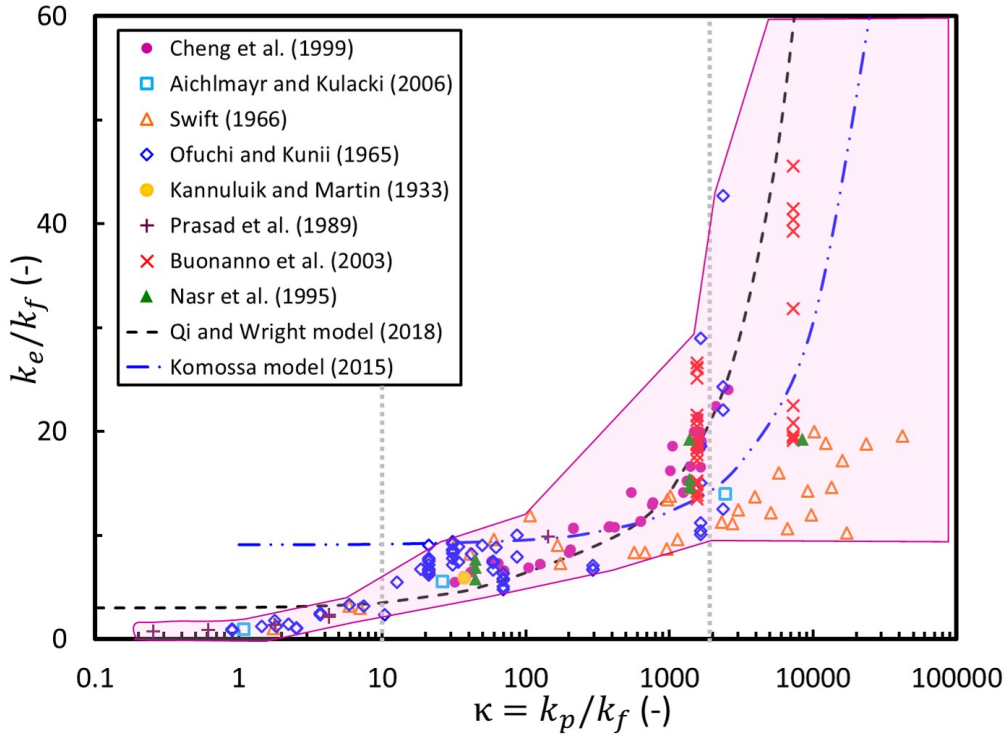


Figure 5.2 When experimental data for a wider range of κ are plotted, significant scattering in the effective conductivity measured at higher κ values is revealed. Current TDEM models overpredict the effective conductivity for these cases and are unable to explain the scattering.

Zhou et al. [94] suggested that this scattering might be explained by the fact that the experiments used different sizes of particles (see Table 5.1). However, it is hard to accept this explanation at first glance given that there is no clear consensus on the impact of particle diameter on effective thermal conductivity, as mentioned earlier. Buonanno et al. [116] pointed out that even the experimental values for aluminum beads ($\kappa \approx 7500$) are very scattered in different studies. This suggests that a phenomenon that occurs when the particles are highly conductive has not been taken into account in current models and that could explain the lower measured thermal conductivity of aluminum bead packed beds.

In their analytical study of the impact of solid-solid contacts on heat transfer, Luzi et al. [117]

Tableau 5.1 Summary of the experimental conditions used for the data collected from the literature.

Authors	d_{min} **(mm)**	d_{max} **(mm)**	**Fluid**	**Bead material**
Nasr [114]	2.77	13.53	air	glass, alumina, aluminium
Duncan [128]	2.38	2.38	argon, nitrogen	aluminum, yellow brass, stainless steel, zirconium oxide, lead-free glass
Buonanno [116]	19.05	19.98	air	steel, aluminum
Prasad [113]	3	25.4	water, glycol	glass, steel, acrylic
Kannuluik [112]	0.3	0.3	air	glass
Ofuchi [110]	1.15	12.1	helium, water, air, CO_2	glass, steel, nickel, river sand, cement clinkers, raschig rings
Swift [101]	0.054	0.55	argon, nitrogen, Freon-12, methane, helium, hydrogen, water	aluminum, copper, magnesium, nickel, uranium, nickel, zirconium, Pyrex
Nozad [108]	2.5	3.95	air, glycerol, water	aluminum, bronze, stainless steel, urea

pointed out that the assumption of smooth particles is often made in TDEM models, even if most of the materials are not smooth in real life. One possibility is that roughness could explain the discrepancy for beads with high κ values where heat transfer is dominated by conduction in the solid phase and is thus strongly impacted by the characteristics of the solid surface. Tsory et al. [129] used a TDEM model coupled with CFD in packed beds to study the impact of the surface slope, a fitting parameter related to the roughness that they introduced, on heat transfer. They found that this parameter significantly influenced their results for steel beads and thus called for further investigation. In the same vein, Chen et al. [123] recently suggested that the effect of the surface roughness, which was neglected in their work, could explain why their TDEM model overpredicted the effective thermal conductivity of packed beds of beryllium pebbles (k_p = 177.9 W/m.K) by about 50%. In addition, Buonanno et al. [116] showed experimentally that the effective thermal conductivity of steel and aluminum beads, for which surface roughness had been purposely modified, could be significantly altered. They showed that, for the same packing structure and load, k_e decreased with the surface roughness (red crosses in Figure 5.2), confirming that this bead property can have a significant impact on heat transfer in a packed bed. To our knowledge, Zhang et al. [90] were the only researchers to consider roughness in their TDEM model. They compared their home-made TDEM code with FEM and found that adding surface

roughness to two particles in a line assembly creates a discontinuous temperature profile at steady state. They also found that the effective thermal conductivity decreases with surface roughness for particles with a conductivity k_p of 100 W/m.K, which appears to confirm that surface roughness may be a possible explanation for the scattering of experimental data at high κ values. However, they did not consider the impact of a gas, which limits their work to situations in a vacuum.

In light of the literature review above, the aim of the present paper is to propose and assess a new general model to predict heat transfer in monodisperse granular materials over a very wide range of κ, (i.e., k_p/k_f), taking into account the impact of surface roughness. Specifically, we propose that adding bead surface roughness to a TDEM numerical scheme will make it possible to reconcile TDEM numerical predictions with experimental data at very low and high κ values, which cannot be done with existing TDEM models. The proposed model will allow us to numerically verify the impact of roughness and more precisely determine the impact of particle size on heat transfer in packed beds. To do so, we developed a new TDEM model that considers surface roughness and validated the resulting model by comparing its predictions to experimental heat transfer data gathered for packed beds of nearly monodisperse beads of different materials, i.e., glass, stainless steel, and two different aluminum alloys. The remainder of the article is organized as follows. After a quick reminder of the classical DEM equations for granular dynamics, Section 5.2 also presents the detailed thermal equations used in the proposed TDEM model that account for particle roughness as well as the experimental and numerical plans investigated (Section 5.2.3). A description of the validation of the proposed TDEM model is given in Section 5.3.1. Section 5.3.2 presents an analysis of the importance of every heat transfer resistance on the global heat transfer at a contact point between two particles. Section 5.3.3 compares the results of the proposed TDEM model to effective thermal conductivity data drawn from the literature. Section 5.4 provides concluding remarks.

5.2 Methodology

In this section, we present the governing equations used to solve numerically the force balance implemented in the Discrete Element Method (DEM) and the heat transfer models implemented in the Thermal Discrete Element Method (TDEM). The DEM presented in Section 5.2.1 serves as a quick reminder as the DEM is only used here to generate static particle packings while the focus will be on the heat transfer capability of TDEM. To study the impact of the surface texture or roughness, we suggest modified equations for the TDEM model (Section 5.2.2). In order to validate the proposed model, we validated our numerical

predictions by comparing the temperature evolution of four different packed beds of monodisperse beads made of different materials with varying thermal and surface properties. The experimental set-up and particle properties are presented in Section 5.2.3. Lastly, as the model is confronted with many data from the literature reporting the effective thermal conductivity of packed beds but for which little data is available on the actual roughness of the particles used, we present the approach used to assess the validity of the proposed model in Section 5.2.4.

5.2.1 DEM governing equations

To generate static packings of the spherical monodisperse particles used to match the experimental ones used in our heat transfer study, we ran DEM simulations using the open-source software LIGGGHTS [89]. To do this, particles, whose size matched that of the particles used in the experiments, were randomly introduced into the computational domain and were left to settle down under gravity using DEM. A total kinetic energy of the particulate system lower than 1×10^{-7} J was used as the stopping criterion of the DEM simulations. This ensured that the bed was settled and relaxed so as to prevent too large unrealistic overlaps. The settled packed bed acted as a starting point for the heat transfer process. In DEM, the displacement of particles is computed by solving Newton's second law of motion. This law stipulates that the rate of change of translation or rotational momentum for any body in an inertial reference frame will result, respectively, from a net force or a torque balance acting upon it. For a particle i, Newton's second law is expressed, in translation and rotation, respectively, as follows :

$$m_i \frac{d\mathbf{v_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{F_{c,ij}} + \sum_k \mathbf{F_{nc,ik}} + \mathbf{F_{g,i}} + \mathbf{F_{i,f}} \tag{5.8}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{T_{ij}} \tag{5.9}$$

where m_i, $\mathbf{v_i}$, I_i and ω_i are the particle mass, velocity, moment of inertia and angular velocity respectively. The forces that act on a particle i in translation are the contact forces $\mathbf{F_{c,ij}}$, the non-contact cohesive or non-cohesive forces $\mathbf{F_{nc,ik}}$ (which include van der Waals, electrostatic and capillary forces), the gravity force $\mathbf{F_{g,i}}$ and the hydrodynamical or aerodynamical forces $\mathbf{F_{i,f}}$ resulting from the interaction with the fluid surrounding the particle. In the present study, as the particles were large enough, the non-contact forces were neglected. Furthermore, as the particles were surrounded by air, the aerodynamical forces could also be neglected with

respect to the other prevailing forces acting on the particles and accounted for in the present study, i.e., gravity and contact forces. In rotation, the torques $\mathbf{T_{ij}}$ were computed from the contact forces acting on the particle as described below.

Following Blais et al. [52], a general expression for the contact force between two particles i and j in DEM can be expressed as :

$$\mathbf{F_{c,ij}} = \underbrace{\left(k_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{a}\,\delta_{\mathbf{n,ij}} - \gamma_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{b}\,\mathbf{v_{n,ij}}\right)}_{\mathbf{F^{n}_{c,ij}}} + \underbrace{\left(k_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{c}\,\delta_{\mathbf{t,ij}} - \gamma_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{d}\,\mathbf{v_{t,ij}}\right)}_{\mathbf{F^{t}_{c,ij}}} \tag{5.10}$$

$$\mathbf{F^{t}_{c,ij}} \leq \mu_C \mid \mathbf{F^{n}_{c,ij}} \mid \tag{5.11}$$

where $\mathbf{F^{n}_{c,ij}}$ and $\mathbf{F^{t}_{c,ij}}$ are the normal and tangential components of the contact force, $k_{n,ij}$ and $\gamma_{n,ij}$ are the normal spring and dashpot coefficients, $k_{t,ij}$ and $\gamma_{t,ij}$ are the tangential spring and dashpot coefficients, $\delta_{\mathbf{n,ij}}$ and $\delta_{\mathbf{t,ij}}$ are the normal and tangential overlaps, $\mathbf{v_{n,ij}}$ and $\mathbf{v_{t,ij}}$ are the normal and tangential relative velocities (which are expressed as derivatives of the overlaps with respect to time), and μ_C is the Coulomb friction coefficient. The exponents a, b, c and d are non-negative constants whose values define the contact force model. To avoid particles spinning on themselves indefinitely, we also computed a friction torque that opposes itself to an angular velocity. The simplest rolling resistance torque model, which is implemented in the present work, reads as follows :

$$\mathbf{T_{ij}} = -\mu_r \mid \mathbf{F^{n}_{c,ij}} \mid r^{*}\frac{\omega_{\mathbf{ij}}}{\mid \omega_{\mathbf{ij}} \mid} \tag{5.12}$$

where μ_r is the rolling friction coefficient of the material, $r^{*} = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j}$ is the reduced radius and $\omega_{\mathbf{ij}}$ is the relative angular velocity $\omega_{\mathbf{ij}} = \omega_{\mathbf{i}} - \omega_{\mathbf{j}}$.

In the present study, we employed the widely used Hertz model. Thus, the exponents a, b, c and d were set to 1/2, 1/4, 1/2 and 1/4, respectively. The description of the coefficients used in the formulation of the contact force within the Hertz model are given in Table 5.2, where Y_i, r_i, e, m_i and ν_i are, respectively, the Young's modulus, radius, coefficient of restitution, mass and Poisson's ratio of particle i.

5.2.2 Modified TDEM model considering roughness

In TDEM, a heat balance is established on every particle to follow the particle temperature in time, in addition to its position and velocity. In the present work, as the heat transfer took place in static packed beds, the thermal problem was decoupled from the dynamical one and only the former was solved in previously generated spherical packings. Throughout the

Tableau 5.2 DEM parameters.

Parameter	**Symbol**	**Units**	**Definition**
Normal elastic stiffness	k_n	Pa.m	$\frac{4}{3}Y^*\sqrt{r^*}$
Normal viscoelastic damping	γ_n	$(\mathrm{Pa}^{1/2}\mathrm{kg}^{3/4})$	$-\sqrt{5}\frac{ln(e)}{\sqrt{ln^2(e)+\pi^2}}\sqrt{k_n m^*} \geq 0$
Tangential elastic stiffness	k_t	Pa.m	$8G^*\sqrt{r^*}$
Tangential viscoelastic damping	γ_t	$(\mathrm{Pa}^{1/2}\,\mathrm{kg}^{3/4})$	$-2\sqrt{\frac{5}{6}}\frac{ln(e)}{\sqrt{ln^2(e)+\pi^2}}\sqrt{k_t m^*} \geq 0$
Equivalent Young's modulus	$\frac{1}{Y^*}$	Pa^{-1}	$\frac{\left(1-\nu_i^2\right)}{Y_i} + \frac{\left(1-\nu_j^2\right)}{Y_j}$
Equivalent original Young's modulus	$\frac{1}{Y_0^*}$	Pa^{-1}	$\frac{\left(1-\nu_i^2\right)}{Y_{0,i}} + \frac{\left(1-\nu_j^2\right)}{Y_{0,j}}$
Equivalent shear modulus	$\frac{1}{G^*}$	Pa^{-1}	$\frac{2(2-\nu_i)(1+\nu_i)}{Y_i} + \frac{2(2-\nu_j)(1+\nu_j)}{Y_j}$
Equivalent radius	$\frac{1}{r^*}$	m^{-1}	$\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j}$
Equivalent mass	$\frac{1}{m^*}$	kg^{-1}	$\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$

present study, we considered heat transfer in a monodisperse rough spherical particle packed bed in stagnant air at temperatures below 100°C. Therefore, we assumed (1) no convection, (2) no radiation, and (3) a uniform temperature within each particle. The validity of the results in the general case should be valid as long as these assumptions are verified. We will come back to the validity of these assumptions in Section 5.2.3. Thus, the energy conservation balance of any particle i can be written as :

$$m_i C_i \frac{dT_i}{dt} = \sum_j Q_{ij} + \sum Q_{S,i} \tag{5.13}$$

$$\tag{5.14}$$

where C_i is the specific heat capacity of a particle i and where $Q_{S,i}$ are source terms that could account for the heat generated by a reaction or radiation but that were taken as equal to zero in the present study. The total rate of heat transferred between particles i and j (i.e., Q_{ij}), is defined by Equation 5.1. In the present work, we modified the total contact heat conductance H_{ij} so that it accounted for additional heat transfer mechanisms such as heat transfer contact resistance due to the roughness of the particle surface and the heat conductivity of the gas trapped between particles in contact.

To account for the heat transfer contact resistance, we relied on the analytical work of Bahrami et al. [118] and Van Lew [92]. In these studies, the authors proposed to represent heat transfer between two particles by an analogy with an electrical resistance network. The heat transfer in the vicinity of a binary contact can be affected by the various resistances

represented in Figure 5.3 and defined hereafter.

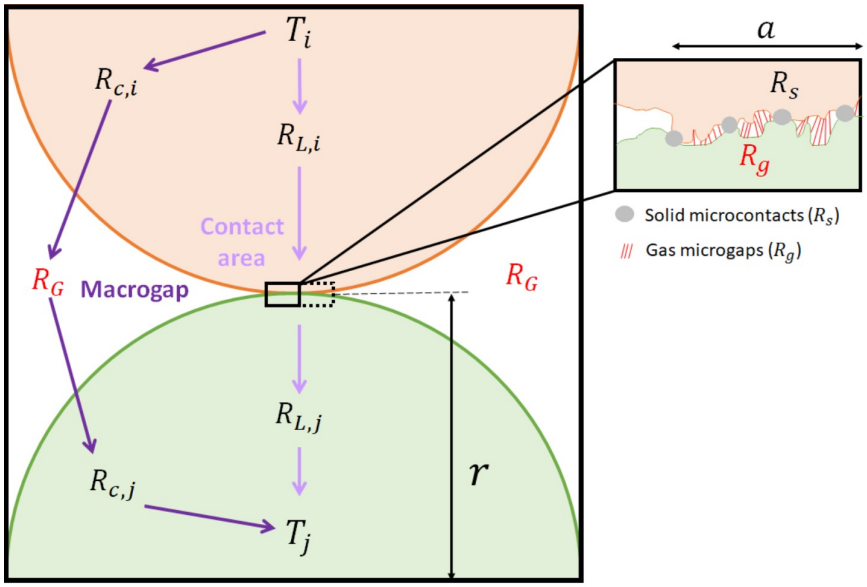


Figure 5.3 When two particles are in contact, heat must go through many resistances in parallel and in series to transfer from particle i (hotter) to particle j (colder). Here, R_G and R_g are in red because they refer to the gas phase whereas all the other resistances are in the solid phase. All thermal resistances are expressed in K/W.

When two particles are in contact in a stagnant fluid, heat can transfer from particle i to particle j (assuming that $T_i > T_j$) through two main parallel pathways : the macrogap (MG) pathway via the stagnant fluid and the contact area (CA) pathway (Figure 5.3). There are five different thermal resistances throughout these two pathways. In the macrogap pathway, heat must travel through the first particle (solid conduction resistance $R_{c,i}$), through the interstitial fluid between the two particles (fluid conduction resistance R_G) and then through the second particle (solid conduction resistance $R_{c,j}$). In the contact area pathway, heat must first travel through the first particle (constriction resistance $R_{L,i}$) as analytically derived by Yovanovich et al. [130], through the contact area and then through the second particle (spreading resistance $R_{L,j}$). The addition of particle surface roughness influences the formulation of the thermal resistances in this contact area (insert to the right in Figure 5.3). Indeed, for rough spheres, the real solid contacts that promote heat transfer occur at the top of the surface asperities [118]. These contact points, illustrated by gray circles in the insert of Figure 5.3 are called microcontacts. The sum of these microcontacts represents the *real solid contact area* available for solid heat transfer, which is much smaller than the nominal contact area (defined by the contact radius a), meaning that a rougher sphere would transfer heat less efficiently. The number, shape and height of these microcontacts depend on the surface

finish, the particle microhardness (W) and the compressive force exerted by one particle on another. The microcontacts are characterized by the surface roughness σ and surface slope τ. Heat can also travel through the small pockets of gas trapped in the microgaps between the microcontacts. Thus, in the contact area itself, there are two possible routes in parallel as illustrated in the insert of Figure 5.3 : through the solid microcontacts (R_s) or through the gas microgaps (R_g). We can map all these routes and pathways through the resistance network shown in Figure 5.4.

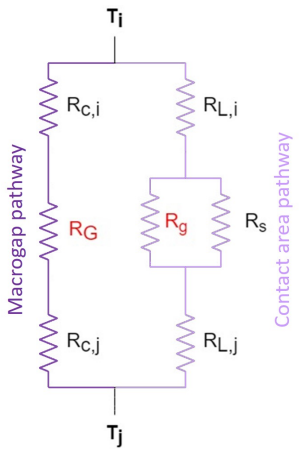


Figure 5.4 The thermal contact between two particles can be represented by an electrical resistance network, where $R_{c,i}$ and $R_{L,i}$ are, respectively, the solid conduction resistance and the constriction/spreading resistance of the particle i, and R_G, R_g and R_s are, respectively, the gas macrogap, the gas microcontact and the solid microcontact resistances.

From Figure 5.4, we can calculate the global thermal contact resistance between particles i and j as :

$$\frac{1}{R_{ij}} = \frac{1}{R_{CA}} + \frac{1}{R_{MG}} \tag{5.15}$$

where R_{CA} and R_{MG} represent the resistance of the contact area and macrogap pathways respectively (right and left branches of the resistance network in Figure 5.4), and thus :

$$R_{ij} = \left[\frac{1}{R_{L,i} + \left(\frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_g}\right)^{-1} + R_{L,j}} + \frac{1}{R_{c,i} + R_G + R_{c,j}} \right]^{-1} \tag{5.16}$$

From this definition, we can calculate the contact conductance as the inverse of the contact

resistance :

$$H_{ij} = \frac{1}{R_{ij}} \tag{5.17}$$

Once we calculated the contact conductance from Equations 5.17 and 5.16, we replace H_{ij} in Equation 5.1 and compute the heat transfer between the two particles, providing that expressions for the various resistances in the two pathways were appropriately defined.

Based on the work of Bahrami et al. [118], Vargas and McCarthy [87], Yovanovich [131], Van Lew [92] and Komossa et al. [85], we can define the following resistances $R_{L,i}$, $R_{c,i}$, R_G, R_s and R_g by the expressions summarized in Table 5.3 and the related model parameter definitions in Table 5.4, in which one of the main parameters is the nominal contact radius a for two particles in contact. Bahrami et al. [118] presented relationships between the contact pressure and the contact radius a, but instead of this definition, we used the contact radius directly calculated by LIGGGHTS. As is very often done in DEM, the Young's modulus of the particles used for the simulations to generate the required packings was actually taken smaller than the real material stiffness so as to relax the DEM stability constraint related to Rayleigh's time and thus allow a larger time step and faster simulations (see Section 5.2.5). As a consequence of this choice, larger overlaps and thus larger contact areas between particles were generated. In DEM, these larger overlaps and contact areas are assumed to have little impact on the overall particulate system dynamics within a reasonable limit [75]. However, since heat transfer depends strongly on the contact area, it is necessary to use a contact area that is representative of the real particle stiffness and, for this, it is classic in TDEM literature to introduce a correction factor c to correct the dynamical overlap such that [85, 86, 94, 104, 132] :

$$c = \left(\frac{Y^*}{Y_0^*}\right)^{2/3} \tag{5.18}$$

where Y^* is the effective Young's modulus used in the DEM simulations, Y_0^* is the effective real Young's modulus of the particles and the 2/3 exponent appears because a Hertzian contact force model is employed here. The thermal contact radius a depends on the so-called dynamical and thermal overlaps illustrated in Figure 5.5 and is calculated in several steps as follows [89] :

1. Calculation of the dynamical distance l_d between particle centroids
2. Calculation of the dynamical overlap such that : $\delta_{n,d} = r_i + r_j - l_d$
3. Calculation of the thermal overlap by applying the correction factor c to the dynamical

overlap, i.e., $\delta_{n,th} = \delta_{n,d}c$

4. Calculation of the resulting thermal distance between particle centroids such that $l_{th} = r_i + r_j - \delta_{n,th}$
5. Calculation of the thermal contact area using $A_{c,th} = -\frac{\pi}{4}\frac{(l_{th}-r_i-r_j)(l_{th}+r_i-r_j)(l_{th}-r_i+r_j)(l_{th}+r_i+r_j)}{l_{th}^2}$
6. Calculation of the resulting thermal contact radius $a = \sqrt{\frac{A_{c,th}}{\pi}}$

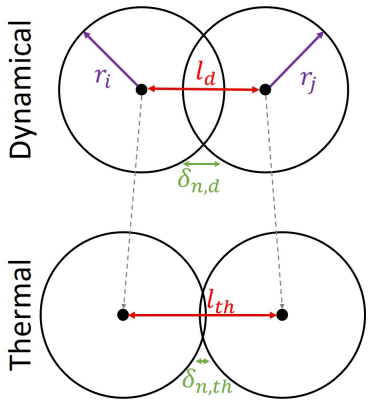


Figure 5.5 To calculate the thermal contact radius a, the dynamical overlap is corrected into a so-called thermal overlap that accounts for the real Young's modulus (Y_0) of the particles.

As illustrated in Figure 5.5, the resulting thermal overlap is smaller than the dynamical one as the correction factor is always below 1 (as $Y_0^* > Y^*$).

Tableau 5.3 Expressions used for the thermal resistances present in our proposed model.

Resistance (K/W)	**Symbol**	**Definition**	**Reference**
Solid conduction resistance	$R_{c,i}$	$\frac{L_s}{k_{p,i}A_s}$	inspired by [87]
Constriction/spreading resistance	$R_{L,i}$	$\frac{1}{4kp_ia}$	[118]
Solid microcontact resistance	R_s	$\frac{0.581\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\left(\frac{W^*}{\delta_{n,th}Y_0^*}\right)^{0.96}}{k_s a^{1.04}}$	[92]
Gas microcontact resistance	R_g	$\frac{2\sqrt{2}\sigma a_2}{\pi k_f a^2 ln\left(1+\frac{a_2}{a_1+\frac{M}{2\sqrt{2}\sigma}}\right)}$	[118]
Interstitial gas conduction resistance	R_G	$\frac{2}{\pi k_f\left[Nln\left(\frac{N-B}{N-A}\right)+B-A\right]}$	[118]

Tableau 5.4 Thermal resistance model parameters (inspired for the most part from [92], [87] and [118].

Parameter	Symbol	Units	Definition
Characteristic length parallel to the heat flux	L_s	m	$\frac{r \arcsin(1)}{2}$
Characteristic area perpendicular to the heat flux	A_s	m^2	$\pi(r^2 - a^2)$
Equivalent microhardness	$\frac{1}{W^*}$	Pa^{-1}	$\frac{1}{W_i} + \frac{1}{W_j}$
Equivalent surface roughness	σ	m	$\sqrt{\sigma_i^2 + \sigma_j^2}$
Equivalent surface slope	τ	(-)	$\sqrt{\tau_i^2 + \tau_j^2}$
Gas parameter	M	m	$\left(\frac{2-\alpha_{T_i}}{\alpha_{T_i}} + \frac{2-\alpha_{T_j}}{\alpha_{T_j}}\right)\left(\frac{2\gamma_g}{1+\gamma_g}\right)\left(\frac{\Lambda}{Pr}\right)$
Inverse error function 1	a_1	(-)	$erfc^{-1}\left(\frac{2P_0}{W^*}\right)$
Inverse error function 2	a_2	(-)	$erfc^{-1}\left(\frac{0.03P_0}{W^*}\right) - a_1$
Maximum pressure	P_0	Pa	$\frac{2Y_0^* \delta_n}{\pi a}$
Molecular mean free path	Λ	m	68×10^{-9} (assumed to be constant here)
Gas Prandtl number	Pr	(-)	$\frac{\mu_f C_f}{k_f}$
Gas specific heat ratio	γ_g	(-)	1 (hypothesis that there is only one gas)
Thermal accommodation coefficients	$\alpha_{T_i} = \alpha_{T_j}$	(-)	0.7 (from [133])
Gas parameter	N	m	$2(r - \zeta) + M$
Radius ratio	ζ	(-)	$\frac{a^2}{2r}$
Geometrical parameter	A	m	$2\sqrt{r^2 - a^2}$
Geometrical parameter	B	m	0 for SC packing (hypothesis here)

In addition to the contact radius, we can see from Table 5.3 that the particle surface properties such as roughness σ and surface slope τ also play an important role in the two resistances at the particle microcontact area, i.e., the solid microcontact resistance R_s and the gas microcontact resistance R_g. With all other parameters kept constant, roughness affects R_s linearly but affects R_g in a more complex and non-linear way. The surface slope, on the other hand, influences only R_s in an inversely proportional way, meaning that a higher surface slope would result in a smaller resistance as more solid microcontacts would occur. The formulation of R_s (Table 5.3) was taken from Van Lew [92], who investigated heat transfer in breeder pebble beds numerically with TDEM, but only considered the resistances R_s and R_L in their total heat conductance H_{ij}, neglecting all resistances related to the gas phase. Also, since the surface roughness and microhardness of one of the materials they studied were unknown, their total conductance was finally limited to the single resistor R_s, as proposed by Batchelor and O'Brien [88, 92].

Unlike previous authors [92, 118], who assumed that particle conductivity was much higher than gas conductivity and thus neglected the solid conduction resistances $R_{c,i}$ and $R_{c,j}$ in the macrogap pathway of their resistance models, we dropped this assumption and thus considered $R_{c,i}$ and $R_{c,j}$ as part of the resistance model. This allowed us to explore lower κ values for which experimental data existed (see Figure 5.2) and for which the Biot number might not be as low as presented in the Introduction. In this case, the assumption that there is no resistance in the solid might no longer hold. Our approach to defining $R_{c,i}$ and $R_{c,j}$ as given in Table 5.3 was inspired by the work of Vargas and McCarthy [87]. We thus introduced two new geometrical parameters, L_s and A_s, as illustrated in Figure 5.6. L_s describes the average height between the middle plane of a particle and its surface whereas A_s describes the projected area of two contacting particles perpendicular to the heat flux, excluding the contact area, i.e., the salmon-colored donut-shaped area in Figure 5.6 (top view). The constriction/spreading resistance ($R_{c,i}$) and the two resistances in the gas phase (R_g and R_G) were taken from the work of Bahrami et al. [118].

Lastly, note that, for the most part, the same definitions apply at a particle-wall contact, except that the interstitial gas conduction $R_{G,w}$ is taken as $R_{G,w} = R_G/2$ and the total global heat resistance with the wall $R_{ij,w}$ becomes :

$$R_{ij,w} = \left[\frac{1}{R_{L,i} + \left(\frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_g}\right)^{-1}} + \frac{1}{R_{c,i} + R_{G,w}} \right]^{-1} \tag{5.19}$$

In summary, with the modified resistance network proposed and illustrated in Figure 5.4,

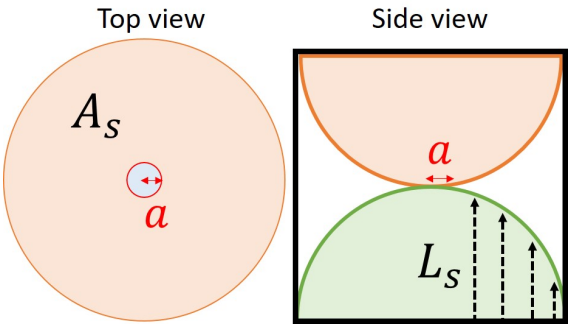


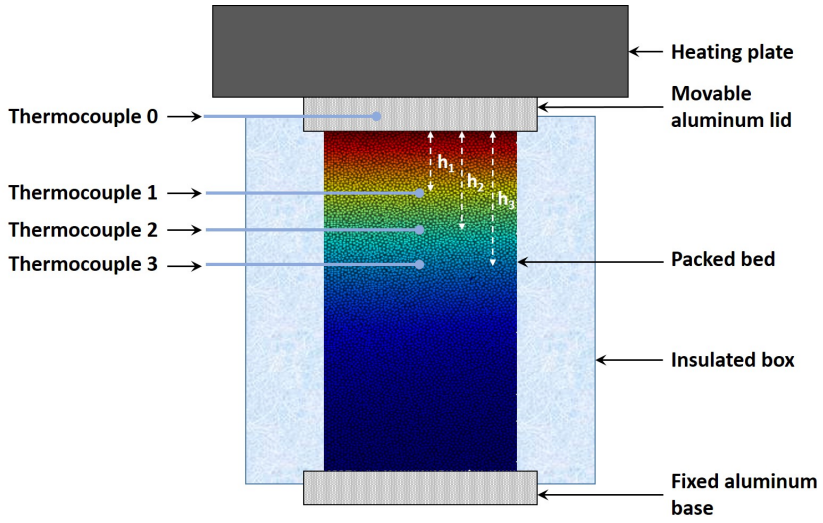
Figure 5.6 The parameters L_s and A_s used in the calculation of $R_{c,i}$ are geometrical.

we calculate the contribution of the heat transfer that goes through the fluid macrogap and solid microcontact pathways for every contact between two particles using the equations summarized in Table 5.3, of which R_s and R_g in the microcontact pathway account for the surface texture (roughness and surface slope) of the particles. We then calculate the global thermal contact resistance for the contact using Equation 5.16. The whole heat transfer process between two particles is thus lumped into a single H_{ij} parameter using Equation 5.17. The rate of heat transferred through the two particles can then be calculated using Equation 5.1 and added to the heat balance of each particle (i.e. Equation 5.14). Lastly, all these equations were straightforwardly implemented within the TDEM algorithm of LIGGGHTS, which made it possible to solve the heat transfer problem throughout an entire packed bed for all cases investigated and thus to study the impact of particle roughness.

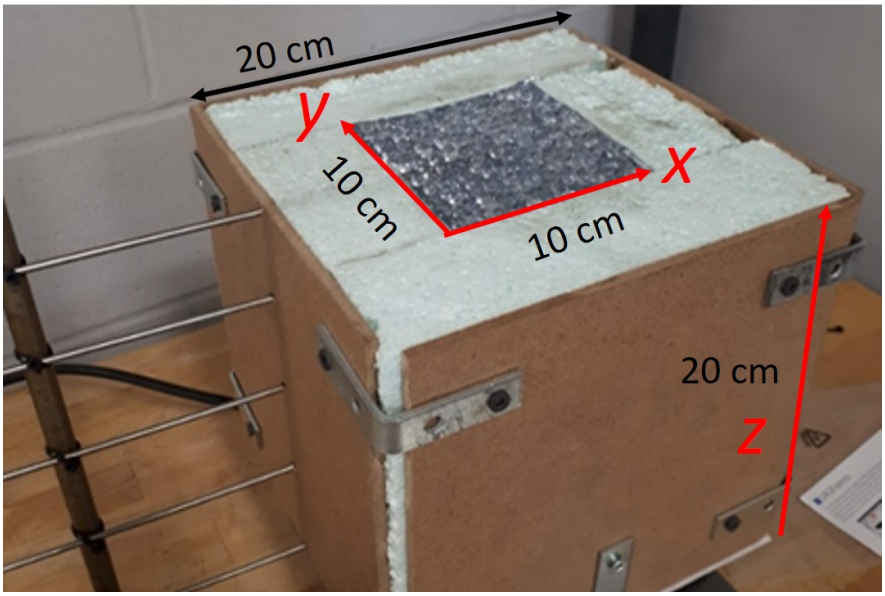
5.2.3 Experimental set-up and model validation

First, to assess the proposed TDEM model, we carried out experiments to measure the transient temperature evolution in packed beds of spherical particles for four materials with different thermal and surface texture properties and tried to reproduce these experiments using our TDEM model. Our set-up consisted of an insulated box filled with monodisperse beads in which we measured the temperature evolution over time at three different heights and at the top and bottom plates, as illustrated in Figure 5.7(a). These temperature profiles were compared with the predictions of the proposed TDEM model.

The dimensions of the box (10 cm × 10 cm × 20 cm) were chosen to be large enough to not impact the heat transfer process inside the box, i.e., at least 8 times the particle diameter, as suggested in the literature [94,104,134]. The box consisted of Styrofoam^{TM} walls solidified with a wooden frame on the outside, in which we drilled holes to insert the thermocouples



(a)



(b)

Figure 5.7 Schematic (a) and actual picture (b) of the set-up consisting of an insulated 10 cm × 10 cm × 20 cm box with thermocouples installed at different heights that was used to validate the heat transfer model with monodisperse and rough beads of four different materials (here with glass beads).

at various distances from the top lid (Figure 5.7(b)). The particles lay on a fixed aluminum plate at the bottom of the box. At time $t = 0$ s, a hot aluminum plate was applied on top of the granular bed and was maintained at a more or less constant temperature T_h for 4,000 s by a heating plate. We decided to heat up the packed bed from the top to avoid natural convection, if any (we will verify this later). The temperature of the top plate was monitored by the thermocouple probe 0 and its actual temperature evolution over time was used as time-dependent boundary condition in the simulations. The temperature profile in the packed bed was measured over time at different heights with three of the 1/8-inch diameter calibrated thermocouple probes (type K, Omega$^{\text{TM}}$) all connected to a LabVIEW acquisition system. The tips of the thermocouples were located at the center of the box to avoid wall effects. We used nearly monodisperse beads made of four different materials for the packed bed, the properties of which are summarized in Table 5.5, i.e., glass, stainless steel, and two different aluminum alloys. The chemical compositions of the aluminum alloys are given in Table 5.6. As can been seen, the 1100 alloy contains more aluminum than the 7A03 alloy, which explains its higher thermal conductivity. The bottom and top walls were smooth aluminum plates. We thus used the properties of pure aluminum for the walls (Table 5.7) and set a roughness value of $5{\times}10^{-10}$ m, i.e., approaching 0 for the simulations. The fluid properties were taken for air at 50°C and 1 atm (Table 5.8).

To estimate the experimental roughness σ (here approximated by the root-mean-square (RMS) value) and the surface slope τ of the four materials, we characterized the beads using an atomic force microscope (AFM). The images obtained are shown in Figure 5.8 and the equations used to calculate the surface properties from these images read as :

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i}^{N} \frac{Z_i^2}{N}} \tag{5.20}$$

$$\tau = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \tan \overline{\theta} \tag{5.21}$$

where Z_i is the height of each point on the surface relative to the average height of the sample and $\overline{\theta}$ is the average angle of the asperities on the surface. Several correlations exist to link surface slope to surface roughness [135–137]. Nonetheless, these two parameters depend on surface texture, and it is better to measure them independently when possible. We used the definition of Bahrami [138] to calculate τ from the surface image obtained with the AFM (Equation 5.21). The surface texture properties measured by AFM are reported in Table 5.5, as well as other bead properties. Figure 5.8 and Table 5.5 show a significant difference in surface textures between, on the one hand, the glass and stainless steel beads, which have relatively smooth surfaces and, on the other hand, the aluminum alloy beads, which have

rather uneven or rough surfaces.

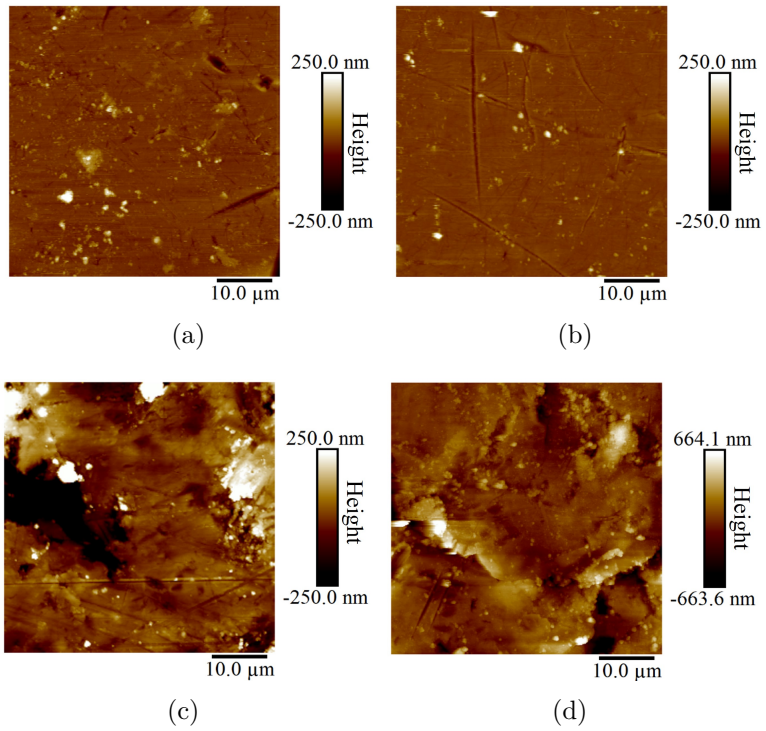


Figure 5.8 Glass (a) and steel (b) beads have more uniform and smoother surfaces than 7A03 (c) and 1100 (d) aluminum alloy beads, as characterized by the AFM images taken at a resolution of 77 nm pixels.

Based on the radii of the particles, the packed beds of glass, steel, 7A03 alloy and 1100 alloy beads resulted in simulations with 2066, 8849, 1878, and 286,139 particles respectively. The experimental porosities of the four packed beds were estimated at 41, 42, 42 and 40 $\pm$ 3%, respectively, whereas the values obtained from the simulations were 44, 40, 44 and 38%, respectively.

As the proposed TDEM model was built on several assumptions, it was worth verifying their validity beforehand. As mentioned earlier, we neglected natural convection and radiation for the simulations. In his thesis, Van Lew [92] showed that natural convection is negligible, even for temperature gradients as high as 400 K/cm, which is much higher than the temperature gradient used in the present study. As suggested by Arpaci et al. [100], to be able to neglect natural convection within the macrogaps, we verified whether the Grashof number (Gr), defined in Equation 5.3, which represents the ratio of buoyancy forces to viscous forces, was lower than 2500 for the worst case scenario of our study (i.e. the largest beads which are the 7A03 aluminum alloy).

Tableau 5.5 Mechanical and thermal properties of the four materials used for the validation simulations.

Properties	**Symbol**	**Glass**	**Steel**	**7A03***	**1100***
Particle radius	r (mm)	5.0	3.2	5.2	1.0
Particle density	ρ (kg/m^3)	2521	7747	2841	2667
Young's modulus	Y (MPa)	5	5	5	5
Original Young's modulus	Y_0 (GPa)	65	200	72	69
Poisson's ratio	ν (-)	0.22	0.29	0.33	0.33
Microhardness	W (GPa)	9	3	1.8	1.8
Coefficient of restitution p/p‡	e (-)	0.8	0.8	0.8	0.8
Coefficient of restitution p/w‡	e (-)	0.8	0.8	0.8	0.8
Coefficient of sliding friction p/p‡	μ (-)	1.0	0.7	1.2	1.2
Coefficient of sliding friction p/w‡	μ (-)	1.0	0.7	1.2	1.2
Coefficient of rolling friction p/p‡	μ_r (-)	0.02	0.02	0.02	0.02
Coefficient of rolling friction p/w‡	μ_r (-)	0.02	0.02	0.02	0.02
Thermal conductivity	k_p (W/m.K)	1	42	125	221
Particle-to-fluid ratio	κ (-)	37	1556	4630	8185
Thermal capacity	C (J/kg.K)	840	464	856	896
Thermal diffusivity	α (m^2/s)	4.7×10^{-7}	1.2×10^{-5}	5.1×10^{-5}	9.2×10^{-5}
Particle RMS roughness†	σ (nm)	25	19	281	154
Particle surface slope†	τ (-)	0.078	0.056	0.117	0.220

*7A03 and 1100 are aluminum alloys

‡p/p and p/w stand for particle-particle and particle-wall interactions respectively

† As measured by atomic force microscopy (AFM)

Tableau 5.6 Alloy chemical compositions (%)

Alloy	**Si**	**Cu**	**Zn**	**Mn**	**Ti**	**Mg**	**Cr**	**Fe**	**Al**
7A03	0.13	2.10	6.35	0.10	0.05	1.46	0.05	0.18	89.58
1100	0.40	0.05	0.05	0.03	0.05	0.45	0.06	0.26	98.65

Tableau 5.7 Wall properties for the simulations.

Property	**Symbol**	**Value**
Young's modulus	Y_w (MPa)	5
Original Young's modulus	$Y_{0,w}$ (GPa)	100
Poisson's ratio	ν_w (-)	0.33
Heat conductivity	k_w (W/m.K)	250
Heat capacity	C_w (J/kg.K)	900
RMS roughness	σ_w (nm)	0.1
Surface slope	τ_w (-)	same as particle
Microhardness	W_w (GPa)	1.8

Tableau 5.8 Fluid properties (air at 50°C and 1 atm).

Property	**Symbol**	**Value**
Density	ρ_f (kg/m^3)	1.1
Heat conductivity	k_f (W/m.K)	0.027
Heat capacity	C_f (J/kg.K)	1006
Dynamic viscosity	μ_f (Pa.s)	1.85×10^{-5}

In this case, T_m is the mean temperature (313 K), L_c is the length of the macrogap (taken as the particle diameter, i.e., 10.4 mm), ρ_{air} is the air density (1.1 $\mathrm{kg\,m^{-3}}$) and μ_{air} is the dynamic viscosity of air (1.85 $\times 10^{-5}$ Pa.s). We estimated the temperature difference in the macrogap ΔT by dividing the total temperature difference between the two plates (40 K) by the height of the packed bed (0.2 m) and by multiplying this value by the length of the macrogap. This calculation gave a Grashof number of 259, which was significantly under the 2500 limit. To be sure that the impact of natural convection was limited to a minimum, we placed a heating source on top of the geometry as previously mentioned (see Figure 5.7).

Radiation can usually be neglected for low temperatures [94, 139]. Following Buonanno et al. [93], it is possible to evaluate the contribution of radiation to heat transfer in our case using the proposed dimensionless number :

$$\frac{radiation}{conduction} \approx \frac{4S\psi T_m^3 d}{k_e} \tag{5.22}$$

where S is the Stefan-Boltzmann constant ($5.67 \times 10^{-8} \mathrm{Wm^{-2}\ K^{-4}}$), ψ is the sphere emissivity (approx. 0.2 for aluminum alloys [140–142]), T_m is the packed bed mean temperature (313 K), d is the sphere diameter (10.4 mm) and k_e is the effective thermal conductivity of the packed bed ($\approx 0.59 \mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$ from Figure 5.2 with k_f =0.027 $\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$). The ratio of radiative transfer to conductive transfer was thus approximately 0.02, which confirmed that radiation can be neglected in the conditions of the present study according to Buonanno et al. [93].

Lastly, a uniform temperature inside each particle was assumed to ease the calculations. This assumption remains valid as long as the Biot number is low. Indeed, the highest Biot number evaluated using a convective heat transfer coefficient of 10.45 $\mathrm{Wm^{-2}K^{-1}}$ (which is valid for systems in a stagnant gas [143]) was equal to 0.1 for the 10-mm glass beads (i.e., the worst case scenario), which was still below the limit of 1. It is, however, worth mentioning that even though we assumed a uniform particle temperature, we still calculated a thermal resistance due to solid conduction within particle $R_{c,i}$.

5.2.4 Numerical simulations to assess the impact of roughness on effective thermal conductivity

As previously shown in Figure 5.2, there are a wide variety of heat transfer behaviors in packed beds, especially at high κ values. This aspect has received little attention in the literature. Our assumption was that this phenomenon can mainly be explained by the impact of the

surface texture or roughness of the particles, which can be characterized for instance by both RMS roughness and surface slope. Unfortunately, very few reports in the literature mention these surface texture characteristics, especially for high κ values, so it was not possible to precisely numerically duplicate any of these experiments by simulations. However, if valid, the TDEM model that we propose and that accounts for surface roughness should also be able to reproduce this wide range of behavior as a function of κ as well as of particle diameter and roughness. This would allow both a qualitative assessment of the validity of the proposed model and its underlying assumption about roughness, and reveal the potential impact of roughness on the effective thermal conductivity of packed beds. To compare the data from the literature given in Figure 5.2 with our model predictions, a series of numerical simulations systematically varying κ, particle roughness and particle diameter were carried out. Then, we numerically calculated the effective thermal conductivity k_e of various packed beds at steady state using a simple and automated method commonly used by a number of authors [86, 94, 104].

We first created a packed bed by randomly deposing particles using the DEM features of LIGGGHTS. Once the bed was stable and still (total kinetic energy less than 1×10^{-7} J as mentioned earlier), we froze the geometry, and we used the modified TDEM model presented in Section 5.2.2 that we implemented in LIGGGHTS to apply a constant temperature at the bottom and top of the geometry. No external load was applied on the packings in this study. We maintained a difference of 100 K in the vertical direction (z) and periodic boundary conditions in the other directions. Once the thermal steady state was reached and a linear temperature profile was established, we evaluated the heat flux q at the wall and calculated k_e such that :

$$k_e = \frac{q}{(T_h - T_c)/L} \tag{5.23}$$

where q, T_h, T_c and L are, respectively, the heat flux at the wall in W.m^{-2}, the temperature of the hot wall (398 K), the temperature of the cold wall (298 K) and the thickness of the packed bed. The dimensions of the box were the same as those suggested in the literature, i.e., $13d \times 13d \times 16d$ [94, 104], where d is the particle diameter, as illustrated in Figure 5.9.

To study the combined impacts of particle diameter and roughness on heat transfer, we ran three sets of simulations with packings of 2-mm, 6-mm and 20-mm diameter beads. The porosities of the packings were 44.2%, 43.8% and 43.7%, respectively. For each of these three sets, we tested eight values of particle conductivity k_p ranging from 0.027 Wm^{-1}K^{-1} ($\kappa = 1$) to 858.9 Wm^{-1}K^{-1} ($\kappa = 31,622$) and three values of surface roughness σ (5×10^{-4} μm, 5×10^{-2} μm and 5 μm). We also used a correlation proposed by [144] to relate the surface

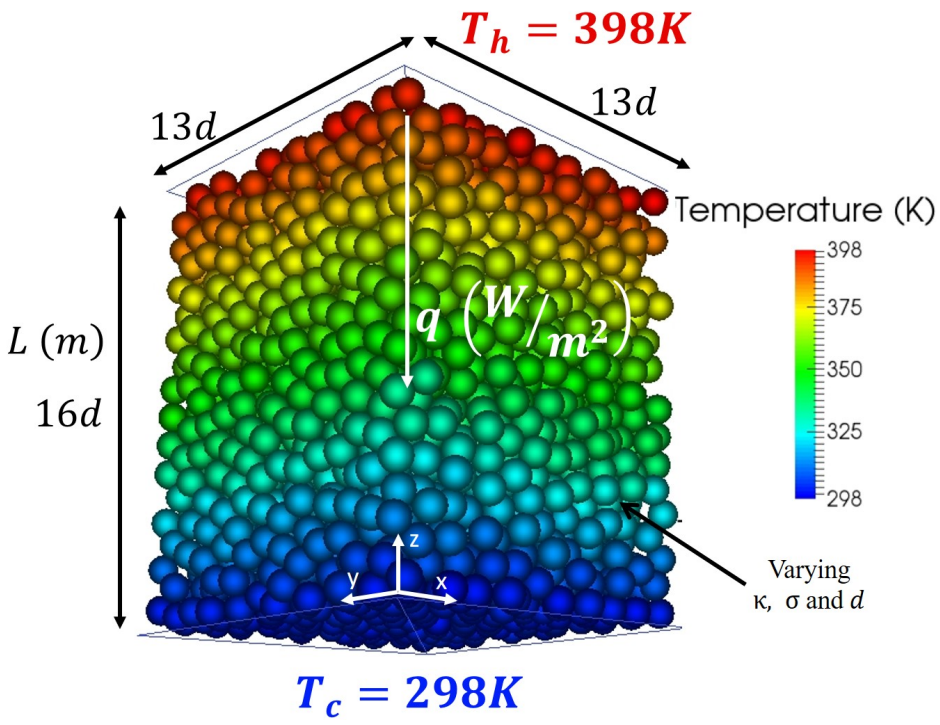


Figure 5.9 To study the impact of roughness on k_e and to compare our model with data from the literature, we numerically generated different packed beds of dimensions $13d \times 13d \times 16d$ with varying κ, d and σ using the DEM features of LIGGGHTS. The heat flux at steady state q was obtained using the proposed TDEM implemented in LIGGGHTS to account for particle roughness.

slope τ to the surface roughness σ through the following equation :

$$\tau = 0.152(\sigma^{0.4}) \tag{5.24}$$

where σ is expressed in μm. We kept all other parameters constant and selected their values, which are summarized in Table 5.9 by averaging all data from the literature presented in Table 5.1 in the Introduction. The parameters for the walls and the fluid (air) are presented in Tables 5.7 and 5.8.

5.2.5 Time step selection

To avoid numerical instabilities in DEM, many authors use a fraction (ξ) of Rayleigh's time (t_R) of wave propagation to set the time step (Δt) so that :

$$\Delta t = \xi t_R \tag{5.25}$$

It has been shown [71] that the energy generated by a shock or a contact is transferred in a solid mostly at the speed of a Rayleigh wave. Thus, the time step must be a fraction of the time a wave takes to cross a whole particle. Rayleigh's time can be calculated using the following equation :

$$t_R = \frac{\pi r}{\beta}\sqrt{\frac{\rho}{G}} \tag{5.26}$$

with :

$$\beta = 0.8766 + 0.163\nu \tag{5.27}$$

$$G = \frac{Y}{2\,(1+\nu)} \tag{5.28}$$

Many authors use a fraction ξ =0.2 to promote stable simulations [52, 73, 74]. We used $\xi = 0.15$ for the DEM simulations to create the packings of particles.

As the TDEM simulations were performed on static packed beds and as granular dynamics were no longer involved, a time step in accordance with the heat conduction process had to be used. Uncoupling the thermal and dynamical problems allowed to use a much larger time step to study the heat transfer behaviors of different materials and thus run multiple shorter simulations for studying the impact of particle roughness. For the thermal problem, the time step must be small enough so that a change in a particle temperature could only influence

Tableau 5.9 Mechanical and thermal properties used for the study of the impact of roughness on k_e.

Parameter	**Symbol**	**Value**
Particle radius	r (mm)	1, 3 or 10
Particle density	ρ (kg/m^3)	2739
Young's modulus	Y (Pa)	5×10^6
Original Young's modulus	Y_0 (Pa)	100×10^9
Poisson's ratio	ν (-)	0.33
Microhardness	W (Pa)	4.7×10^9
Coefficient of restitution p/p	e (-)	0.7
Coefficient of restitution p/w	e (-)	0.7
Coefficient of sliding friction p/p	μ (-)	0.4
Coefficient of sliding friction p/w	μ (-)	0.4
Coefficient of rolling friction p/p	μ_r (-)	0.4
Coefficient of rolling friction p/w	μ_r (-)	0.6
Particle thermal conductivity	k_p (W/m.K)	0.0270, 0.270, 2.70, 8.54, 27.0, 85.4, 270 and 854
Particle-to-fluid ratio	κ (-)	1, 10, 100, 316, 1 000, 3 163, 10 000 and 31 630
Thermal capacity	C (J/kg.K)	1022
Thermal diffusivity	α (m^2/s)	9.6×10^{-9}, 9.6×10^{-8}, 9.6×10^{-7}, 3.1×10^{-6}, 9.6×10^{-6}, 3.1×10^{-5}, 9.6×10^{-5} and 3.1×10^{-4}
Particle RMS roughness	σ (μm)	5×10^{-4}, 5×10^{-2} and 5
Particle surface slope	τ (-)	from Equation 5.24

its immediate neighbors. A criterion was proposed by Zhang et al. [90] such that :

$$\frac{\Delta t}{\rho C V \overline{R_{ij}}} \ll 1 \tag{5.29}$$

where V is the particle volume and $\overline{R_{ij}}$ is an average global contact resistance calculated using Equation 5.16. With the physical and thermal properties of any particle and with the fluid properties, all the resistances can be estimated prior to any simulation, assuming that :

$$a = 0.3\% r \tag{5.30}$$

$$\delta_{n,th} = 0.002\% r \tag{5.31}$$

where a, r and $\delta_{n,th}$ are, respectively, the contact radius, the particle radius and the thermal overlap. These ratios (0.3% and 0.002%) are the average of the ratios obtained in all our simulations with the four materials studied. $\overline{R_{ij}}$ could thus be estimated prior to any simulation and a time step could be calculated. For our simulations, we chose a conservative criterion such that :

$$\frac{\Delta t}{\rho C V \overline{R_{ij}}} \approx 0.01 \tag{5.32}$$

Depending on the roughness and the thermal properties of the particle, the heat transfer can be much faster or slower, requiring time steps that vary over several orders of magnitude, from 0.01 s to 50 s.

5.3 Results and discussion

In this section, we experimentally and numerically examine heat transfer in monodisperse beads forming a packed bed. We first look experimentally at the evolution of temperature over time in different packed beds composed of glass, stainless steel, and aluminum alloy beads with similar porosities (approx. 42%). We then compare the experimental measurements to the numerical data obtained from the proposed TDEM model that accounts for the surface texture or roughness of each material as measured by AFM. Lastly, we numerically examine the impact of particle diameter and roughness on the effective thermal conductivity k_e and suggest that the impact of roughness can explain and reconcile experimental data from various literature sources and numerical model predictions.

5.3.1 Model validation

To validate the proposed TDEM model that considers particle roughness and that was implemented in LIGGGHTS, we compared the predicted temperature evolutions in four different packed beds made of glass, stainless steel and two aluminum alloys with experimental temperature measurements at three different heights in the packed beds as described in Section 5.2.3. Over time, the temperatures measured by the three thermocouples rose, as illustrated in Figure 5.10 for the packed bed of 10.4-mm diameter 7A03 aluminum alloy beads, where T_h is the monitored temperature of the hot lid on top of the granular bed, kept at a temperature of 54 $\pm$ 3° C.

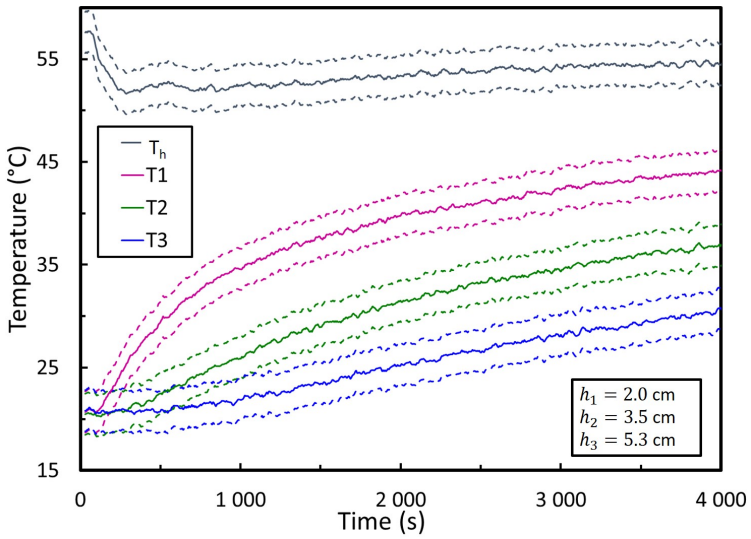


Figure 5.10 Experimental evolution of the temperature at three different heights in the packed bed of 7A03 aluminum alloy. The dashed lines represent the experimental errors of the measurements.

As can be seen in Figure 5.10, the heat transfer process in granular material is very slow. After 4,000 s of heating, the temperature measured by Thermocouple 3 located just 5.3 cm below the hot lid increased from 21°C to 30°C only. A similar slow heating process was observed for all four materials, which was surprising given the differences in the thermal diffusivities of the four materials. Indeed, the thermal diffusivity of the 7A03 aluminum alloy, which depends directly on the thermal conductivity, was more than 100 times that of the glass (see Table 5.5). One possible explanation is that the high thermal diffusivity of aluminum is counterbalanced by another particle property. As can be seen in the AFM images in Figure 5.8, the surface texture of the aluminum alloy beads was significantly rougher than that of the glass and stainless steel beads. This may have contributed to slowing down the heat

transfer process despite the high thermal diffusivity of aluminum. This surprising slow heating process obtained experimentally in the bed of aluminum beads is in fact the main reason for the development of the proposed TDEM model that considers roughness. The slow heating process can also be seen in Figure 5.11, which shows the penetration depth in the packed bed of 7A03 aluminum alloy beads. These images were obtained from the simulations, in which the impact of roughness was added to the TDEM model. As shown in Figure 5.11, even after 4,000 s of heating, all the particles in slightly more half of the bottom of the packed bed were still at the initial temperature.

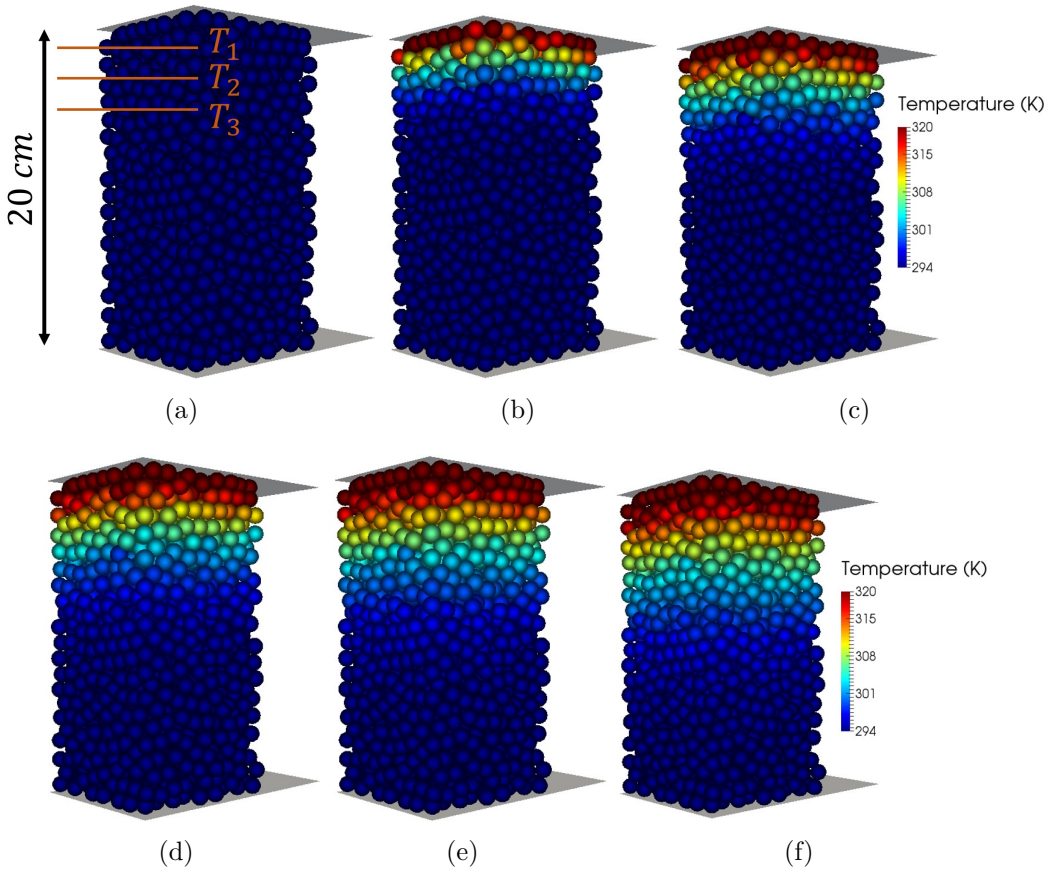


Figure 5.11 Temperature evolutions as predicted by the TDEM model for beads of 7A03 aluminum alloy at 0 s (a), 800 s (b), 1600 s (c), 2400 s (d), 3200s (e) and 4000 s (f) with the top plate set at 327.15 K (54°C).

Figure 5.12 presents the comparisons between the temperatures determined both experimentally and numerically over time (i.e., between 0 and 4000 s) at three different heights (h_1, h_2 and h_3) in the upper part of the four packed beds. In Figure 5.12, the shaded area represents the total experimental error of each thermocouple, combining the thermocouple accuracy (±1.5°C) and the error related to the exact positioning of the thermocouple, which we esti-

mated to be ±1 mm, resulting in an error of ±0.5°C. The width of the shaded area around the experimental values is thus ±2°C.

In addition to the experimental data, the figure presents two sets of numerical data generated with the proposed TDEM model : (1) one set for which the model was run using the RMS roughness and surface slope values obtained from the AFM images (see Figure 5.8 and Table 5.5) for the model parameters σ and τ (referred to as "with roughness" in Figure 5.12), respectively, and (2) another set for which we took $R_s = R_g = 0$ (referred to as "without roughness" in Figure 5.12), resulting in a case with perfectly smooth particles to determine the impact of the addition of the roughness on the predictions by the numerical model. Overall, the predicted temperatures accounting for particle surface texture (i.e., numerical data with roughness) were in reasonable agreement with the experimental measurements for all three thermocouples as all the data are, for the most part, close to or within the experimental errors. Only the data for stainless steel beads appeared to deviate from the experimental data over time. Note, however, that as there was no significant impact of roughness on the numerical predictions for the glass and steel beads, Figures 5.12(a) and 5.12(b) actually present only a single set of numerical data, and thus this deviation could not be attributed to the extension of the TDEM model to rough surfaces but to other causes that will be discussed in the next paragraph. The absence of any impact of roughness on the numerical predictions for the glass and steel beads can be explained by the smooth surfaces of these two materials observed by AFM (see Figures 5.8(a) and 5.8(b)). A more detailed explanation based on the analysis of each thermal resistance in the network is given in Section 5.3.2. On the other hand, as can be seen in the "without roughness" numerical data in Figures 5.12(c) and 5.12(d), not taking the uneven surface texture of the two aluminum alloy beads into account (see Figures 5.8(c) and 5.8(d)) had a detrimental impact on the quality of the agreement between the experiments and simulations, as the simulations overpredicted the amount of heat transfer.

Figure 5.12 also presents the evolution of temperature measured with two existing TDEM models, i.e., the TDEM model proposed by Komossa et al. [85] that we implemented in LIGGGHTS and the original TDEM model included by default in the open-source software LIGGGHTS, which only considers heat transfer in the solid phase. The total heat conductance H_{ij} of the TDEM model implemented by default in LIGGGHTS is the one suggested by Batchelor and O'Brien [88] and defined in Equation 5.4, within one constant, $\sqrt{\pi}$. It is thus well-suited for situations of heat transfer through spheres in vacuum. Komossa et al.'s TDEM model [85] considers both the gas macrogap and the contact area pathways. However, both models neglect the surface texture effect. According to Figure 5.12(a) which represents the packed bed made of glass beads, the model from LIGGGHTS (dashed lines) is unable of reproducing the experimental data. Indeed, the thermocouples 2 and 3 have not risen at

all in the simulations, whereas there is a clear elevation in the experimental data. This is explained by the fact that most of the heat transfers through the gas phase in a packed bed made of glass beads with $\kappa = 37$. We will quantify this proportion in Section 5.3.2. For the packed bed made of 1100 aluminum alloy beads (Figure 5.12(d)), both the models from LIGGGHTS and Komossa et al. overpredict the elevation of temperature at the three different heights, which seems to support our hypothesis of the impact of roughness. Indeed, for that material, our TDEM with particle roughness falls within the experimental errors, whereas the results from our TDEM model without roughness or from the other two TDEM models presented are well beyond the experimental errors.

Overall, the addition of particle roughness into the TDEM model improved the quality of the numerical predictions for the aluminum alloy beads. Furthermore, the strength of the proposed TDEM model is to give reasonable results for the four materials presented, i.e. for a wide range of κ. This was the main objective sought with the development of this model.

Despite the overall reasonable agreement obtained between the simulations and the experiments, with respect to experimental uncertainties related to thermocouple accuracy and actual positioning, it is worth mentioning several other possible sources of discrepancies. Note that no calibration were done here, and the data points shown are those obtained directly using all the physical, mechanical and thermal particle properties that we measured (e.g. ρ, σ, τ, d) or found in supplier data sheets or in tabulated data in the literature (e.g. Y_0, ν, e, μ_C, k_p, C, W), as reported in Table 5.5. A slight variation to any of those variables would in all likelihood have an impact on the numerical predictions. For the aluminum alloys, while the results are accurate within the experimental errors, it is possible that slightly different values of σ and τ measured with the AFM would have impacted the agreement obtained. As can be seen in Figures 5.12(c) and 5.12(d), we always slightly overpredicted the experimental temperatures. Greater roughness would have decreased the predicted temperature and improved the comparisons. Indeed, the roughness and surface slope parameters were not easy to measure experimentally and their magnitude can be significantly affected by the size of the measurement area [145]. We scanned an area of 50 μm $\times$ 50 μm using the AFM to obtain the roughness and surface slope values. We feel that a sample of this size is well representative of the glass and steel beads, which have more uniform surfaces (Figures 5.8(a) and 5.8(b)). However, we are less confident that the values obtained for the aluminum beads are necessarily very accurate, given the heterogeneity of the aluminum surface (Figures 5.8(c) and 5.8(d)). More AFM images would have been better and a different surface texture measurement technique such as laser profilometry could have been used [116]. However, the agreement was satisfactory, and the proposed model predicted the heat transfer process in four materials with different κ values with reasonable accuracy. These validation tests also

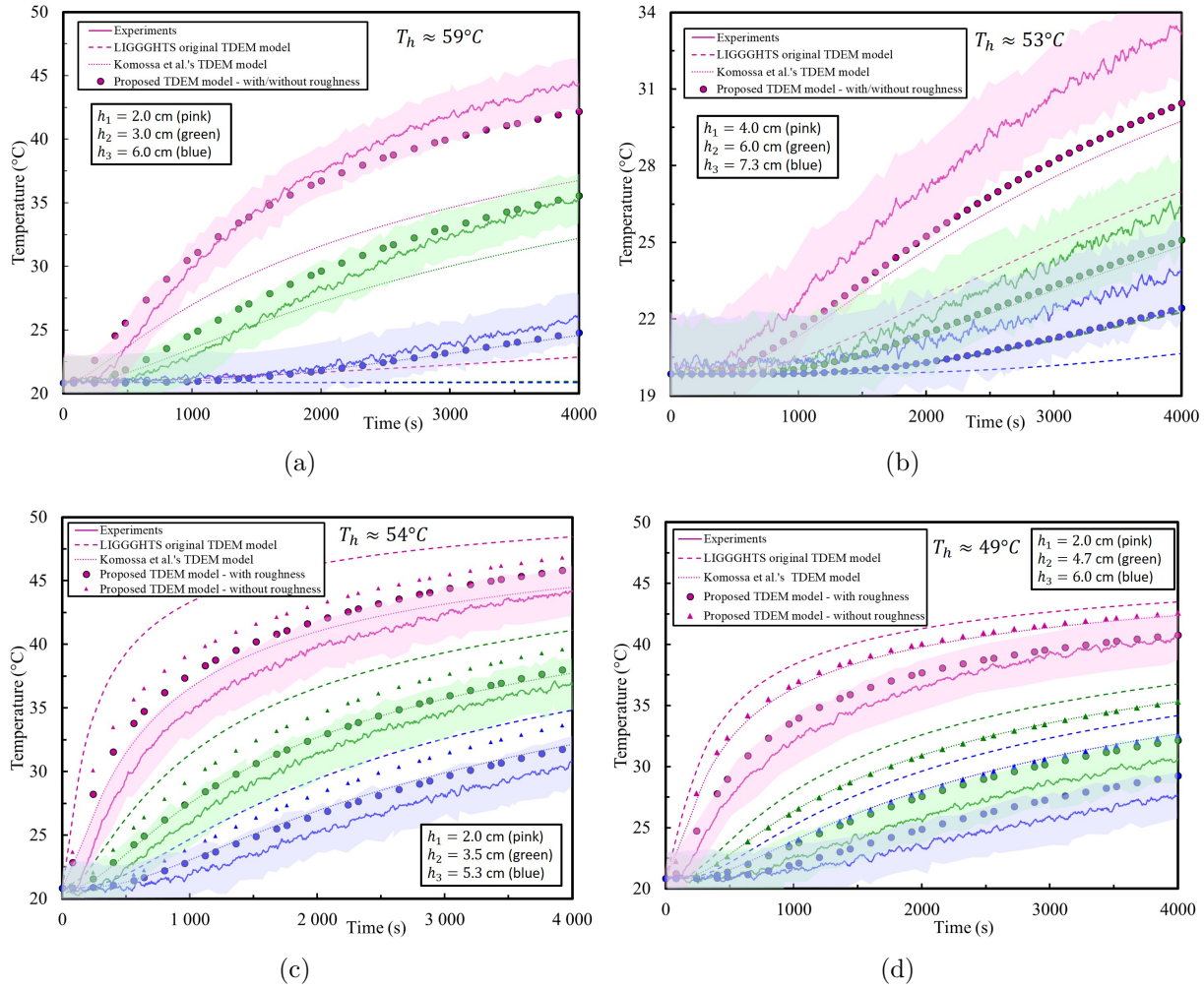


Figure 5.12 Comparison of experimental data and numerical predictions for the evolution of temperature over time at different heights (noted h_1, h_2 and h_3 as per Figure 5.7(a)) in packed beds of glass (a), stainless steel (b), 7A03 aluminum alloy (c) and 1100 aluminum alloy (d) beads, with a hot plate at temperature T_h placed on the top of the packing. The shaded area (±2.0°C) represents the overall estimated experimental error.

showed the importance of taking the impact of roughness into account when comparing model predictions with experimental data as with the aluminum alloy beads. It would be interesting to use the proposed TDEM model to gain more insight into why roughness impacts the two aluminum alloy beads but not the glass and steel beads. This will be discussed in the next section.

Lastly, based on the temperature evolutions at different heights in the four different packed beds, we calculated the effective thermal conductivity of each granular bed using the methodology presented in Nozad et al. [108] in order to compare the values obtained from our experiments, from the simulations with our proposed TDEM model and with Komossa et al.'s model, to correlations in the literature and to another existing TDEM model [104]. We selected two correlations suggested by Van Antwerpen et al. [111] in their review, namely the correlation from Hsu et al. [126] and the ZBS model [127] and we also compared with a fitted correlation from Qi and Wright's [104] TDEM model predictions (see Figure 5.2). The two correlations consider the heat transfer mechanisms through the fluid, through the contact area and through radiation (here neglected by setting $\kappa_r = 0$ in Equation 5.7). We used the same contact area constants as Van Antwerpen et al. [111] to evaluate the correlations, i.e. $\gamma_c = \psi = 0.01$ in Equations 5.6 and 5.7. Table 5.10 presents the results of the effective thermal conductivity (k_e) normalized by the fluid thermal conductivity (k_f) for the four materials studied. The uncertainty associated with the experimental values were evaluated from repeated experiments. The values resulting from the TDEM models or from the correlations are presented along with the relative error between their predictions and the experimental data.

As can be seen from Table 5.10, the predictions from the proposed TDEM model with the particle roughness outperforms all other correlation and TDEM model predictions, specifically for the two aluminum alloys. It is important to remember here that none of the correlations reported by Van Antwerpen et al. [111] neither the TDEM proposed by Qi and Wright [104] considered the particle roughness. Therefore, they are meant to predict the effective thermal conductivity of packed beds made of perfectly smooth beads, but fail to accurately represent the heat transfer in rough beads. Our TDEM predicts very well the effective conductivity of glass beads (within 1%) and 7A03 alloy beads (3%). Again, the larger errors on steel beads (36%) and 1100 alloy beads (34%) seem reasonable when compared to the existing correlations that do not consider the particle roughness. Most importantly, our TDEM model appears to best predict experimental values over a much wider range of κ, which was again the goal sought with the development of this model.

Tableau 5.10 Comparison of the effective thermal conductivity of the packed bed normalized by the fluid thermal conductivity measured experimentally and predicted by TDEM models and correlations from the literature.

	Glass	**Steel**	**7A03**	**1100**
κ (-)	37	1556	4630	8185
		$\boldsymbol{k_e/k_f}(-)$		
Experiments	6.7 ±0.5	18.8 ±3	22.1 ±3	17.9 ±3
Our proposed TDEM model	6.6	12.1	22.8	23.9
Error (%)	1	36	3	34
Hsu et al. correlation [126]	0.9	12.5	35.8	63.9
Error (%)	87	34	62	257
ZBS model [127]	6.7	28	54.4	83.3
Error (%)	0	49	146	365
Komossa et al. TDEM model [85]	7.3	21.1	25.6	38.9
Error (%)	10	12	16	117
Qi and Wright TDEM model [104]	4.6	18.0	39.9	65.3
Error (%)	31	4	81	265

5.3.2 Local heat transfer mechanisms

In this section, we use the values of the resistances calculated from the model (Table 5.3) to explain the heat transfer mechanisms at the local scale between two particles in contact. For all four materials studied, the associated resistance values are reported in Table 5.11. These resistances can all be estimated prior to a simulation, based on the physical and thermal properties of the particles and the properties of the fluid, as explained in Section 5.2.5.

In Table 5.11, we combined the resistances R_s and R_g, both of which are involved in heat transfer at the contact area, to give R_{eq}. We then summed all the resistances of each pathway to give the resulting resistances of the contact area R_{CA} and of the macrogap R_{MG} (see Figure 5.3). The contact conductance (Equation 5.17) is also given, as well as the fraction of the heat flux that goes through each pathway, which is obtained by dividing the conductance of each pathway by the total contact conductance H_{ij}.

Table 5.11 provides a great deal of information on local heat transfer between two contacting particles for different κ values. First, we see that the individual values of the various resistances range over many orders of magnitude (e.g., with R_c and R_g for the 1100 alloy beads). However, the resulting resistances for each pathway (R_{CA} and R_{MG}) are more comparable. We see that they are very similar in the case of the 1100 alloy beads but are very different for the glass beads and indicate that 99.2% of the heat goes through the macrogap pathway

Tableau 5.11 Comparison of the various resistance and conductance values obtained on average for all four materials examined in the validation study.

	Glass	**Steel**	**7A03**	**1100**
κ (-)	37	1556	4630	8185
R_s	13,630	102	158	678
$R_L = R_{L,i} + R_{L,j}$	33,333	1,250	267	754
$R_c = R_{c,i} + R_{c,j}$	100	4	1	2
R_g	27,120	54,418	87,754	1,428,803
R_G	254	420	254	1,534
$R_{eq} = \left(\frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_g}\right)^{-1}$	9,071	102	158	678
$R_{CA} = R_L + R_{eq}$	42,404	1,351	424	1,432
$R_{MG} = R_c + R_G$	354	424	255	1,536
R_{ij}	351	323	159	741
$H_{ij}(\times 10^{-3})$	2.8	3.1	6.3	1.3
$H_{CA}(\times 10^{-3})$	0.02	0.7	2.4	0.7
$H_{MG}(\times 10^{-3})$	2.8	2.4	3.9	0.6
Contact area ratio (%)	0.8	23.9	37.5	51.8
Macrogap ratio (%)	99.2	76.1	62.5	48.2

for the glass beads, compared to 48.2% for the 1100 alloy beads (Figure 5.13). This means that the whole contact area pathway can be neglected without having a major impact on the results for the glass beads. This also explains why a TDEM model that does not consider heat transfer in the gas (such as LIGGGHTS default model) fails completely to reproduce the heat transfer process in a packed bed made of glass beads where 99.2% of the heat transfers through this pathway (see Figure 5.12(a)). For the other three materials, however, according to our results, the transfer is shared between the two pathways, meaning that neither of them can be neglected. Surprisingly, the macrogap pathway is still responsible for 48.2% of the heat transfer for the 1100 alloy beads ($\kappa = 8,185$), which means that heat transfer in the fluid cannot be neglected in this case, and *a fortiori* in all other cases studied neither. This finding contradicts the conclusions of Qi and Wright [104], Argento and Bouvard [105], Liang et al. [106] and Zhou et al. [94] who respectively found that conduction in the fluid can be neglected when κ is higher than 1000, 2000, 2500 and 4000. However, these authors only considered smooth particles. This discrepancy can thus be attributed to the rough surface texture of the aluminum alloy beads, which significantly reduces conductance through the contact area pathway.

Table 5.11 shows that roughness resistance (R_{eq}) is not negligible with respect to constriction/spreading resistance (R_L) for all materials tested except steel. Indeed, resistance R_{eq} is

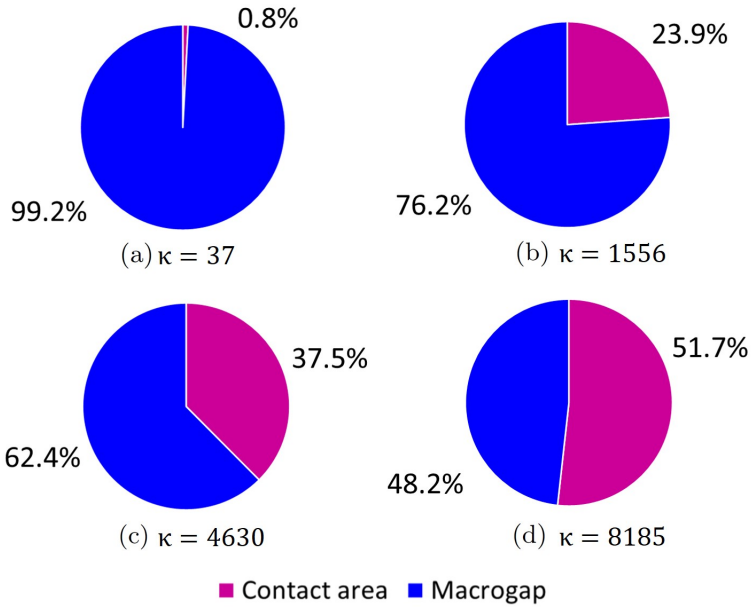


Figure 5.13 Fraction of the average total heat contact conductance for the two pathways calculated from the thermal resistances for the four materials : glass (a), steel (b), 7A03 alloy (c) and 1100 alloy (d) beads.

equal to 21%, 8%, 37% and 47% of the total resistance of the contact area pathway R_{CA} for the glass, steel, 7A03 alloy and 1100 alloy beads, respectively. For roughness to play an important role in the global heat transfer through the packed bed, the contact area pathway must be significant, as is the case for the steel and the aluminum alloy beads (see Figure 5.13), and roughness must be important within this pathway, which is true for glass and the aluminum alloy beads. This explains why the addition of the roughness-related resistances (R_s and R_g) only had an impact on the simulations of the aluminum alloy beads (Figures 5.12(c) and 5.12(d)), improving the comparison of the model predictions with the experimental results, whereas it had no impact on the results of the glass (contact area pathway not significant) and steel beads (R_{eq} not significant within the contact area pathway), which are thus not shown in Figures 5.12(a) and 5.12(b).

The model presented here with the resistance network is thus a more universal model that is useful for determining which pathway can be neglected. It also provides a better understanding of the local heat transfer mechanisms and the relative importance of each mechanism.

5.3.3 Impact of roughness on the effective thermal conductivity of packed beds

As previously seen in Figure 5.2, the effective thermal conductivity values measured experimentally for packed beds were significantly more scattered at high κ values than at lower values and, to our knowledge, this has never been mentionned in the literature nor explained by any model or mechanism. In order to reconcile the numerical predictions with the experimental data, the proposed TDEM model, which considers particle roughness, was tested. As mentioned in Section 5.2.4, it was not possible to reproduce exactly all the experiments because most of the papers do not report the experimental roughness σ, the surface slope τ or the microhardness W of their beads, which are all required in our model. Our aim was rather to demonstrate that the proposed model has the ability and enough degrees of freedom to reconcile all the data in the literature. To do so, it is worth recalling that all these experiments were performed with beads of different materials and diameters in different fluids, which are summarized in Table 5.1. In addition, the experimental conditions varied considerably. Based on the listed experiments, the particle diameters ranged from 0.054 mm to 25.4 mm, the κ values from 0.25 (acrylic in water [113]) to 41,787 (copper in Freon-12 [101]), Young's modulus from 3 GPa (acrylic) to 210 GPa (nickel), microhardness values (found in different databases) from 441 MPa (brass) to 9000 MPa (glass) and ρC_p from 1.7×10^6 $\mathrm{JK^{-1}m^{-3}}$ (magnesium) to 3.9×10^6 $\mathrm{JK^{-1}m^{-3}}$ (nickel). As explained in Section 5.2.4, we thus ran simulations with different parameters that we thought would have the most impact on the effective thermal conductivity of a packed bed, i.e., particle diameter, thermal conductivity and roughness while keeping all the other parameters constant. These results are presented in Figure 5.14. The experimental data from the literature (except that from Cheng et al.) from Figure 5.2 are superimposed and are sorted by diameter to make them easier to compare. For clarity, only the simulation results for the 2-mm and 20-mm particles are presented, and the graph is plotted in log-log scale to allow for easier inspection of the results at low κ values.

Overall, changing the diameter in the 2 to 20 mm range and the roughness values in the 5×10^{-4} to 5 μm range explains most of the variability observed in the effective thermal conductivity data from the literature (normalized to the thermal conductivity of the surrounding fluid) as a function of κ values given in Figure 5.14. Results obtained with the 6-mm particles fell in between the green and pink curves (not shown here to not overload the Figure). In particular, changing the roughness value from rough (5 μm) to smooth (5×10^{-4} μm) explains the large scattering of data usually observed at high κ values, which supports the results of Buonanno et al. [116], who showed that rougher particles give less conductive packed beds. Indeed, a rougher surface creates less intimate contact between two particle surfaces and, as a result, heat transfer is impaired. For particles with a low thermal conductivity,

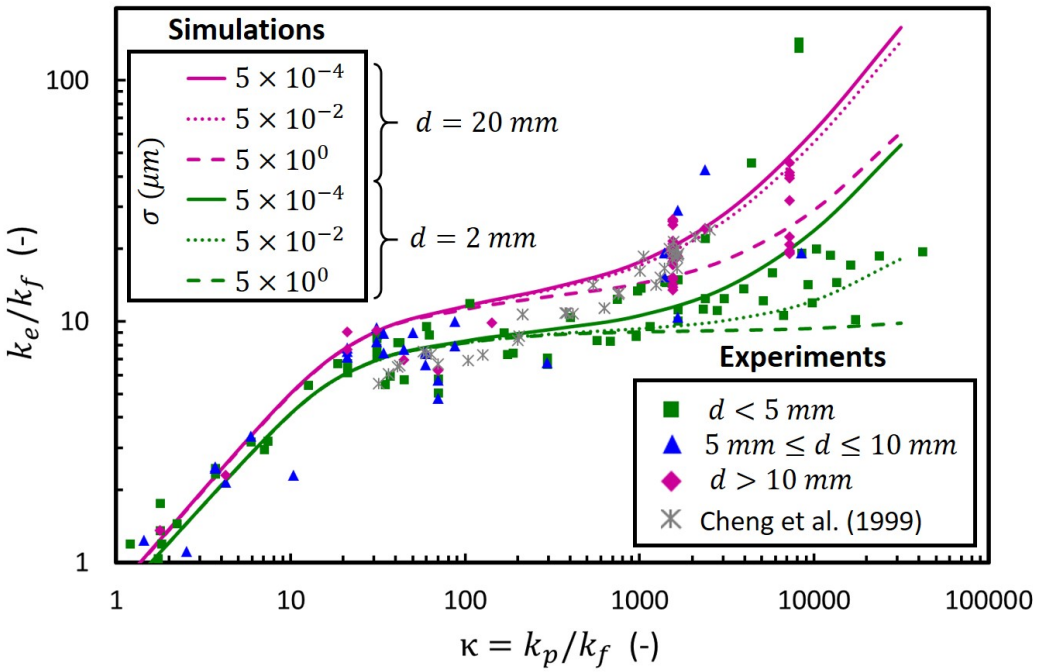


Figure 5.14 By varying the roughness and the diameter of the beads, the proposed TDEM model is able to reconcile the numerical predictions and the experimental measurements of k_e for all κ values and explain the scattering of the experimental data at high κ values.

this impact is less pronounced because a large fraction of the heat transfer passes through the fluid (the macrogap pathway in Figure 5.4) instead of the contact area pathway. On the other hand, for particles with a high thermal conductivity, most of the heat transfer passes through the contact area pathway. As such, if this pathway is hindered by surface roughness, the impact will be much greater on the heat transferred through the packed bed. For instance, we observed a marked decrease in k_e for highly conductive particles when we increased σ, but observed no effect for κ values under 200. This graph confirms that roughness is a very important parameter that cannot be neglected when modelling heat transfer in granular materials, especially when $\kappa >\sim 3000$, where the impact of roughness is more pronounced. This confirms the importance of measuring the roughness of the materials and taking roughness into account in TDEM models in order to accurately predict heat transfer. Indeed, if we assume smooth particles, as is the case in most TDEM models, we risk overestimating heat transfer and thus the temperature profiles and the transient evolution of temperature in a reactor, especially for particles with high κ values. Figure 5.14 also shows the data collected by Cheng et al. [96] (gray stars) for which diameters were not readily available but that were used to validate Qi and Wright's [104], Zhou et al.'s [94] and Oschmann et al.'s [86] models. Since these data points are located between $30 < \kappa < 2500$, this would explain why these models, which do not consider roughness, still gave good predictions.

Figure 5.14 also sheds light on the debate regarding the impact of diameter on heat transfer in granular materials. Overall, larger particles promote heat transfer according to our model, but a nuance must be made. We see now that for $\kappa < 10$, multiplying the diameter by a factor of 10 only has a marginal impact on the effective thermal conductivity of the packed bed, supporting the findings of Zhou et al. [94] and Gan et al. [107]. However, for higher κ values, a larger diameter results in a higher effective conductivity, when all the other parameters are kept constant. This effect can be studied by examining the thermal contact network presented herein. When the particle diameter increased by a factor p ($p = 10$ in Figure 5.14), the contact radius a and the overlap $\delta_{n,th}$ between two particles in contact increase on average by the same ratio across all contacts in the particle bed. Knowing this and knowing the definitions of all the thermal resistances in the network (Table 5.3), we found that increasing the diameter by a factor p, $R_{c,i}$, $R_{L,i}$ and R_G decreased by the same factor, while R_s and R_g decreased by a factor p^2. Since all the thermal resistances decreased, it is normal, when all other parameters are kept constant, that the effective thermal conductivity of a packed bed made of larger particles increases, as shown in Figure 5.14 with 2-mm and 20-mm particles. Furthermore, the fact that R_s and R_g, the resistances related to roughness in the contact area pathway, decreased by a factor p^2 rather than p like all the other resistances, also explains why particles with high κ values are more impacted by this difference in diameter. Indeed,

for a given roughness, the green and purple curves in Figure 5.14 are further apart when κ is high because more heat travels through the contact area pathway and is thus impacted by R_s and R_g, which are in turn more affected by the change in diameter. It is also interesting to note that, at $\kappa = 31,622$, the effective-to-fluid thermal conductivity ratio (k_e/k_f) of a rough ($\sigma = 5\mu$m) 20-mm particle was almost the same as a smooth ($\sigma = 5 \times 10^{-4}\mu$m) 2-mm particle ($k_e/k_f \approx 57$). This means that the high surface roughness and thus the number of asperities on the surface of the large spheres reduced the real contact area and made it equivalent to that of a perfectly smooth 2-mm particle.

Lastly, we also found that adding the resistances $R_{c,i}$ and $R_{c,j}$ allowed the model to detect a further decrease in k_e/k_f at low κ values (after a shoulder in the relationship for $10 < \kappa < 500$ observed both experimentally and numerically) and thus match the experimental data, unlike previous models that show an asymptotic monotonical decrease for $\kappa < 500$ (see Figures 5.1 and 5.2, for example). In other TDEM models where $R_{c,i}$ and $R_{c,j}$ are neglected, particle thermal conductivity cannot influence heat transfer when it is dominated by the macrogap pathway because k_p does not appear in the interstitial gas conduction resistance R_G. We thus obtain an asymptote for the entire left part of the graph (as seen clearly with Komossa et al.'s model in Figure 5.2), and the effective thermal conductivity of granular materials with $\kappa < 10$ is thus overestimated. Our proposed TDEM model is able to represent this change in behavior thanks to the addition of the solid conduction resistance R_c in the macrogap pathway.

5.4 Conclusions

The effective thermal conductivity of packed beds made of monodisperse spherical particles was studied numerically over a wide range of particle-to-fluid thermal conductivity ratios using the open-source LIGGGHTS software to which we added a new heat transfer model to account for the surface texture of the particles. This model relies on a network of thermal resistances at the contact point between pairs of touching particles and takes into account the conduction in the surrounding fluid and in the solid particles themselves. The surface texture of the particles, a property mostly neglected in TDEM models, is taken into account and characterized by way of the RMS roughness and surface slope measured by AFM. The model was validated using experimental measurements of temperature evolution over time in packed beds of beads of four different materials (i.e., glass, stainless steel, 7A03 alloy and 1100 alloy beads) with different surface textures. Furthermore, when confronted with a large body of effective thermal conductivity measurements reported in the literature, the proposed model was able to qualitatively reconcile the numerical predictions and most of the data in

the literature by varying three main variables, that is, the particle size, the particle-to-fluid thermal conductivity ratio and particle roughness. We showed that heat transfer through a packed bed of rougher particles is indeed hindered due to asperities on the surface of the particles, leading to a less intimate contact. This impact of surface texture was more pronounced for granular materials with a high thermal conductivity such as aluminum beads because a very large fraction of the heat transfers through the solid microcontact rather than the interstitial fluid, as can be understood from an in-depth analysis of every thermal resistance in the network on which the proposed TDEM model is based. A similar analysis of the glass beads, which have much lower thermal conductivity, showed that most of the heat is, in this case, transferred through the stagnant interstitial fluid rather than the solid microcontact and that roughness thus becomes an unimportant parameter.

These results provide an overall understanding of heat transfer through packed beds by revealing that the impact of particle roughness on the effective thermal conductivity of packed beds is limited to high particle-to-fluid thermal conductivity ratios and thus explains the wide scattering of data observed in the experimental literature in this range of particle-to-fluid thermal conductivity ratios, as opposed to the much lower variability obtained at lower ratios. To our knowledge, this is the first time that such a detailed mechanistic explanation has been provided.

Our results showed that heat transfer in granular materials is a very complex and non-linear phenomenon in which many parameters are involved, the importance of each parameter depending on the other ones. One must thus be very careful when neglecting a heat transfer pathway to simplify a heat transfer model in TDEM. The analysis of the value of every resistance present in the network can be done prior to any TDEM simulation. This provides valuable information about local heat transfer at the contact point and about the importance of each pathway and is a very useful tool for deciding whether a pathway can be neglected or not depending on the properties of the beads being used.

5.5 Acknowledgments

The authors thank Calcul Québec, Compute Canada, OCP, Mohammed VI Polytechnic University (UM6P) and the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada for computational resources and funding. The authors also acknowledge financial support from the Simulation-Based Engineering Science (Génie Par la Simulation) program funded through the CREATE program of the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada. The authors would like to thank Patricia Moraille for the AFM measurements, and Maxime Beaudoin and Bertrand Beaulieu for their contribution to fabricating the set-up.

Nomenclature

Roman letters

a : contact radius (m)
A_c : contact area (m^2)
A_f : characteristic area perpendicular to the heat flux in the fluid (m^2)
A_s : characteristic area perpendicular to the heat flux in the solid (m^2)
Bi : Biot number (-)
C : heat capacity ($J/kg\dot{K}$)
c : correction factor (-)
d : particle diameter (m)
$\mathbf{F_{c,ij}}$: contact force between particles i and j (N)
$\mathbf{F_{nc,ik}}$: non-contact force between particles i and k (N)
$\mathbf{F_{g,i}}$: gravitational force acting on particle i (N)
$\mathbf{F_{i,f}}$: interaction force between particle i and a fluid f (N)
G : shear modulus (Pa)
h : particle convective heat transfer coefficient (W/m^2K)
H : heat conductance (W/K)
I_i : inertia of particle i ($kg \cdot m^2$)
k_e : effective thermal conductivity (W/mK)
k_f : fluid thermal conductivity (W/mK)
k_p : particle thermal conductivity (W/mK)
$k_{n,ij}$: numerical normal stiffness (Pa.m)
$k_{t,ij}$: numerical tangential stiffness (Pa.m)
L : packed bed height (m)
l : distance between centroids (m)
L_f : characteristic length parallel to the heat flux in the fluid (m)
L_s : characteristic length parallel to the heat flux in the solid (m)
M : gas parameter (m) (Table 5.4)
m : particle mass (kg)
N : gas parameter (m) (Table 5.4)
n : number of particles in the simulation (-)
Q_{ij} : rate of heat transferred between particles i and j (W)
q : heat flux (W/m^2)
r : particle radius (m)
R : thermal resistance (K/W)

S : Stefan-Boltzmann constant ($5.67 \times 10^{-8} W/m^2K^4$)
SC : simple cubic
T : temperature (K)
t_R : Rayleigh time (s)
$\boldsymbol{T_{ij}}$: torque calculated between particles i and j in contact ($N \cdot m$)
T_m : mean temperature of the packed bed (K)
V : particle volume (m^3)
W : particle microhardness (Pa)
Y : Young's modulus (Pa)
Y_0 : original Young's modulus (Pa)

Greek symbols
α : heat diffusivity (m^2/s)
β : DEM parameter of restitution (-) (Table 5.2)
δ : DEM overlap (m)
ϵ : packed bed porosity (-)
γ_n : Normal damping ($Pa^{1/2}kg^{3/4}$) (Table 5.2)
γ_t : Tangential damping ($Pa^{1/2}kg^{3/4}$) (Table 5.2)
κ : ratio of particle heat conductivity on fluid heat conductivity (-)
λ_h : harmonic mean of variable λ $\left(\lambda_h = \frac{2\lambda_i\lambda_j}{\lambda_i+\lambda_j}\right)$
μ_C : Coulomb sliding friction coefficient (-)
μ_r : rolling friction coefficient (-)
ν : Poisson's ratio (-)
Θ : lower limit of κ to neglect fluid conduction (-)
$\boldsymbol{\omega_i}$: angular velocity of particle i ($\frac{rad}{s}$)
ψ : particle emissivity (-)
τ : mean absolute surface slope (-)

Subscripts
d : dynamical
e : effective
f : fluid
i : particle i
ij : between particles i and j
n : normal
p : particle

r : rolling

s : solid

t : tangential

th : thermal

w : wall

CHAPITRE 6 ARTICLE 2 : IMPACT OF GRANULAR SEGREGATION ON HEAT TRANSFER IN A HORIZONTAL ROTATING DRUM

Christine Beaulieu, David Vidal, François Bertrand and Jamal Chaouki
Submitted to AIChE Journal

Abstract To study the impact of granular segregation on heat transfer in rotary kilns, a thermal discrete element method-based model incorporating a thermal resistance network was developed for bidisperse particulate blends. It was validated using a system of glass and aluminum beads differing in size. The harmonic mean radius was found to best represent bidisperse contacts. Heat transfer in six different segregated bed structures in a wall-heated drum for two particle size ratios was studied. Granular segregation significantly influenced the temperature profiles in the beds, dragging down the temperature of the centre of the bed, where a core of smaller particles had formed. This resulted in an inverse relationship between the effective heat transfer coefficient of the bed and the intensity of segregation. Within the segregated cases investigated, the temperature difference between the large and small particles could be up to 30 times higher than that of a well-mixed configuration.

Keywords Thermal discrete element method ; Granular segregation ; Heat transfer ; Rotary kiln

6.1 Introduction

In many industrial operations, for instance waste pyrolysis, cement sintering, calcination processes or drying processes, granular materials are indirectly heated by contact with a hot wall in a rotary kiln. Rotary kilns are often used to handle granular materials thanks to their versatility and because of their low shear stress on the particles [85,146,147]. Their operation, such as for the pyrolysis of scrap tires to produce biofuel, involves a complex reaction that requires high temperatures and the absence of oxygen in the equipment, which therefore means a strict control of the process. However, indirect heating from the wall generates large temperature gradients inside the drum. In addition, the reaction within the reactor generates particles of different sizes, leading to the potential appearance of areas of segregation in the drum and a non uniform bed. This phenomenon is believed to result in greater variability in the behavior of such reactor that becomes more difficult to process and control, which can lead to unsafe and non-optimized operations and energy waste.

Despite the significant effort made to better understand and adequately predict heat transfer in granular materials in rotating drums, only one work considers particles of different sizes and thus with the capability of segregating [122]. To study the granular material dynamics and thermodynamics, researchers have relied on both experimental and numerical work. The thermal discrete element method (TDEM) has been widely used in recent years because it makes it possible to obtain the position and temperature of every particle in the system, among other properties.

In monodisperse rotary kilns, many researchers have used experiments or simulations to study heat transfer. Some authors have taken an interest in developing an overall heat transfer coefficient in the drum and looked at the impact of different parameters such as the drum rotational speed or the material properties on this coefficient ([80, 85, 147, 148]). Chaudhuri et al. [120] numerically determined that the rotational speed of the drum had a minimal impact on the heat transfer process, contradicting the results of Komossa et al. [85] and Liu et al. [148], who found that increasing the speed enhanced heat transfer. Wang et al. [149] numerically observed that the temperature in a bed containing hot and cold particles homogenizes faster with larger particles and a higher rotational speed.

However, particles used in different industrial processes are rarely monodisperse. When particles of different sizes are mixed in a rotating drum, segregation tends to bring particles with similar properties together. Agitating a system of granular material has thus the impact of *demixing* it. Granular segregation can be caused by a difference in particle size, density, shape or surface texture [19]. In a rotating drum, granular segregation can occur in both the radial and axial directions with the latter being very slow [26, 28]. On the other hand, radial segregation can appear in the first drum rotations [28]. In indirectly heated rotary kilns, heat also progresses in the radial direction, i.e., from the wall to the middle of the bed of particles. It is therefore logical to think that radial segregation can impact heat transfer. It is commonly accepted in the literature that the dominant mechanisms that drive radial segregation in a rotating drum are percolation (driven by size difference) and buoyancy (driven by density difference) [20–22]. The segregation mainly occurs in the active layer of particles. Indeed, when a drum is rotating, two zones develop in the granular materials under the free surface : the active layer and the passive layer [32]. The particles rotate with the drum wall as a solid body motion in the passive layer. As for the active layer located just under the free surface, this is where most of the mixing/segregation occurs [22, 32]. In a rotating drum, the most common segregation pattern, which occurs for intermediate rotational speeds and a defined range of size ratios under 4 approximately [25], is called the classical core segregation [21, 22, 29, 30, 33, 150]. In this pattern, percolation (also referred to as sieving in [19]) makes the smaller or denser particles accumulate in the middle core of the drum, whereas

the larger particles occupy the space in the vicinity of the rotating walls [22, 151]. The size ratio is defined here as :

$$S_r = \frac{d_l}{d_s} \tag{6.1}$$

where d_l and d_s are the large and small particle diameters, respectively. When S_r is larger than 4, smaller particles still accumulate in the core of the bed, but some of them also percolate through the large ones in the passive layer and form a small band near the wall [21,25]. This is referred to as spontaneous percolation by Mosby et al. [19], who differentiate this mechanism from sieving ($S_r < 4$). However, most authors only use the general term *percolation* to define these two mechanisms.

Thus, granular segregation has a major impact on the particle distribution within the radial direction in the equipment, depending on the type and intensity of the segregation pattern. Experimentally, Nafsun et al. [122] showed that segregation in a heated rotating drum resulted in high temperature gradients inside the bed and a longer time required to obtain a uniform temperature, but they concluded that the effect of the size ratio was not clear. To the authors' knowledge, there is no other work that has continued or expanded the experimental findings of Nafsun et al. [122] and examined the effect of granular segregation on heat transfer in a rotating drum.

Currently, heat transfer in polydisperse granular materials is still not very well understood, despite its importance, even in packed beds. It has been experimentally shown by Oliver and Clarke [152] that a mixed bed of glass and copper particles dries faster than a bed of either element alone, without a clear explanation. These findings highlight the effect that polydispersity can have on the heat process and reveal that more research is needed to be able to adequately predict heat transfer in granular assemblies of different sizes.

There are only two numerical studies that have addressed this issue. Gan et al. [107] presented a methodology to numerically calculate heat transfer in ellipsoids differing in size, but none of their results concerned bidisperse systems. Chen et al. [123] extended a TDEM model for packed beds made of particles with different sizes. They used COMSOL Multiphysics® software to determine through simulations the geometrical limits that apply to the heat transfer between two particles differing in size. Their model allowed them to point out that the effective thermal conductivity of multi-sized packed beds was dependent on the solid fraction. However, their study was limited to a small size ratio of 2.8 and a small range of particle conductivity ratio from 0.23 to 5.8. These authors mentioned the lack of experimental

data in the literature to validate their model.

The limited number of numerical studies considering heat transfer in particles differing in size may be due to the fact that heat transfer models are multiple and complex, and involve different heat mechanisms and many parameters. Throughout the studies on heat transfer in monodisperse blends, some authors have shown that many physical, mechanical and thermal particle properties influence heat transfer, namely the diameter, the surface roughness (which is nonetheless not considered in most TDEM models) and the particle heat conductivity. Other authors have shown that a packed bed of large particles has a higher effective thermal conductivity than one with smaller particles [94, 107, 115, 153], which highlights the importance of studying heat transfer for a segregated particulate system. Zhou et al. [94] pointed out that the effective thermal conductivity k_e of a packed bed was dependent on the particle size and that further work was required to quantify its impact on heat transfer with different particle size distributions. In a previous work, Beaulieu et al. [153] developed a general TDEM model to consider heat transfer in monodisperse packed beds of various materials, ranging from very low to very high particle-to-fluid thermal conductivity ratios. This model takes into account the impact of particle roughness, a parameter that was often neglected in previous models, even though it has been demonstrated to be significant, especially with highly conductive materials [153]. Consequently, this TDEM model represents a good basis to extend to multi-sized blends.

Given the importance of the segregation mechanism in rotating drums as soon as particles differ in size and the absence of work combining this phenomenon with heat transfer, the aim of this work is to study the impact of granular segregation on conductive heat transfer for different segregated beds. To do so, we will first extend our existing TDEM model to bidisperse cases and implement it in the open-source software LIGGGHTS. The new model will be validated using our own experimental data and subsequently used to investigate the temperature evolution in various segregated granular beds. The remainder of the article is organized as follows. Section 6.2 presents the governing equations for both the dynamical and thermal features of the model for bidisperse particulate systems, the simulation conditions and the mixing index used. Section 6.3 presents a validation test for the heat transfer through a packed bed made of a blend of aluminum and glass beads differing in size. Section 6.4 discusses the numerical results showing the temperature profiles obtained in the different segregated beds and the relationship between the segregation intensity and the effective heat transfer coefficient at the wall. Lastly, Section 6.5 provides concluding remarks.

6.2 Methodology

To study the impact of granular segregation on heat transfer, we relied on the TDEM model that we previously developed [153] and implemented in the open-source software LIGGGHTS [89]. This model was developed and validated for packed beds of monodisperse particles. We will first modify this model to account for bidisperse blends. Then, we will use it to look at the temperature profile for various particulate blend configurations with different intensities of segregation. Instead of generating randomly segregated configurations, we will consider configurations that naturally occur while rotating in a cylindrical drum. In the next subsections, we recall briefly the dynamical and thermal governing equations introduced in [153] and show the modifications required for bidisperse particulate systems (Section 6.2.1). The parameters and conditions of the simulations used to study the impact of granular segregation on heat transfer in a rotating drum are detailed in Sections 6.2.2 and 6.2.3 and the mixing index used to quantify the segregation intensity is presented in Section 6.2.4.

6.2.1 Dynamical and thermal governing equations

In order to simulate the displacement of particles in the drum and obtain temperature profiles in the granular beds, we used, respectively, the DEM features of the open-source software LIGGGHTS [89] and a modified thermal discrete element method (TDEM) model that we developed in a previous work [153]. For the sake of completeness, the equations of the TDEM model previously developed are listed in Appendix C, along with the governing equations of DEM. The focus here is on the extension of our original TDEM model for bidisperse particulate systems.

In TDEM, the temperature of any particle i is calculated over time with the following global energy balance :

$$m_i C_i \frac{dT_i}{dt} = \sum_j Q_{ij} + \sum Q_{S,i} \tag{6.2}$$

where m_i, C_i and T_i are, respectively, the mass, the heat capacity and the temperature of particle i. The heat flux Q_{ij} represents the heat flux generated from the contact of particle i with j (where the particle j can be a mesh element of the geometry as well) such that :

$$Q_{ij} = H_{ij} \left(T_i - T_j \right) \tag{6.3}$$

where H_{ij} is the total heat conductance. The heat flux $Q_{S,i}$ represents any additional heating source that could affect the particle without requiring physical contact, e.g., radiative,

convective or microwave heating.

In the drum studied here, whose dimensions will be presented in Section 6.2.2, there are two main mechanisms that introduce heat inside the bed of particles : a convective heat flux from the hot gas on top of the particles and conduction from the hot wall in contact with the particles. We simulate a drum where the temperature of the gas on top of the bed of particles is maintained constant and equal to the wall temperature. This results in a Neumann boundary condition on the free surface of the packed bed where a convective flux Q_{CV} is applied to particles within a certain distance from the top of the free surface. We adjusted the depth of this convective zone in the bed in order to have the same total flux at the surface at the beginning of all simulations. The depth of this zone varied from 0.8 to 1.5 times the diameter of the largest particles due to the variation in particle composition at the surface of the bed. For a particle i located in this zone, the convective heat flux $Q_{cv,i}$ is given by :

$$Q_{CV,i} = hA_i(T_\infty - T_i) \tag{6.4}$$

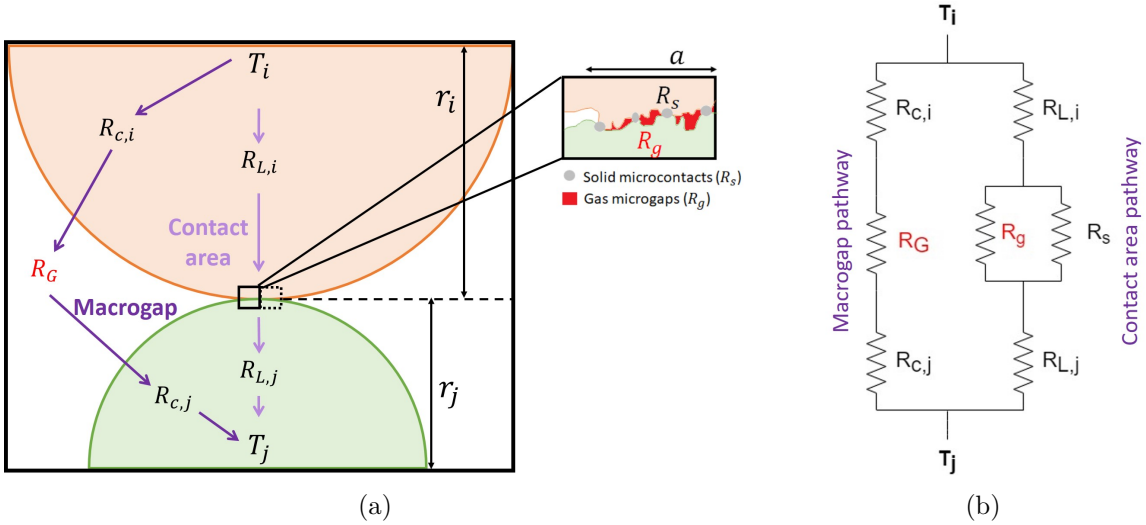
where h, A_i, T_∞ and T_i are, respectively, a convective heat transfer coefficient for a stagnant gas (taken equal to 10 $\mathrm{W.K^{-1}m^{-2}}$ throughout this study, considering that the heat transfer coefficient of air is normally between 2.25 and 25 $\mathrm{W.K^{-1}m^{-2}}$ [143]), the half surface of the particle i, i.e $\frac{4\pi r_i^2}{2}$, the gas temperature (considered constant and equal to the wall temperature) and the particle temperature. The convective heat flux calculated acts as a heating source term in Equation 6.2.

$$Q_{S,i} = Q_{CV,i} \tag{6.5}$$

The other main mechanism is heat transfer conduction from the hot walls. In this study, we are interested in the impact of granular segregation on the conductive aspects of heat transfer only. Thus, we do not consider radiation or free convection mechanisms inside the segregated beds. However, these assumptions will be verified for the validation test (Section 6.3). Therefore, in this study, heat transfers from the wall to the granular bed and through the granular bed by conduction only. Nonetheless, conduction between touching particles and between a particle touching the wall is not obvious to model. In other words, it is not easy to define the coefficient H_{ij} in Equation 6.3.

Our TDEM model developed in [153] and listed in Appendix C relies on a thermal resistance network, analogous to an electrical resistor network (see Figure 6.1), to calculate the global heat conductance H_{ij}. Globally, there are two main parallel pathways : the macrogap

pathway and the contact area pathway (Figure 6.1). Conduction through the gas entrapped between particles is considered in the macrogap pathway, while the particle surface texture, characterized by roughness among others, is taken into account in the contact area pathway. The definitions of the various resistances along the two pathways are given in Table 6.1 and the parameters used in these definitions can be found in Appendix C.



(a) (b)

Figure 6.1 Schematic of the heat transfer process at the contact point between two particles of different sizes (a) and equivalent thermal resistance network (b), where $R_{c,i}$ and $R_{L,i}$ are, respectively, the solid conduction resistance and the constriction/spreading resistance of the particle i, and R_G, R_g and R_s are, respectively, the gas macrogap, the gas microcontact and the solid microcontact resistances. Thermal resistances in the gas phase are in red. All thermal resistances are expressed in K/W. (Adapted from [153])

The specific equation that requires modification to extend the model to take into account bidisperse particulate blends is the formulation of the interstitial gas conduction resistance R_G, especially in the definitions of the gas geometrical parameters N and A which are defined as :

$$N = 2\left(r_{hm} - \zeta\right) + M \tag{6.6}$$

$$A = 2\sqrt{r_{hm}^2 - a^2} \tag{6.7}$$

with

$$\zeta = \frac{a^2}{2r_{hm}} \tag{6.8}$$

Tableau 6.1 Expressions used for the thermal resistances in our proposed model.

Resistance (K/W)	**Symbol**	**Definition**	**Reference**
Solid conduction resistance	$R_{c,i}$	$\frac{L_s}{k_{p,i}A_s}$	[153]
Constriction/spreading resistance	$R_{L,i}$	$\frac{1}{4kp_ia}$	[118]
Solid microcontact resistance	R_s	$\frac{0.581\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\left(\frac{W^*}{\delta_{n,th}Y_0^*}\right)^{0.96}}{k_s a^{1.04}}$	[92]
Gas microcontacts resistance	R_g	$\frac{2\sqrt{2}\sigma a_2}{\pi k_f a^2 ln\left(1+\frac{a_2}{a_1+\frac{M}{2\sqrt{2}\sigma}}\right)}$	[118]
Interstitial gas conduction resistance	R_G	$\frac{2}{\pi k_f\left[Nln\left(\frac{N-B}{N-A}\right)+B-A\right]}$	[118]

The resistances $R_{c,i}$ and $R_{L,i}$ are calculated for each particle individually, so they can each use the appropriate radius, even if the two particles in contact differ in size. The resistances R_s and R_g, which account for the particle surface texture, namely the particle surface roughness σ and surface slope τ, do not directly depend on the radius of the particle but on the surface properties and the contact radius a. Finally, the interstitial gas conduction resistance R_G, representing the conduction in the gas in the macrogaps between the particles, is defined for the pair of contacting particles and must take into account both diameters. Several possibilities exist to calculate an equivalent radius in the case of a bidisperse contact, namely the mean radius r_m, the harmonic mean radius r_{hm}, the reduced radius r^* or the minimal radius r_{min}, the definitions of which are given in Table 6.2 and where $r^* < r_{min} < r_{hm} < r_m$. The equivalent radius value at the wall given in Table 6.2 represents the limit when $r_j \to \infty$. We selected the harmonic mean radius to calculate N, ζ and A (and thus R_G) and we discuss the validity of this choice in the validation section (Section 6.3).

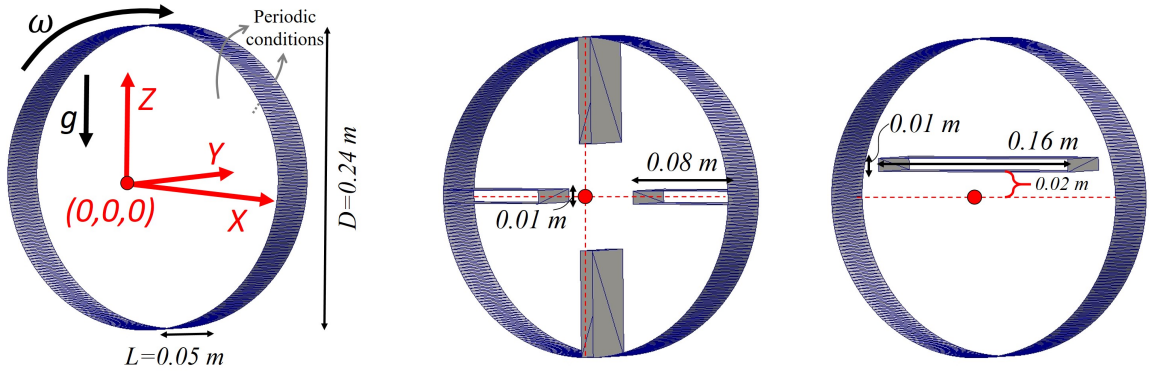
Tableau 6.2 Different equivalent radius definitions to calculate R_G in a bidisperse blend.

Equivalent radius	**Symbol**	**Definition**	**At the wall**†
Mean radius	r_m	$\frac{r_i+r_j}{2}$	∞
Harmonic mean radius	r_{hm}	$\frac{2r_ir_j}{r_i+r_j}$	$2r_i$
Reduced radius	r^*	$\frac{r_ir_j}{r_i+r_j}$	r_i
Minimal radius	r_{min}	$\min(r_i, r_j)$	r_i

†calculated with $r_j \to \infty$

6.2.2 Simulation characteristics

In order to generate natural segregation patterns that could be obtained in reality and study the impact of such segregation on heat transfer, we use a cylindrical tumbler rotating around the Y-axis. The drum inside diameter D is 0.24 m (R=0.12 m) and the length of the drum L is 0.05 m (Figure 6.2(a)). Periodic conditions are imposed on the Y-axis to simulate a very long drum and avoid end-walls effects that can lead to axial segregation. The goal of this paper is to focus on radial segregation and how it affects heat transport in the core of the drum. To study heat transfer for different segregation patterns and intensities, we made use of three different drum geometries : a drum without baffles (Figure 6.2(a)), a drum with four baffles fixed on the rotating wall (Figure 6.2(b)) and a drum with an axially located baffle (Figure 6.2(c)) that we call the "middle baffle" case. All baffles have the same length in the Y-direction as the drum width (5 cm), are 1-cm thick, and rotate with the drum wall. The four baffles in Figure 6.2(b) are centered either on the X=0 or Z=0 axis. They are 8 cm long, which is one third of the drum diameter. The middle baffle is situated 2 cm higher than the horizontal line Z=0 cm and is 16 cm long, which represents two thirds of the drum diameter. The configurations and locations of these baffles are inspired from Vargas et al. [23] who found that such baffles were efficient at suppressing size segregation in a rotating drum.



(a) (b) (c)

Figure 6.2 Dimensions of the three drums used for the simulations : a regular drum (a), a drum with four baffles fixed to the rotating wall (b) and a drum with an axially located baffle (c). All baffles have the same depth as the drum length, i.e. 5 cm.

To evaluate the impact of size ratio and its resulting segregation pattern on heat transfer, we studied two different blends with a size ratio of 2 and 5, respectively. These ratios were chosen to generate different segregation patterns through sieving (or percolation) ($Sr < 4$) and spontaneous percolation ($Sr > 4$), as discussed in the introduction. The blend with a size ratio of 5 is only studied in the drum without baffles (Figure 6.2(a)), whereas the blend

with a size ratio of 2 is studied in the drum without baffles, with the four baffles and with the middle baffle (Figure 6.2). For the two blends studied, small aluminum beads (1100 alloy) and large glass beads were selected, the properties of which are summarized in Table 6.3. These two materials were chosen because of their thermal behaviour, which is very different, like it would be in the case of a rotary kiln in which a chemical reaction generates particles of different sizes and different thermal properties. As can been in Table 6.3, the thermal diffusivity of the 1100 aluminum alloy (9.0×10^{-5}m^2/s) is more than 100 times higher than that of the glass beads (4.7×10^{-7}m^2/s). As an example, during the production of biofuel by pyrolysis of scrap tires, the thermal diffusivities-ratio of black carbon (2.1×10^{-5}m^2/s) to rubber (1.0×10^{-7}m^2/s) is in the order of 210. The nature of the two materials was kept constant throughout all simulations because the goal of this paper is to examine the impact of different segregation patterns and intensities and not the impact of different materials, which has already been studied elsewhere [80, 83]. The particle roughness, surface slope, density and diameter were measured experimentally in our previous work [153], whereas the other property values were taken from the manufacturer data sheets or the literature. The characteristics of the two blends are presented in Table 6.4. Each has a volume fraction of 20% of small particles.

Tableau 6.3 Mechanical and thermal properties of the simulated particles and walls.

Property	**Symbol**	**Alloy 1100**	**Glass**	**Wall**
Particle radius	r (mm)	1.5	3 or 7.5	-
Particle density	ρ (kg/m^3)	2667	2521	-
Young's modulus	Y (MPa)	5	5	5
Original Young's modulus	Y_0 (GPa)	69	65	100
Poisson's ratio	ν (-)	0.33	0.22	0.33
Microhardness	W (GPa)	1.8	9	1.8
Coefficient of restitution p_i/p_i ‡	e (-)	0.8	0.69	-
Coefficient of restitution p_i/p_j ‡	e (-)	0.75	0.75	-
Coefficient of restitution p/w ‡	e (-)	0.8	0.75	-
Coefficient of sliding friction p_i/p_i or p_i/p_j or p/w ‡	μ (-)	1.0	1.0	1.0
Coefficient of rolling friction p_i/p_i or p_i/p_j or p/w ‡	μ_r (-)	0.02	0.02	0.02
Thermal conductivity	k_p (W/m.K)	221	1	250
Thermal capacity	C (J/kg.K)	896	840	900
Thermal diffusivity	α (m^2/s)	9.2×10^{-5}	4.7×10^{-7}	250
Particle RMS roughness†	σ (nm)	154	62	0.1
Particle surface slope†	τ (-)	0.220	0.080	0.220

‡p/p stands for particle-particle and p/w stands for particle-wall interactions;

† As measured using Atomic Force Microscopy (AFM)

Tableau 6.4 Characteristics of the two blends of particles used in the simulations.

		Blend 1	**Blend 2**
Size ratio	S_r (-)	2	5
Small particle material	-	Alloy 1100	
Large particle material	-	Glass	
Small diameter	d_s (mm)	3	
Large diameter	d_l (mm)	6	15
Number of small particles	n_s (-)	10,312	9,886
Number of large particles	n_l (-)	4,925	330
Volume fraction of small particles	$x_{v,s}$ (-)	0.21	0.19
Volume fraction of large particles	$x_{v,s}$ (-)	0.79	0.80

6.2.3 Four-step numerical approach

For all DEM simulations of this study, we selected our time step as a fraction ξ of the Rayleigh's time (t_R) calculated as follows :

$$t_R = \frac{\pi r}{\beta}\sqrt{\frac{\rho}{G}} \tag{6.9}$$

$$\tag{6.10}$$

with

$$\beta = 0.8766 + 0.163\nu \tag{6.11}$$

$$G = \frac{Y}{2\,(1+\nu)} \tag{6.12}$$

$$\Delta t = \xi t_R \tag{6.13}$$

where r is the radius of the particle, ν the Poisson's ratio, Y the Young's Modulus and G the shear modulus. It is commonly acknowledged in the literature that a time step below 0.2 of the Rayleigh's time leads to stable simulations [52, 73, 74]. In this study, we used $\xi = 0.15$. For our bidisperse blends, we calculated a time step Δt for each type of particle individually and selected the most restrictive. This led to a time step of 2.5 $\times 10^{-5}$ s for all dynamical simulations.

For simulations involving heat transfer, another time step must be calculated as the thermal process is much slower than the collision time. A criterion was proposed by Zhang et al. [90] such that :

$$\frac{\Delta t}{\rho C V \overline{R_{ij}}} \ll 1 \tag{6.14}$$

where V is the particle volume and $\overline{R_{ij}}$ is an average global contact resistance calculated

from Equation C.9 and averaged on all contacts. For our simulations, we chose the following conservative criterion :

$$\frac{\Delta t}{\rho C V \overline{R_{ij}}} \approx 0.01 \tag{6.15}$$

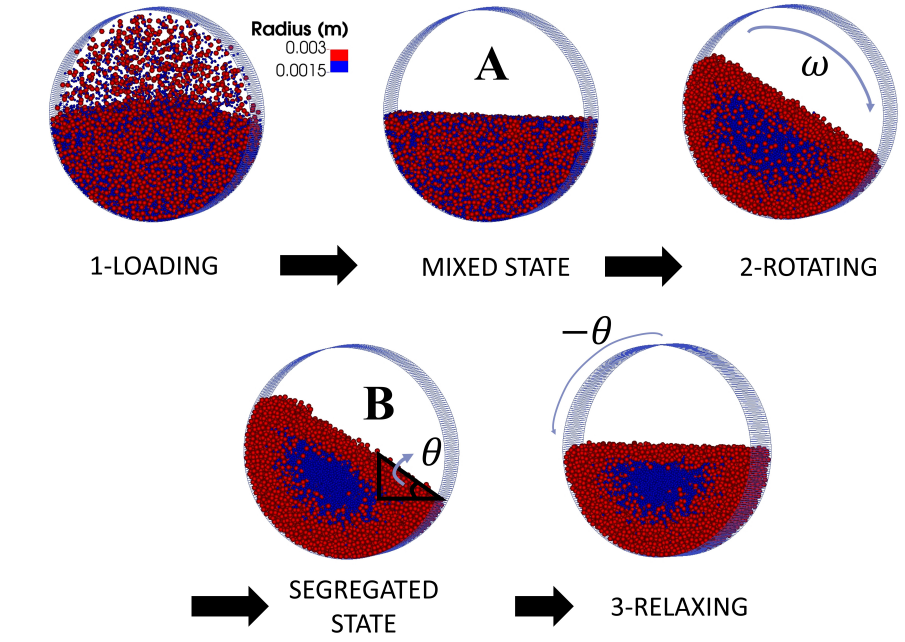
leading to a time step of 1 s for all the heat transfer simulations.

As can been seen from the calculated time steps for the dynamical and thermal processes that significantly differ in magnitude and given that the segregation patterns normally appear very quickly within the first two rotations [28], while the heating process in granular materials is very slow [153], the characteristic time of segregation is much smaller than the characteristic time of heating. Therefore, we decided to decouple the two phenomena, leading to a 4-steps approach illustrated in Figure 6.3. Decoupling the dynamical and thermal processes makes it possible to increase the time step used for the TDEM. These four steps are :

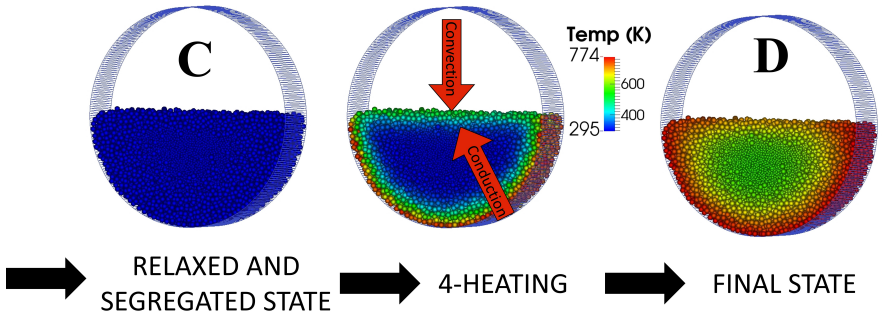
1. Loading of the drum and generation of a well-mixed packed bed ;
2. Rotation of the drum for a given time and generation of a packed bed whose segregation intensity varies depending on the time chosen ;
3. Relaxation of the particles to obtain a static packed bed fully settled at the bottom of the drum ;
4. Heating of the packed bed by applying a constant temperature at the walls and a convective heat flux at the free surface.

At the end of the loading step (1), a well-mixed packed bed of bidisperse particles is obtained (state A in Figure 6.3). Particles are randomly inserted into the drum (with or without baffles) and settled down due to gravity. The system has time to relax and stabilize before starting the rotation. We determine this stable state when the total kinetic energy of the system is under 1×10^{-5} J. The filling degree is kept constant for all configurations and is equal to 50%. For the second step (2), at time $t = 0$ s, a constant angular velocity of 15 RPM is applied to the drum walls and the bed of particles is rotated for a given number of rotations, at the end of which a segregated configuration is obtained (state B in Figure 6.3). Most of the configurations were rotated for 10 full rotations. However, in order to obtain intermediate states of segregation for the size ratio of 2, the regular drum rotation (step 2) was also rotated for less than 10 full rotations (i.e., 0.56, 0.94, 1.31, 1.88, 2.44 and 3.19 rotations). For the third step (3), the dynamic angle of repose is calculated from the final segregation-state (state B in Figure 6.3), before an anticlockwise rotation of the whole system of this angle is applied to obtain a drum configuration where the free surface is nearly flat and parallel to the X-axis (state C in Figure 6.3). Finally, in the fourth step (4), the time is reset to $t = 0$ s and a constant temperature of 500°C is applied to the walls (T_w) at the same time as a convective heat flux (Equation 6.4) is added to the surface of the particles.

This heating process is maintained for two hours. The final state represents a granular bed in which a specific temperature profile has evolved (state D Figure 6.3). For the cases with baffles, when the rotating step is finished, and once the system has been brought parallel to the X-axis, the baffles are removed to obtain a bed comparable to the ones obtained without baffles.



(a)



(b)

Figure 6.3 Our numerical approach is divided into four steps, thus decoupling the dynamical (a) and the thermal (b) processes. The four steps are illustrated here for the size ratio of 2.

In summary, we used the DEM features of the open-source code LIGGGHTS to create packings of bidisperse blends of spherical particles in a cylindrical tumbler. For these packings, we studied two different particle size ratios of 2 and 5. Once the random packings were

relaxed, we applied an angular velocity to the drum (with and without baffles) to obtain segregation patterns. Afterwards, we used our own TDEM model to study heat transfer in these segregated beds and investigate the impact of these segregation patterns on the temperature profiles over time for the different bed configurations. Note that we also heated up the well-mixed configurations (stage A in Figure 6.3) to compare our results with a heating process in a well-mixed bed, for both size ratios.

6.2.4 Segregation index and temperature profile calculations

Many indexes have been proposed in the literature to quantify the segregation state of a granular material in different equipment [10, 30, 33, 59, 73, 150, 154, 155]. In the present study, we used a modified version of the relative standard deviation based on the work of Lemieux et al. [155] and employed in our previous work [151]. We define the segregation index I_{seg} as the relative standard deviation of the mass concentration of Type 1 particles in the drum. To calculate this index, the drum was divided into a Cartesian grid of 7×1 × 7 cells (3.4 cm × 5.0 cm × 3.4 cm) as illustrated in Figure 6.4(a) and the mass concentration of Type 1 particles is measured in every cell (x_i in Equation 6.17). The segregation index is calculated as :

$$I_{seg} = \frac{\sigma}{\bar{x}} \tag{6.16}$$

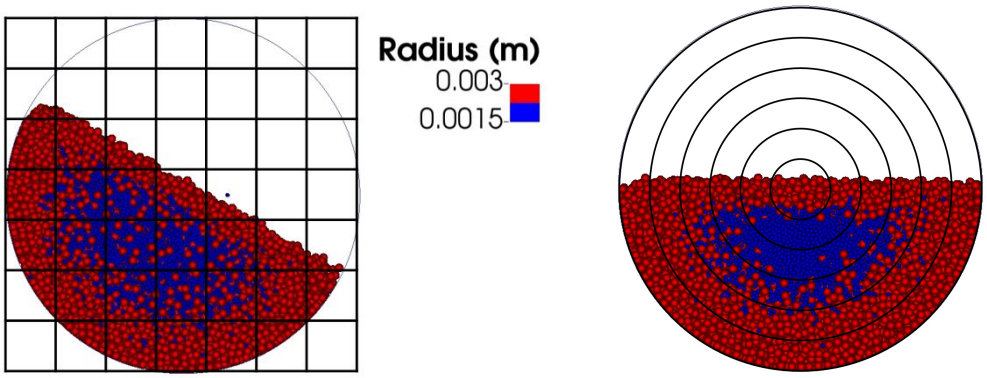
where the standard deviation, σ, is defined as :

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{M} \lambda_i \left(\bar{x} - x_i\right)^2}{M-1}} \tag{6.17}$$

amd where M, $\bar{x}$, x_i and λ_i are, respectively, the total number of samples, the total mass concentration of Type 1 particle in the drum, the mass concentration of this type of particle in sample i and a sample weighting coefficient. As can be seen in Figure 6.4(a), some cells are not fully contained in the drum and their weight should be less in the calculation of the segregation index. The corresponding weighting coefficient λ_i in Equation 6.17 is defined as :

$$\lambda_i = \frac{V_{p,cell}}{V_{cell}} \tag{6.18}$$

where $V_{p,cell}$ and V_{cell} denote the volume occupied by particles in the cell and the actual volume of the specified cell, respectively. I_{seg} is equal to 0 for a perfectly mixed system, in which case the concentration of each sample is equal to the average concentration.



(a) (b)

Figure 6.4 A cartesian grid of 3.4 cm × 5.0 cm × 3.4 cm was used to calculate the segregation index I_{seg} (a) and a radially divided grid of six concentric rings of 2.0 cm width was used to calculate the volume fraction of each type radially.

The choice of the grid dimensions has an impact on the value of I_{seg}. We used the same grid for all our simulations to be able to compare the results. Too coarse a grid can hide important segregated zones, whereas too fine a grid leads to an asymptotic value for a given size ratio in all cases of segregation because there is then more or less one particle in every cell. We tested different grid dimensions ranging from $2 \times 1 \times 2$ to $20 \times 1 \times 20$, and chose a $7 \times 1 \times 7$ (3.4 cm × 5.0 cm × 3.4 cm) grid because it best represented the scale of segregation in the drum. There is no discretization along the Y-axis (axis of rotation) since periodic boundaries are applied in this direction and no axial segregation occurs.

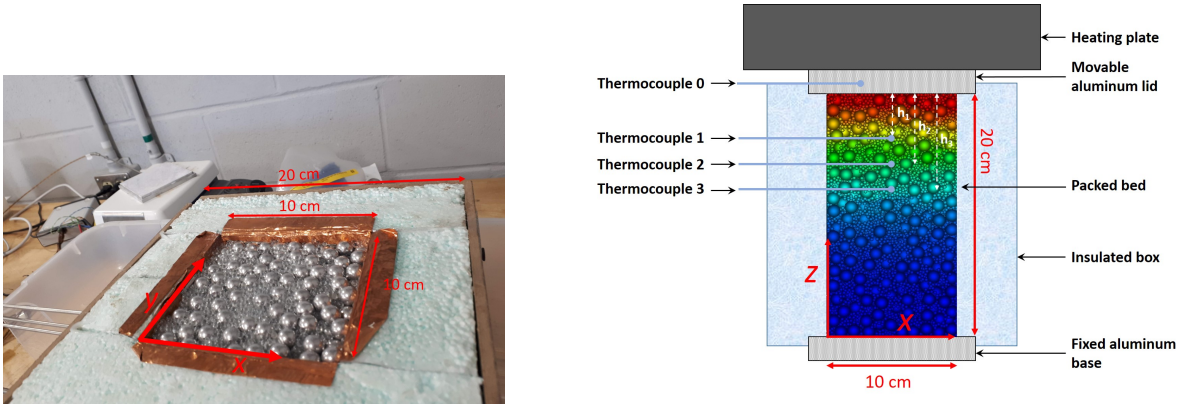
To gain more insight into the radial distribution of each type of particle in the drum, a discretization in concentric disks was also used. Six concentric disks of a 2.0-cm width were selected as illustrated in Figure 6.4(b). This discretization was also used to study the temperature profile in the radial direction. An average energy-weighted temperature was calculated in each disk to take into account the thermal capacity of every particle :

$$T_{ave} = \frac{\sum \rho_i C_i V_i T_i}{\sum \rho_i C_i V_i} \tag{6.19}$$

where ρ_i, C_i, V_i and T_i are, respectively, the density, heat capacity, volume and temperature of particle i. The same average temperature was used to characterize the global evolution of the temperature in the system.

6.3 Model validation with a bidisperse packed bed

The TDEM model accounting for particle roughness was previously validated for four different monodisperse packed beds in a previous work [153]. To extend this model to simulate heat transfer in bidisperse blends, we measured the temperature profile in a packed bed composed of glass and aluminum (alloy 7A03) beads of 3.0 mm and 10.4 mm, respectively, over time at three different heights in a very similar way as in [153]. We then compared the experimental results with the ones predicted numerically with our TDEM model. The set-up used for the validation test is shown in Figure 6.5 and the particle and fluid properties are summarized in Tables 6.5 and 6.6.



(a) (b)

Figure 6.5 Real image of the top view (a) and schematic side view (b) of the set-up consisting of an isolated 10 cm × 10 cm × 20 cm box with thermocouples installed at different heights, and filled with bidisperse beads of glass (small) and aluminum (large).

The box consisted of styrofoam walls solidified with a wooden frame on the outside, in which we drilled holes to insert the thermocouples (Figure 6.5). The dimensions of the box (10 cm × 10 cm × 20 cm) were chosen large enough to not impact the heat transfer process inside it, i.e., at least 8 times the particle diameter, as suggested in the literature [94, 104, 134]. The particles lay on a fixed aluminum plate at the bottom. At time $t = 0$ s, a hot aluminum plate whose temperature was monitored by a 1/8-inch diameter thermocouple probe (type K from Omega^{TM}) was applied on top of the granular bed and maintained at a more or less constant temperature T_{top} for 7,000 seconds. The actual temperature evolution over time of this hot plate was used as a time-dependent boundary condition in the simulations and the temperature evolution was monitored using three similar thermocouples positioned at different heights in the packed bed (Figure 6.5(b)). All four thermocouple tips were located at the center of the box to avoid wall effects. We decided to heat up the packed bed from the

Tableau 6.5 Mechanical and thermal properties of the materials used for the validation.

Property	**Symbol**	**Glass**	**Alloy 7A03**	**Wall**
Particle radius	r (mm)	1.5	5.2	-
Particle density	ρ (kg/m^3)	2521	2841	-
Young's modulus	Y (MPa)	5	5	5
Original Young's modulus	Y_0 (GPa)	65	72	100
Poisson's ratio	ν (-)	0.22	0.33	0.33
Microhardness	W (GPa)	9	1.8	1.8
Coefficient of restitution p/p ‡	e (-)	0.8	0.8	-
Coefficient of restitution p/w ‡	e (-)	0.8	0.8	0.8
Coefficient of sliding friction p/p ‡	μ (-)	1.0	1.0	-
Coefficient of sliding friction p/w ‡	μ (-)	1.0	1.0	1.0
Coefficient of rolling friction p/p ‡	μ_r (-)	0.02	0.02	-
Coefficient of rolling friction p/w ‡	μ_r (-)	0.02	0.02	0.02
Thermal conductivity	k_p (W/m.K)	1	125	250
Thermal capacity	C (J/kg.K)	840	856	900
Thermal diffusivity	α (m^2/s)	4.7×10^{-7}	5.1×10^{-5}	-
Particle RMS roughness†	σ (nm)	99	281	0.1
Particle surface slope†	τ (-)	0.085	0.117	0.117

‡p/p stands for particle-particle and p/w stands for particle-wall interactions ;
† As measured using Atomic Force Microscopy (AFM)

Tableau 6.6 Fluid properties (air at 50°C and 1 atm).

Property	**Symbol**	**Value**
Conductivity	k_f (W/m.K)	0.027
Capacity	C_f (J/kg.K)	1006
Dynamic viscosity	μ_f (Pa.s)	20×10^{-6}

top to be sure to avoid any natural convection. The bottom and top walls were considered as smooth aluminum plates. More precisely, in the simulations, we used the properties of pure aluminum for the walls (Table 6.5) and set a roughness value of 0.1 nm (almost 0). The gas properties were assumed to be those of air at 50°C and 1 atm (Table 6.6).

Similar to [153] and based on the magnitude of the Grashof number (259), calculated with the properties of the larger bead (i.e., the 10.4-mm aluminum alloy particle), which was under the limit specified by Arpaci et al. [100], we neglected the free convection inside the packed bed. The radiation-to-conduction ratio proposed by [93] gave a value of ~ 0.02, still using the properties of the larger bead. Therefore, we considered that neither free convection nor radiation would affect the experimental results and that our model accounting solely for conductive heat transfer would be adequate.

During the experiments, it was observed that a small gap of air was present between the top layer of particles and the hot plate. Indeed, for a bidisperse blend, it was hard to get a perfect flat surface at the top while respecting the volume fraction of each type of particle. To reproduce this non-intimate contact in the simulations, we fixed the total thermal resistance to all particles in contact with the top wall in the simulation to be :

$$R_{air} = \frac{G}{\pi r^2 k_f} \tag{6.20}$$

where G is the thickness of the small gap between the hot plate and the particles. We estimated this gap to be equal to 0.6 mm, which represents 20% of the small particle diameter.

Most studies with TDEM have focused on monodisperse systems and no definition of equivalent radius (Table 6.2) to use in the case of bidisperse contacts could be found. We ran simulations with four different definitions introduced in Table 6.2 and calculated the average relative error between the model predictions and the experimental data, for the three thermocouples. For the glass ($r = 1.5$ mm) and aluminum ($r = 5.2$ mm) beads (Table 6.5), the values of the harmonic mean radius, the minimal radius, the reduced radius and the mean radius are, respectively, 2.3, 1.5, 1,2 and 3.4 mm, for a contact between two different types of particle. For the test with the average radius, we estimated the equivalent radius at the wall to be r_i instead of ∞. As can be seen in Table 6.7 showing the results of the average relative error between the experimental data and the numerical results, the use of the harmonic mean radius resulted in the best option. The comparison between the experimental data and the predictions from the TDEM model using the harmonic mean radius is illustrated in Figure 6.6.

Table 6.7 also shows that all definitions, except the reduced radius, give a relative error

Tableau 6.7 Average relative error (%) of the four radius definitions.

	r_{hm}	r_{min}	r^*	r_m
T1	1.7	1.1	1.9	2.1
T2	0.6	1.8	5.8	1.5
T3	2.0	3.8	7.6	0.8
Sum	4.3	6.7	15.3	4.4

under 7%. We think that the impact of the definition would be larger with a validation test that considers particles with a larger size ratio or that involves larger temperature gradients. Moreover, the reduced radius does not represent a good candidate in the first place because it did not recover the expected radius (only half of it) as r_i approaches r_j as one would expect. For the reduced and minimum radii, the average relative error increases as we go deeper into the bed ($e(T3) > e(T2) > e(T1)$). This indicates that the calculation of the contact resistance is erroneous, which leads to an increase of the discrepancy with the experimental values as the number of layers of particles in contact increases. The results with the mean radius were comparable with the harmonic mean value. The results were slightly better with r_{hm} and given that r_m tends toward infinity at the wall (with $r_j \to \infty$), r_{hm} was deemed a better choice.

Figure 6.6 shows excellent agreement between the experimental temperatures (solid lines) and the predictions of the TDEM model (symbols) using the harmonic mean value of the two radii in contact. For this experiment, the volume fraction of small glass beads was 25% in order to get close to the densest packing for a bidisperse system [156] and promote bidisperse contacts, resulting in a simulation with 25,271 small glass beads and 1,680 large aluminum beads. The experimental and numerical porosities of the packed bed were estimated to be 33±3%. In Figure 6.6, the error bars (±2.0°C) represent the total error on the experimental temperatures, combining the thermocouple accuracy (±1.5°C) and the error related to the exact positioning of the thermocouple, which we estimated to be ±1 mm, resulting in an error of ±0.5°C.

In summary, we found in this validation that the best definition of the equivalent radius for our TDEM model and bidisperse contacts was the harmonic mean radius. Using this definition and with the results of validation test shown in Figure 6.6, our model has proven accurate in predicting the heat transfer process in bidisperse blends within the range of size ratios investigated.

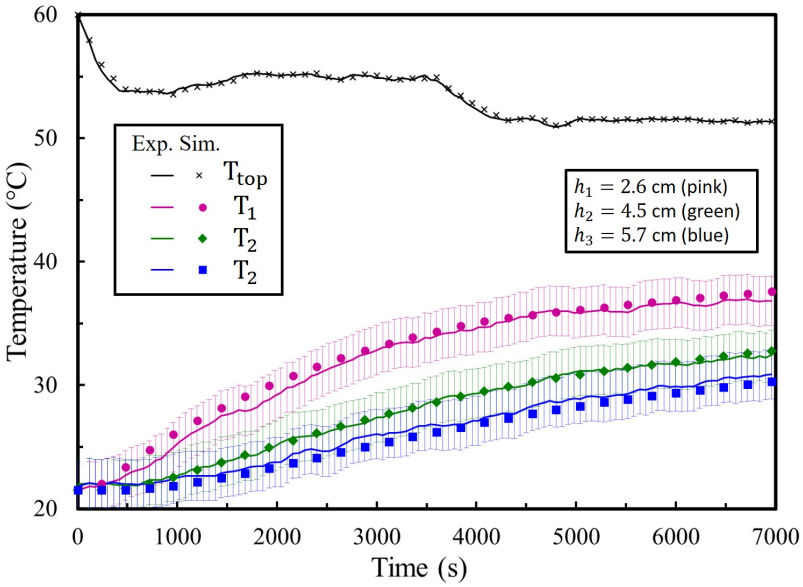


Figure 6.6 Temperature at different heights in a packed bed made of a bidisperse blend of glass (3 mm) and aluminum (10.4 mm) beads. Solid lines are from experiments and symbols are the predictions obtained with our TDEM model using the harmonic mean radius. Error bars on experimental data represent the total estimated errors due to the exact positioning of the thermocouple and the accuracy of the thermocouple probe. The black line is the recorded temperature evolution (averaged over 60 s) of the aluminum lid and the black crosses are the actual boundary condition used over time for the upper wall in our TDEM model.

6.4 Results and discussion

In this section, we present our numerical analysis of the impact of segregation on heat transfer in a cylindrical tumbler. We use the geometry shown in Section 6.2.2 and apply the four steps summarized in Figure 6.3. In total, six different segregation patterns (Figure 6.7) and their resulting segregation intensities, obtained using different drum configurations are discussed. To compare the heating of a segregated bed to that of a well-mixed bed, we compare the different segregation patterns and resulting intensities (Figures 6.7(b), 6.7(c), 6.7(d) and 6.7(f)) to the heating of the corresponding well-mixed beds (Figures 6.7(a) and 6.7(e)) obtained right after the loading process (Step 1 in Figure 6.3). In the next sections, we determine the intensity of segregation in the six proposed beds (Section 6.4.1), evaluate the temperature profiles within them (Section 6.4.2), highlight the temperature difference between the small and large particles (Section 6.4.3) and finally look more specifically at the evolution of the effective heat transfer coefficient at the drum wall as a function of the intensity of segregation (Sections 6.4.4).

6.4.1 Segregation evolution over time

As the drum is rotating, particles reorganize. All rotating simulations (Step 2) started with a well-mixed state that was obtained with the two types particles randomly inserted into the drum and settled due to gravity. According to the mechanism of percolation, smaller particles (here aluminum beads) tend to accumulate in the middle of the bed for the size ratio of 2 [21]. For a larger size ratio, the smaller particles can percolate even through the passive layer and reach the rotating wall as observed by Yari et al. [25]. Segregation can also be generated by a density ratio, though it is less efficient than size segregation, as noted by Arntz et al. [20] or Jain et al. [21]. In our case, the material densities are relatively similar (2667 $\mathrm{kg.m^{-3}}$ for aluminum alloy 1100 and 2521 $\mathrm{kg.m^{-3}}$ for glass) and the density segregation acts in the same direction as the size segregation, bringing the heavier particles, also the smaller ones here, towards the middle of the bed [20, 157]. There is thus no issue concerning the competition between the percolation and buoyancy mechanisms.

After 10 rotations, as can be observed in Figure 6.7, different segregation patterns and intensities were obtained. First, we can see that the most segregated state was obtained with the size ratio of 2 without baffles (Figure 6.7(b)). This is confirmed by the evolution of the segregation index over time presented in Figure 6.8.

Figure 6.8 shows that the addition of the two types of baffles reduces significantly the segregation mechanisms in the drum, which is why we selected them to generate packings with

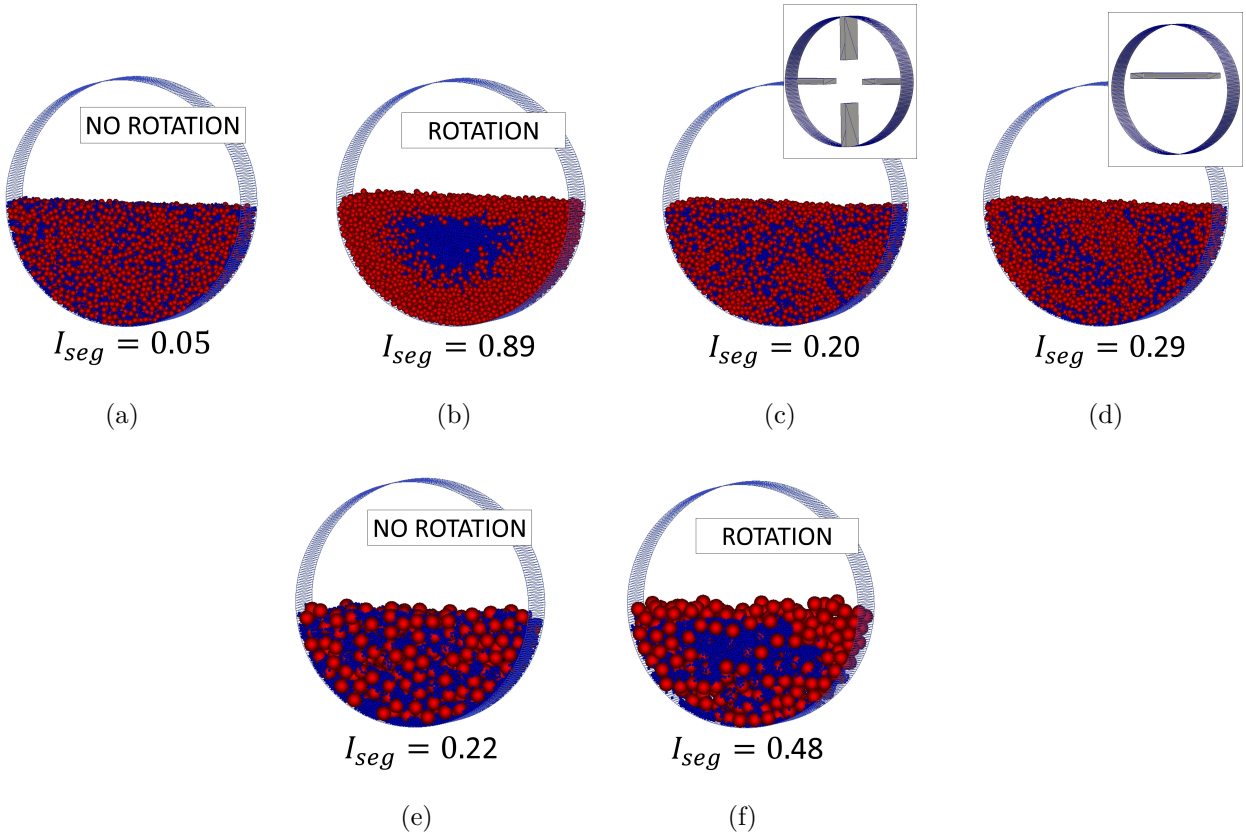


Figure 6.7 Visualization of the segregation patterns obtained in the drum for a blend of 3-mm (blue) and 6-mm (red) particles (a-d) and another blend of 3-mm (blue) and 15-mm (blue) particles (e-f). Configurations (a) and (e) represent well-mixed states obtained right after the loading step. Configurations (b) and (f) represent segregated states after 10 full rotations at 15 RPM without baffles. Configurations (c) and (d) represent the states obtained after 10 full rotations at 15 RPM with four baffles (c) and a middle baffle (d). Baffles were removed when studying the heating process as their role was only to generate different segregation patterns.

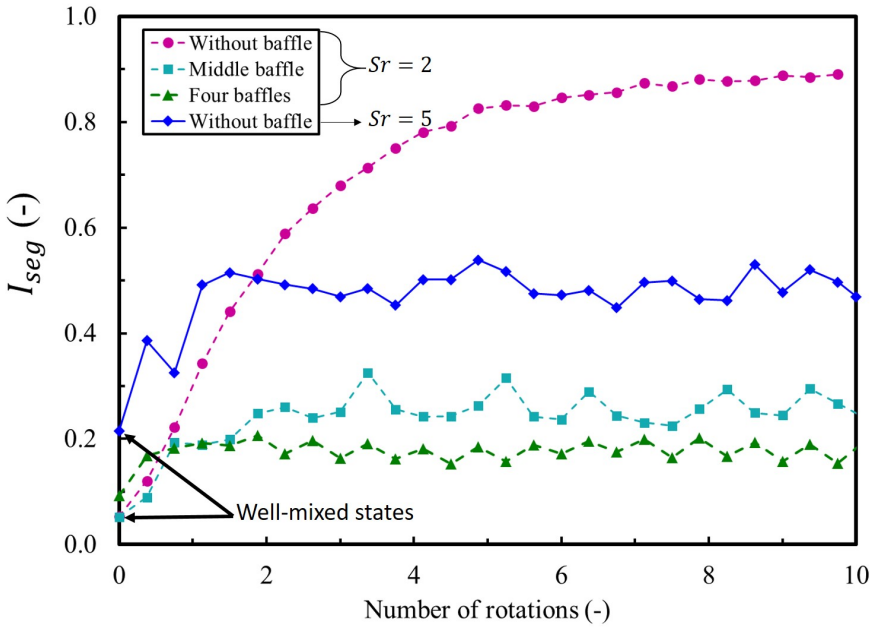
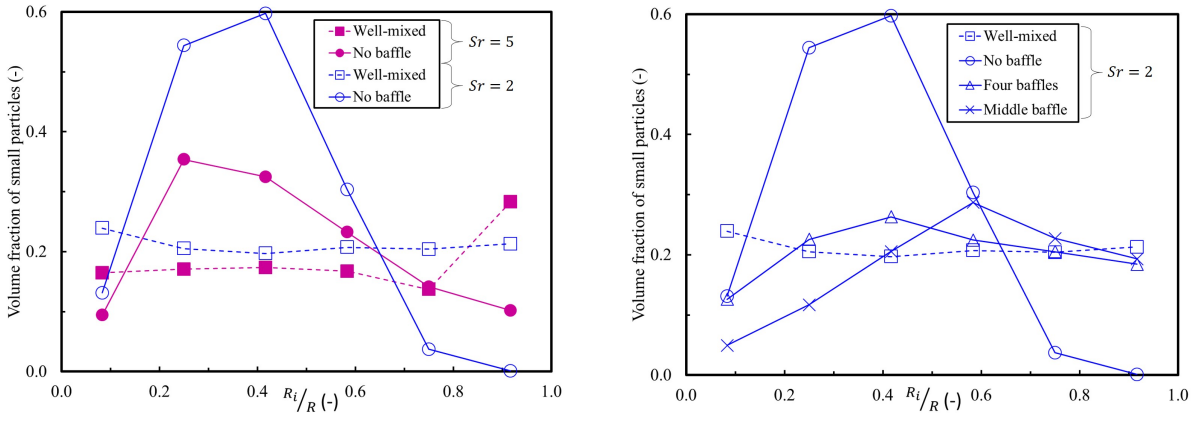


Figure 6.8 The segregation index (I_{seg}) of all drum configurations studied increases with time as particles get reorganized in the drum. A size ratio S_r of 2 without baffle promotes segregation whereas the addition of baffles lowers significantly the segregation index. A size ratio of 5 without baffle allows spontaneous percolation and leads to a realtively smaller index than for a size ratio of 2. The starting points of the curves purple (circles) and blue (diamonds) at $t = 0s$ represent the segregation index of the well-mixed states for the two size ratios.

lower segregation intensities. It is also interesting to look at the difference between the purple (circles) and blue (diamonds) curves that represents the effect of size ratio in a drum without baffles (Figures 6.7(b) and 6.7(f)). As expected, while the size ratio of 2 creates a classical core segregation pattern with a clear frontier between the two sizes of particles, the segregation is less pronounced for the size ratio of 5. The core of smaller particles is still obtained in this case, but it is less clear, thus explaining the lower I_{seg} value after 10 rotations.

The segregation patterns and index values reported in Figures 6.7 and 6.8 are further analyzed in Figure 6.9 that depicts the radial volume distribution of each type of particle in concentric rings around the middle of the drum, as illustrated in Figure 6.4(b).



(a) (b)

Figure 6.9 Impact of size ratio (without baffles) (a) and baffle configuration (b) on the volume fraction of small particles (values for large particles are the mirror of the values presented here) in concentric disks versus the radial position in the drum.

In Figure 6.9(a), we see the results for the configurations of the two blends without baffles. We can see that for the size ratio of 2 (3-mm and 6-mm particles), the last ring close to the wall ($0.8 < R_i/R < 1.0$) only contains large particles, confirming that the small particles have percolated to the middle of the bed. It is worth reminding here that the total volume fraction of the small particles that were inserted in the drum for both blends was 20% (Table 6.4). The blend with a size ratio of 5 shown in Figure 6.9(a) (3-mm and 15-mm particles) also exhibits a core segregation pattern, but the segregation is less pronounced than with the size ratio of 2. A larger fraction of the small particles have in fact percolated through the larger ones in the passive layer and are thus present in all the radial disks. Also, for the size ratio of 5, even the mixed state presents a significant deviation from the initial loading volume fraction. A spontaneous percolation happened during the loading process, which explains why the dashed purple curve goes up for R_i/R between 0.8 and 1.0 in Figure 6.9(a). Figure

6.9(b) shows the impact of the two baffle configurations for the blend with a size ratio of 2. As expected, the baffles were efficient at reducing the size segregation in the system.

6.4.2 Temperature evolution over time

We now look at the temperature evolution over time in the six packed beds presented in Figure 6.7. For this step, the cylinder was kept static, the baffles were removed and a temperature T_w of 773.15 K was applied to the walls at $t = 0$ s. Also, a convective heat flux was applied to all particles at the surface of the bed as discussed in Section 6.2.1. A simple visual observation of the temperature profiles in Figure 6.10 shows a significant difference in the six beds studied. The configurations with a higher state of segregation (Figures 6.10(b) and 6.10(f)) exhibit a larger core of colder particles, corresponding to the core of smaller particles. The well-mixed pattern with a very low segregation index (Figure 6.10(a)) presents lower temperature gradients. Figure 6.11 shows the evolution of the average temperature calculated with Equation 6.19 of all particles in the cylinder for all segregation patterns.

Figure 6.11 shows that the segregated states (no baffle configurations) for both size ratios heat up more slowly than the corresponding well-mixed states. In the segregated states, despite the presence of a core of smaller aluminum particles with high thermal diffusivity in the middle of the bed, much lower temperatures are obtained in that location than for the well-mixed states. Indeed, in the well-mixed states, these small particles with high diffusivity distributed everywhere among the bed and promoted heat transfer through the larger glass ones, thus accelerating the rise in global temperature throughout the bed. The global behavior of the patterns obtained with the two baffle configurations is close to that of the well-mixed pattern. This is attributed to their relatively low segregation indices (Figure 6.8) and more or less uniform distributions of small particles in the radial direction (Figure 6.9(b)). It is also interesting to note that the cases with the size ratio of 5 heated up more quickly than all cases with a size ratio of 2, whatever the segregation pattern. We explain this by the fact that the difference between the two blends (see Table 6.4) lies in the number and dimensions of the large glass particles. Indeed, both blends have almost the same amount of 3-mm particles (10,312 versus 9,886), which would heat up similarly if distributed similarly in the drum. However, Blend 1 contains 4,925 particles of 6 mm in diameter whereas Blend 2 has 330 particles of 15 mm in diameter. As has been shown in the literature, a packed bed made of larger particles has a somewhat higher effective thermal conductivity [94, 107, 115, 153]. This means that the glass beads, being larger in Blend 2, should heat up more quickly than the particles in Blend 1, thus accelerating the global temperature rise, the heat capacity and the density of glass beads being the same in both blends. This result is in line with Nafsun et

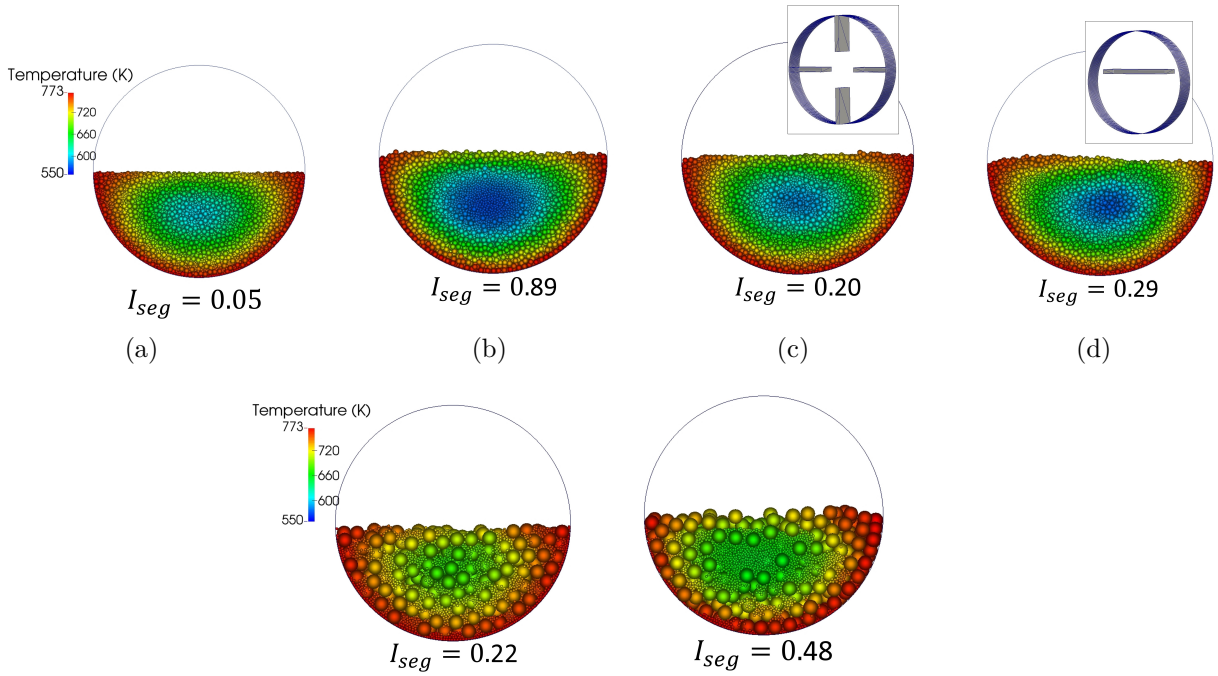


Figure 6.10 Visualization of temperature patterns obtained in the drum for a blend of 3-mm and 6-mm particles (a-d) and a blend of 3-mm and 15-mm particles (e-f) after 2 hours of heating. Configurations (a) and (e) represent well-mixed states obtained right after the loading step. Configurations (b) and (f) represent segregated states after 10 full rotations at 15 RPM without baffles. Configurations (c) and (d) represent the states obtained after 10 full rotations at 15 RPM with four baffles attached to the wall (c) and a middle baffle (d). Baffles were removed for the heating process. The drum wall was maintained at 773.15 K and a convective flux was applied at the free surface.

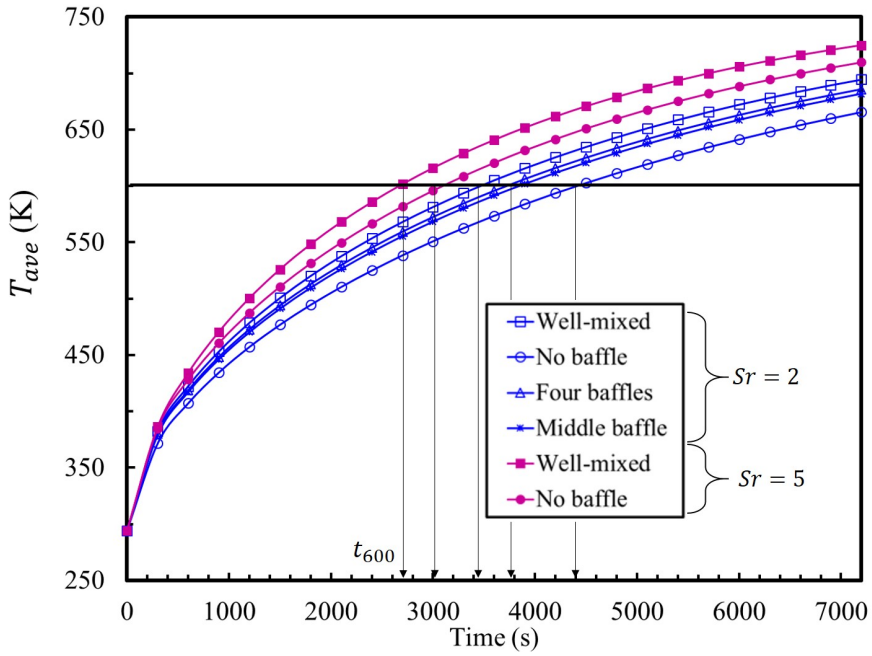


Figure 6.11 Evolution of the average energy-weighted temperature over time for the six segregation patterns. t_{600} represents the required heating time for each system to reach 600 K.

al. [122] who also concluded that larger particles enhance heat transfer in a rotating drum.

Also, we noted that the segregation pattern has an impact on the final porosity of the packed bed, which can impact the heat transfer as well. The porosities (ϵ), the mean coordination numbers (CN), i.e., the average number of contacts per particle, the total number of binary contacts (TNBC) and the time for the average temperature to reach 600 K (t_{600}) for the six cases investigated are presented in Table 6.8. The time to reach 600 K is given as an indicator of the speed at which the bed heats up and is shown in Figure 6.11.

Tableau 6.8 Contact network characteristics for the six configurations.

S_r (-)	2				5	
	Well-mixed	**No baffle**	**Four baffles**	**Middle baffle**	**Well-mixed**	**No baffle**
I_{seg}	0.05	0.89	0.20	0.29	0.22	0.48
ϵ (%)	39.9	43.6	42.2	42.3	35.6	39.8
CN†	5.1 ± 2.5	4.8 ± 1.8	4.9 ± 2.3	4.8 ± 2.3	4.7 ± 5.1	4.7 ± 5.0
TNBC‡	38,626	36,735	37,321	37,021	23,818	23,775
t_{600}	3461	4408	3726	3848	2668	3094

†Mean coordination number and the standard deviation of the distribution
‡ Total number of binary contacts

As can been seen in Table 6.8, the heating time increases with the bed porosity. Indeed, a lower porosity means that the smaller particles have filled the voids between the large ones. This results in more solid contacts and smaller gas voids between all the particles. Hence, the conduction is improved and the overall heating process is faster. For a given size ratio, the porosity is also related to the total number of contacts. The well-mixed patterns contain more contacts than their segregated counter-parts, thus enhancing the heat transfer. In addition, despite the average coordination number CN being relatively similar (between 4.7 and 5.1) for all cases, the distributions of the coordination numbers in the packings are really different as can be inferred from their respective standard deviation values (Table 6.8). It seems that a wider distribution, associated with a more complex interconnected network, leads to more efficient (and faster) heating.

In order to look at the evolution of the temperature profile versus the radial position in the drum, we show in Figure 6.12 the average particle temperature for six concentric disks (see Figure 6.4(b)) at four different times : 400 s, 2000 s, 4400 s and 7200 s.

The temperature profiles shown in Figure 6.12 highlight the fact that the largest temperature difference between the well-mixed (dashed lines) and segregated configurations (solid lines) were obtained for the configuration without baffles with a size ratio of 2 (Figure 6.12(a)). The temperature difference in this configuration can be as high as 30 K in the core of the drum after 4400 s. This variation in the profile is important as it can help predict the rate of chemical reactions. Figures 6.12(b) and 6.12(c) do not show significant differences (not more than $\sim$ 10 K) between the temperature profiles for the well-mixed and segregated cases obtained at a higher size ratio ($S_r = 5$) or using a drum with four baffles, even though some variation can be qualitatively observed between Figures 6.10(a) and 6.10(c), and between Figures 6.10(e) and 6.10(f). It should be reminded here that in the case of a size ratio of 5, small aluminum particles with a high thermal diffusivity have percolated all the way to the drum walls, thus enhancing the total heat transfer of the bed.

It is important to note that we have calculated an average energy-weighted temperature for all radial positions (Equation 6.19). This average is weighted by the volume of each particle and gives more importance to the large particles in the drum, which somehow alleviates the effect of the lower temperature of the smaller particles. The difference of 30 K in Figure 6.12(a) is all the more significant because it was obtained with the same average temperature definition. It confirms the fact that with a volume fraction as low as 20% of small particles, the average temperature of a disk within the drum can be reduced by 30 K, when going from a well-mixed to a segregated case.

In the case of a size ratio of 2 without baffles (Figure 6.12(a)) where segregation is dominant,

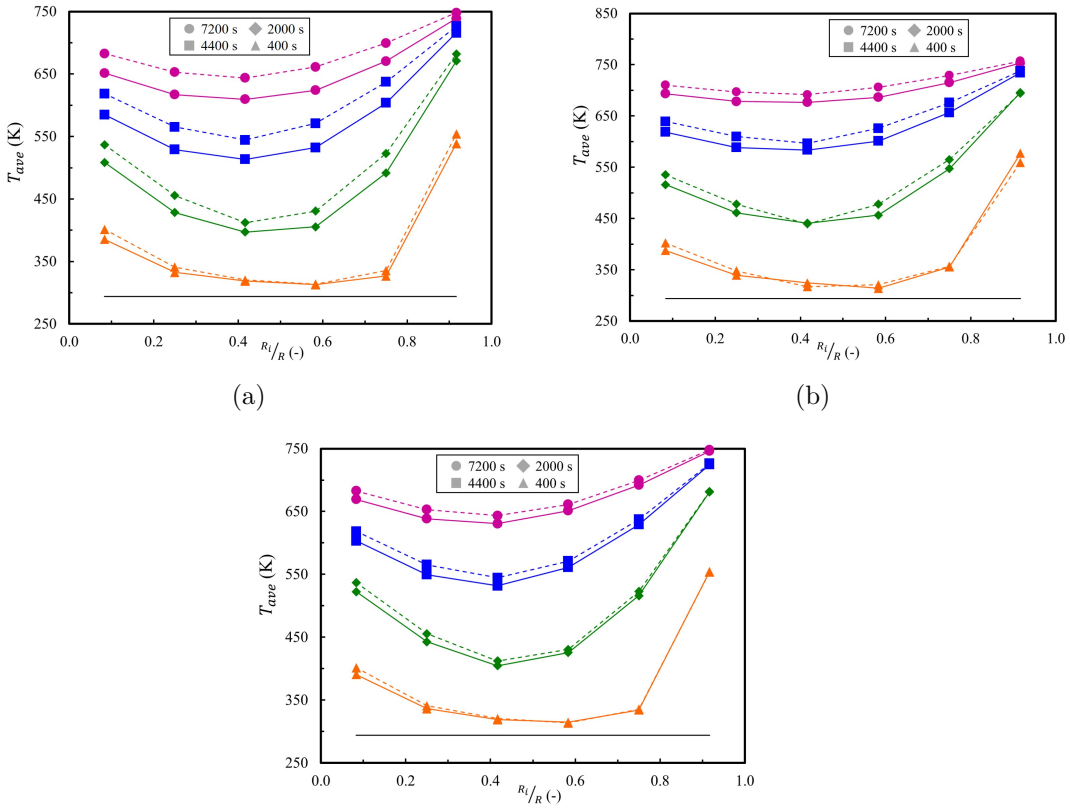


Figure 6.12 Comparison of the radial temperature profiles between the well-mixed state (dashed lines) and a segregated state (solid lines) for a size ratio of 2 (a) and 5 (b) without baffle, and for a size ratio of 2 with four baffles (c). The case with the middle baffle is not presented here because of results similar to those with four baffles. The black line represents the initial temperature (294.15 K) of all particles at $t = 0$ s.

we can see that after two hours of heating, the temperature difference between the particles in the last radial position close to the wall ($R_i/R = 0.92$) and the temperature measured in the middle of the bed ($R_i/R = 0.42$) reaches 130 K (739 K vs. 609 K). This difference can be problematic for many industries targeting a uniform temperature in the cylinder along the radial direction. In the well-mixed case, this difference is still present but to a lesser extent (i.e., $\sim$ 104 K). In addition, one may assume that a system with a higher volume fraction of small particles, and thus a larger core of small particles, would lead to even larger temperature differences.

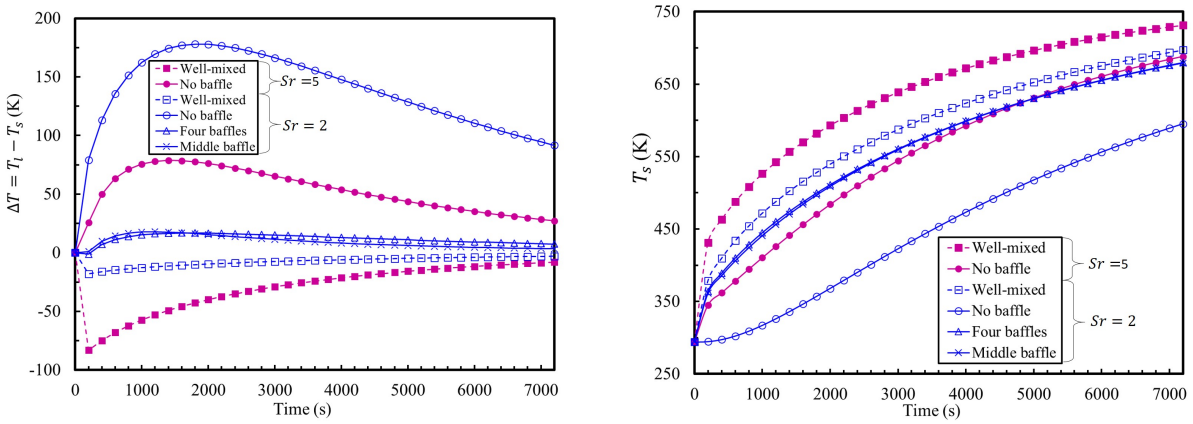
In summary, segregation slows down the global rise of the temperature and lowers the average radial temperature profile in the drum by changing the contact network between particles. However, Figures 6.12(a) and 6.12(c) indicate that the energy-weighted average temperature seems to alleviate the expected differences for these profiles. To shed more light on the heat transfer mechanisms prevailing in the drum, the temperature evolution of each type of particle is investigated in the next section.

6.4.3 Temperature difference between the two types of particles

To gain more insight into the link between segregation and temperature profiles in the drum, we look more specifically at the temperature difference over time between the average temperature of the large particles (T_l) and the average temperature of the small particles (T_s). Since all small (or large) particles have the same $\rho_i C_i V_i$, this term cancels out in Equation 6.19, which simplifies to an arithmetic average temperature for each type of particle. Figure 6.13(a) presents the temperature difference ΔT over time between the two types of particles for all six cases studied. A negative difference means that the smaller particles are warmer and vice versa.

For both well-mixed cases (square symbols in Figure 6.13(a)), the smaller particles are warmer than the larger ones. We see the opposite for all the segregated cases, but to a lesser extent for the two configurations with baffles. Since the thermal diffusivity (Table 6.3) of the small aluminum particles is much higher than that of the large glass ones, these small particles reach a higher temperature when they are well distributed in the drum and close to the heating walls or surface. For the two well-mixed cases, the temperature difference between the large and small particles is even larger with the size ratio of 5 at the beginning of the heating process. This is explained by a rapid rise in the temperature of small particles that are touching the wall and in contact with each other in this configuration (see radial distribution in Figure 6.9(a)), which is not seen with the size ratio of 2.

However, when small particles are trapped in segregation patterns, they are further from



(a) (b)

Figure 6.13 Temperature difference between the large and small particles (a) and temperature of the small particles (b) over time for the six configurations.

the heating sources and remain colder than the larger ones, despite their higher thermal diffusivity. Figure 6.13(b) shows that the small particles in the two no baffle segregated cases, which migrate to the core section (Figures 6.7(b) and 6.7(f)), remain much colder than their counterparts in the well-mixed configurations.

For the size ratio of 2, in the well-mixed configuration, both small and large particles have low and high temperatures depending of their radial position in the drum, leading to a small temperature difference (Figure 6.13(a)). A fair amount of small particles have reached the wall and the corresponding temperature after two hours (see Figure 6.10(a)) as opposed to practically none in the segregated state. We can link this behavior with the radial distribution of the small particles in the drum (Figure 6.9(b)), which shows that no small particles are found in the radial position near the wall in the segregated case. For a size ratio of 5, the smaller particles are also colder in the segregated state than in the well-mixed state (Figure 6.13(b)). For this size ratio though, some small particles have reached the wall and its temperature in both the mixed and segregated configurations because these particles have percolated to the wall thanks to the large difference in size between the two types of particles. Finally, there are no significant differences between the well-mixed state and the segregated state obtained with baffles. Baffles are therefore efficient at enhancing heat transfer and providing thermal uniformity, which is aligned with the conclusions of Chauhuri et al. [120] for monodisperse beds.

The maximum temperature difference between the two types of particles is observed for the size ratio of 2 without baffles and is equal to 178 K after 2000 s. This is a significant difference for a drum of 24 cm in diameter. After this point, the core of small particles starts to heat

up due to the conduction from the large particles around it. The gradient of temperature between the larger particles and the wall starts decreasing, which slows down the heating process of these larger particles. Therefore, the temperature difference between these two types of particle decreases. However, it is still 92 K after two hours of heating, while the difference is 3 K for the well-mixed case (Figure 6.13(a)). It represents a $\sim$ 30 times larger difference. The non-homogeneity in the drum due to segregation could lead to temperature control issues, which is often performed based on a thermocouple located at a specific point in the bed. Depending on whether this thermocouple is placed in a zone rich in small or large particles, the system response could vary greatly and could result in hazards or non-optimal operation.

6.4.4 Effective heat transfer coefficient

As discussed above, the segregation patterns that develop in a rotating drum can have a significant impact on the uniformity of the particles and the temperature profile in the bed. The evolution of the average temperature (Figure 6.11) shows that segregation increases the heating time of the process. In this section, an effective heat transfer coefficient at the wall, H_w, is calculated for every bed structure using the average temperature evolution over time. The effective heat transfer coefficient H_w, following the work of Komossa et al. [85], can be deduced from a global heat balance at the wall :

$$Q_w = \sum Q_{i,w} = H_w \cdot (T_w - T_{ave}) \cdot A_w \tag{6.21}$$

where Q_w, $Q_{i,w}$ and A_w are, respectively, the total heat flux at the wall, the heat flux calculated for particle i touching the wall, and the wall surface area covered with particles, i.e, $A_w = \pi \cdot R \cdot L$.

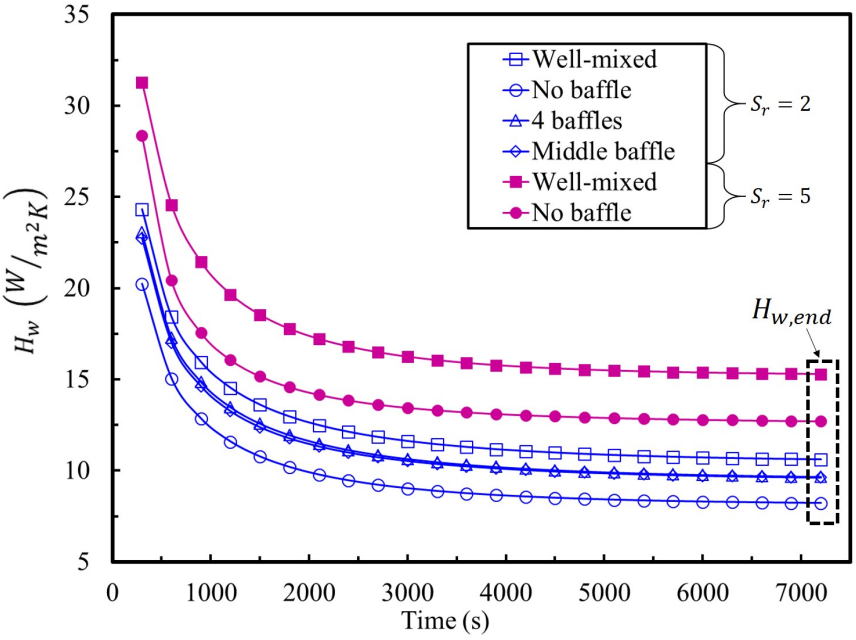
Figure 6.14(a) presents the effective heat transfer coefficient over time for the six configurations studied. It shows that H_w starts at its maximum value, when the temperature difference between the wall (T_w) and the particles (T_{ave}) is maximum. The effective heat transfer coefficient then decreases over time to reach a quasi-constant value after 2 hours of heating, $H_{w,end}$ (Figure 6.14(a)). For each size ratio, the heat transfer coefficient is the largest for the well-mixed case, confirming that segregation hinders the heating process. For a size ratio of 2, the effective heat transfer coefficient after 2 hours of heating (8.2) was 23% smaller in the case of the segregated bed with no baffle than in the well-mixed bed (10.6), and 9% smaller with four baffles (9.7) and with the middle baffle (9.6). For a size ratio of 5, the effective heat transfer coefficient was 17% smaller when the bed was segregated (12.7) compared to the well-mixed case (15.3). We recall that these comparisons were obtained for a system

containing only a 20% volume of small, highly conductive particles. The differences between the well-mixed and segregated cases may be higher with a higher fraction of small particles and/or less conductive ones. Also, the effective heat transfer coefficients are calculated using an average temperature in the bed. It is thus a global parameter whereas the specific temperature profiles in the bed shown in Figure 6.9 and the temperature difference shown in Figure 6.13 represent local indicators that also show the impact of segregation on heat transfer.

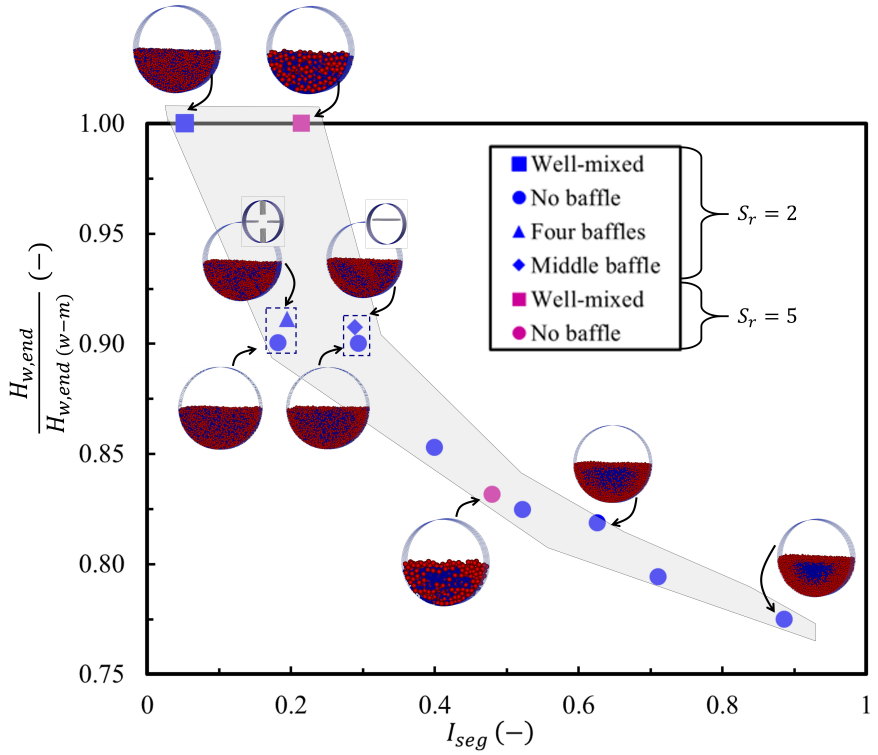
Figure 6.14(a) reveals a clear separation in the values of the effective heat transfer coefficient for all configurations after 2 hours of heating. In Figure 6.14(b), these values normalized with respect to the coefficient for the well-mixed state ($\frac{H_{w,end}}{H_{w,end(w-m)}}$) are plotted against the segregation index for the two size ratios. In this case, we also added six more points corresponding to additional segregation indices for the size ratio of 2 with no baffle. Following the gradual increase of the segregation index with the number of rotations shown in Figure 6.8, we obtained these points by freezing the drum at various numbers of rotations between 0 and 10 (see Section 6.2.3). This resulted in beds having increasing segregation indices ranging between the well-mixed case (0 rotation) and the no baffle case (10 rotations). We then relaxed these six intermediate segregated beds and applied a temperature of 773.15 K to the walls and a convective heat flux to the top surface (steps 3 and 4 illustrated in Figure 6.3).

Overall, Figure 6.14(b) shows a decrease in the normalized effective heat transfer coefficient as the segregation increases in the bed. The shape of the shaded area containing all the points suggests that the variation of the decrease in the coefficient due to an incremental change in the segregation index is higher at low values of the segregation index. This is related to the fact that once the core of small particles has begun to form, the thermal changes due to the further migration of these particles towards the centre seem to have a lesser impact. It is good to remind here that in the well-mixed case with a size ratio of 5, some small particles had already percolated through the larger ones by the means of spontaneous percolation during the loading step. This is why the segregation index of the well-mixed case with a size ratio of 5 is higher than that with the size ratio of 2.

It is also interesting to focus on the specific two additional points on the curve for the size ratio of 2, which are similar to the ones corresponding to segregated states with four baffles and the middle baffle (the dots enclosed in the dotted squares). We selected these intermediate cases to find out whether two cases with different particle positions but with the same segregation index would have the same effective heat transfer coefficients. As a matter of fact, the triangle and diamond points in Figure 6.14(b) were obtained after 10 rotations in the drum with four baffles and one middle baffle, respectively, whereas the corresponding enclosed blue circles were obtained after 0.56 and 0.94 rotations in the drum with no baffle. These two situations



(a)



(b)

Figure 6.14 Evolution of the effective heat transfer coefficient at the wall over time for all configurations (a) and the ratio of the effective heat transfer coefficient of the segregated states after two hours over the corresponding well-mixed coefficient ($H_{w,end(w-m)}$) against the segregation index, for a size ratio of 2 (blue) and 5 (pink) (b).

represent two different paths to obtain particle beds having a segregation index equal to ~ 0.2 and ~ 0.3, but in which the particles distributed differently. Figure 6.14(b) shows that the segregation index proposed here is a good indicator for predicting the effective heat transfer coefficient. Indeed, Figure 6.14(b) reveals that the $H_{w,end}$ values calculated for similar segregation indices are also similar, for a given size ratio.

Finally, as can be seen in Figure 6.14(b), there is a relationship between the effective heat transfer coefficient and the segregation intensity in the bed. In fact, the segregation has a huge impact on the contact network of particles in the bed. When particles of the same size agglomerate together, the total number of binary contacts decreases and the porosity increases (Table 6.8). The contact network is thus impaired, particularly near the wall where the depletion of small particles has a large effect on the effective heat transfer coefficient.

6.5 Conclusions

In this paper, an extended thermal discrete element method (TDEM) model was introduced to study heat transfer in blends of spherical particles differing in size. The model was developed for bidisperse blends, though it could also be used for polydisperse blends since all contacts are calculated in pairs. The thermal model was first validated in a packed bed made of aluminum and glass beads of different sizes. We showed that the agreement between simulations and experiments for this bidisperse blend to be excellent when an equivalent radius defined as the harmonic mean radius between a pair of touching particles is used in the calculations of the total heat conductance.

We then used the model to study the impact of granular segregation on heat transfer in a rotating drum. Simulations were performed using two different bidisperse particulate systems with size ratios of 2 and 5. Since the characteristic time of segregation in a drum is much smaller than the heating time, the dynamical and thermal problems were decoupled. Packed beds with various segregated states were first generated by DEM and then the heat transfer in these static segregated beds was studied by the extended TDEM model. For this purpose, our modeling approach comprised four steps : 1) the loading of the drum, 2) the rotation of the drum to reach a given segregated state, 3) the relaxation of the bed and 4) the heating of the static bed. This is a first step towards a better understanding of the impact of particle segregation on heat transfer. In addition to a well-mixed bed of particles generated randomly, we considered three drum configurations involving four baffles, a middle axial baffle and no baffle, to investigate different segregated bed structures. We found an inverse relationship between the effective heat transfer coefficient at the wall and the segregation intensity. A higher segregated bed gives a lower heat transfer coefficient. This is due to the fact that

segregation changes significantly the contact network between particles and the temperature profiles in the drum, creating a core of smaller and colder particles at its center. It was shown that the difference between the temperature profiles of the segregated and well-mixed beds is larger for the size ratio of 2. For a larger size ratio of 5, a less pronounced segregation was observed, which translated into a smaller impact on the heat transfer. Moreover, it was shown that adding baffles helps to homogenize the temperature distribution in the bed as it decreases the segregation index significantly. These results revealed that granular segregation cannot be ignored when trying to predict the temperature profile evolution in a bed made of bidisperse particles.

6.6 Acknowledgments

The authors thank Calcul Québec, Compute Canada, OCP, Mohammed VI Polytechnic University (UM6P) and the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada for computational resources and funding. The authors also gratefully acknowledge the financial support from the Simulation-based Engineering Science (Génie Par la Simulation) program funded through the CREATE program of the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada.

CHAPITRE 7 ARTICLE 3 : EFFECT OF PARTICLE ANGULARITY ON FLOW REGIME TRANSITIONS AND SEGREGATION OF BIDISPERSE BLENDS IN A ROTATING DRUM

Christine Beaulieu, David Vidal, Carine Niyonkuru, Anthony Wachs, Jamal Chaouki and François Bertrand

Submitted to Computational Particle Mechanics Journal

Abstract Granular segregation is a phenomenon that occurs when mixing different-sized particles. This work aims at comparing the segregation pattern and intensity in a bidisperse blend of spherical, cubic and icosahedral particles with a size ratio of 1.5 in a rotating drum. A model based on the discrete element method is used to simulate the flow of particles at rotational speeds ranging from 15 RPM to 115 RPM. This model is validated for monodisperse cubic particles. Segregation is shown to decrease with increasing particle shape angularity for a given rotational speed as long as the flow remains in the same regime. For all three shapes, the same sequence of segregation pattern occurs as the rotational speed increases (from a classic core segregation to a mixed state, and then to inverse segregation), but the speed thresholds for the transitions are shape-dependent and linked to the total kinetic energy of particles, as evidenced by a proposed apparent Froude number. The slip at the wall and the ability to spin explain why rounder shapes are less efficient to transfer kinetic energy from the wall into translational motion of the particles. This triggers regime transitions at higher rotational speeds for rounder particles, but at the same apparent Froude numbers. The transitions between cascading and cataracting, and between cataracting and centrifuging, occur at $Fr_{app} \approx 0.20$ and 0.35 respectively, regardless of the particle shape.

Keywords Discrete element method ; Non-spherical particles ; Regime transitions ; Granular segregation ; Rotating drum

7.1 Introduction

Granular materials are used in the pharmaceutical, food, waste management, and construction industries, among others. Despite their widespread use, granular materials exhibit peculiar behaviors that are worth studying in greater detail. For example, when granular materials are transported, mixed or sheared, they tend to segregate, leading to non-uniform mixtures. This phenomenon has a significant impact on the efficiency of all processes involving granular

materials that differ in size, density or shape. One way to improve our understanding of the flow of granular materials in any system is to use the discrete element method (DEM), a particle-scale numerical model that makes it possible to calculate the position and velocity of every particle in the system over time. Continuum models have also been used to study granular segregation in the recent years because of their ability to model large systems. However, most of them require segregation coefficients that have to be obtained from DEM simulations [158–160]. DEM relies on the solution of Newton's second law of motion in which interaction forces between particles are taken into account using spring-and-dashpot-based models. Over the years, DEM has been widely used to study granular flows in many different geometries, including non-circular cross-section tumblers [59,60], particle piles [54], mold casting [55], pneumatic transport [56], granular beds [161], ball mills [57, 58], gasifiers [61] and silos [62] thanks to the great amount of details provided by the DEM simulations. In recent years, academic and industry research scientists have relied on both DEM and experimental approaches to gain more insight into these granular mechanisms with the aim of optimizing industrial processes.

Flow in a rotating drum Rotating drums are widely used in industry to handle granular materials because they are versatile and easy to operate. In a rotating drum, solid particles flow through different modes of rolling, depending on the rotational speed and the filling degree [7, 10], as seen in Figure 7.1.

In addition to the rotational speed and filling degree, the exact points of transition between these regimes also depend significantly on the granular material itself, as pointed out by Mellmann [13]. Particle friction, among other things, has a major impact. This was confirmed by Dragomir et al. [15] who studied the critical speed of centrifugation in a rotating drum.

It is easy to understand why rotational speed is a key parameter for setting the required flow of particles and thus the efficiency of a given process (Figure 7.1). In addition, rotational speed is usually relatively easy to manipulate. Many studies have therefore been done to help industries set and control the optimal rotational speed for their processes. Indeed, the required operation flow regime differs from one process to another, ranging from avalanching at very low speeds to centrifuging at very high speeds. The dimensionless number that is usually used to classify regimes is the Froude number, which is defined as :

$$Fr = \frac{\omega^2 R}{g} \tag{7.1}$$

where ω, R and g are the rotational speed in $\frac{rad}{s}$, the drum radius and the gravity, respectively. The Froude number represents the ratio between centrifugal acceleration and gravity

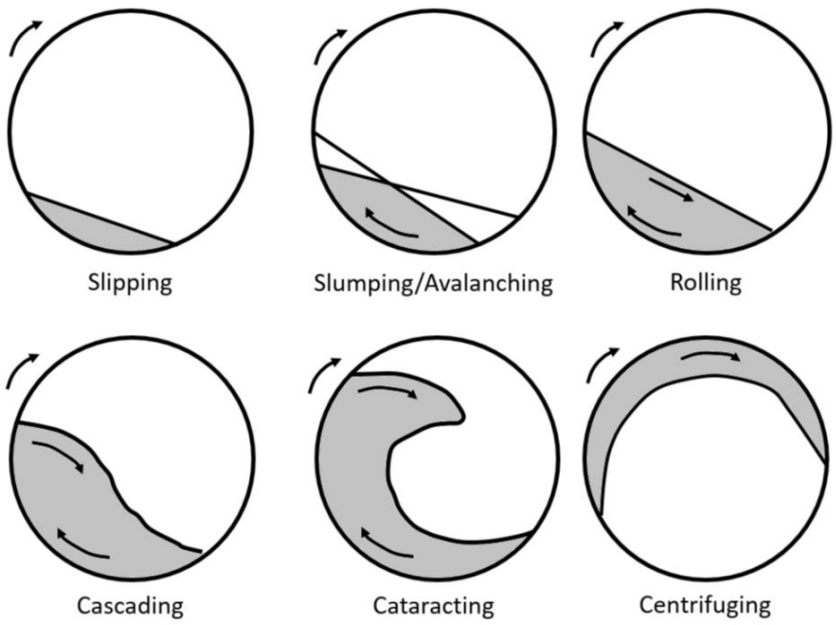


Figure 7.1 Different rolling modes of spherical particles in a horizontal drum when increasing the Froude number (see Equation 7.1) at a constant filling degree (adapted from [14]).

acceleration. Table 7.1 lists the approximate Froude number ranges that delimit the different flow regimes for spheres [6].

When the drum reaches steady-state in the rolling regime, the free surface of flowing particles is nearly flat and reaches a stable angle θ with the horizontal called the dynamic angle of repose. This angle depends on the rotational speed of the drum and the particle properties, as shown by Höhner et al. [16]. Two different zones develop below the free surface of the bed of particles : the active layer and the passive layer. A particle crosses the two regions when it goes through a full revolution following a given streamline. Figure 7.2 presents an example

Tableau 7.1 Froude number and rotational speed ranges for the different flow regimes in a rotating drum for spherical particles.

Rolling Regime	**Froude Number Ranges**	**Rotational Speed Ranges* (RPM)**
Avalanche	10^{-5} to 10^{-3}	0.2 to 2
Rolling	10^{-4} to 0.1	0.7 to 21
Cascading/Cataracting	0.1 to 1	21 to 67
Centrifuging	1 and over	67 and over

*Calculated for a drum radius of 0.1 m

of a streamline (yellow line) on a cross-sectional view of the drum when it is rotating. Figure 7.2 and the nomenclature used here were adapted from Dube et al. [32]. The particles rotate with the drum as a solid body in the passive layer, which is located near the walls of the drum, with no rearrangement or segregation. The active layer is located just under the free surface.

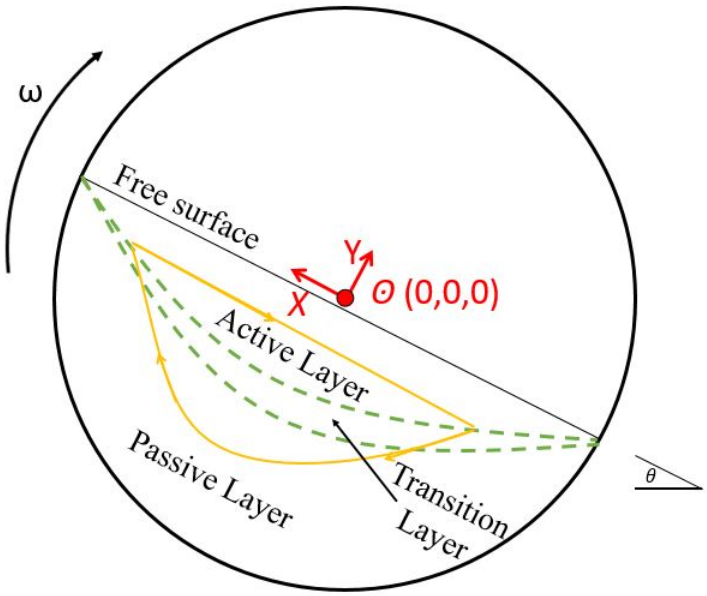


Figure 7.2 In the rolling regime, segregation mechanisms occur in the active layer, whereas particles in the passive layer move as a solid body (adapted from [32]).

Segregation Although segregation mechanisms in granular materials were studied and explained twenty-five years ago [19], significant efforts have, in recent years, focused on understanding their causes and their involvement in rotating drum operations, which underscores the importance of this phenomenon in industry. Segregation can be caused by a difference in particle size, density, shape, elasticity, or surface texture [19]. It is accepted that the two main mechanisms involved in radial segregation in a rotating drum are percolation (caused by a size ratio) and buoyancy (caused by a density ratio) [20–22]. Some authors also talk about the inertia mechanism (caused by a mass ratio) as a subclass of percolation and buoyancy. However, inertia is of minor importance compared to percolation and buoyancy [20]. Depending on the particle properties (size ratio, density ratio, shape, friction), drum properties (shape, dimensions, friction at the walls) and operating conditions (rotational speed, filling degree, volume fraction of each type of particle), either percolation or buoyancy predominates, leading to different stable segregation patterns after a few rotations of the drum. Four stable

segregation patterns have been identified experimentally and numerically for spheres : core segregation, double segregation, streak segregation, and inverse segregation, as illustrated schematically in Figure 7.3.

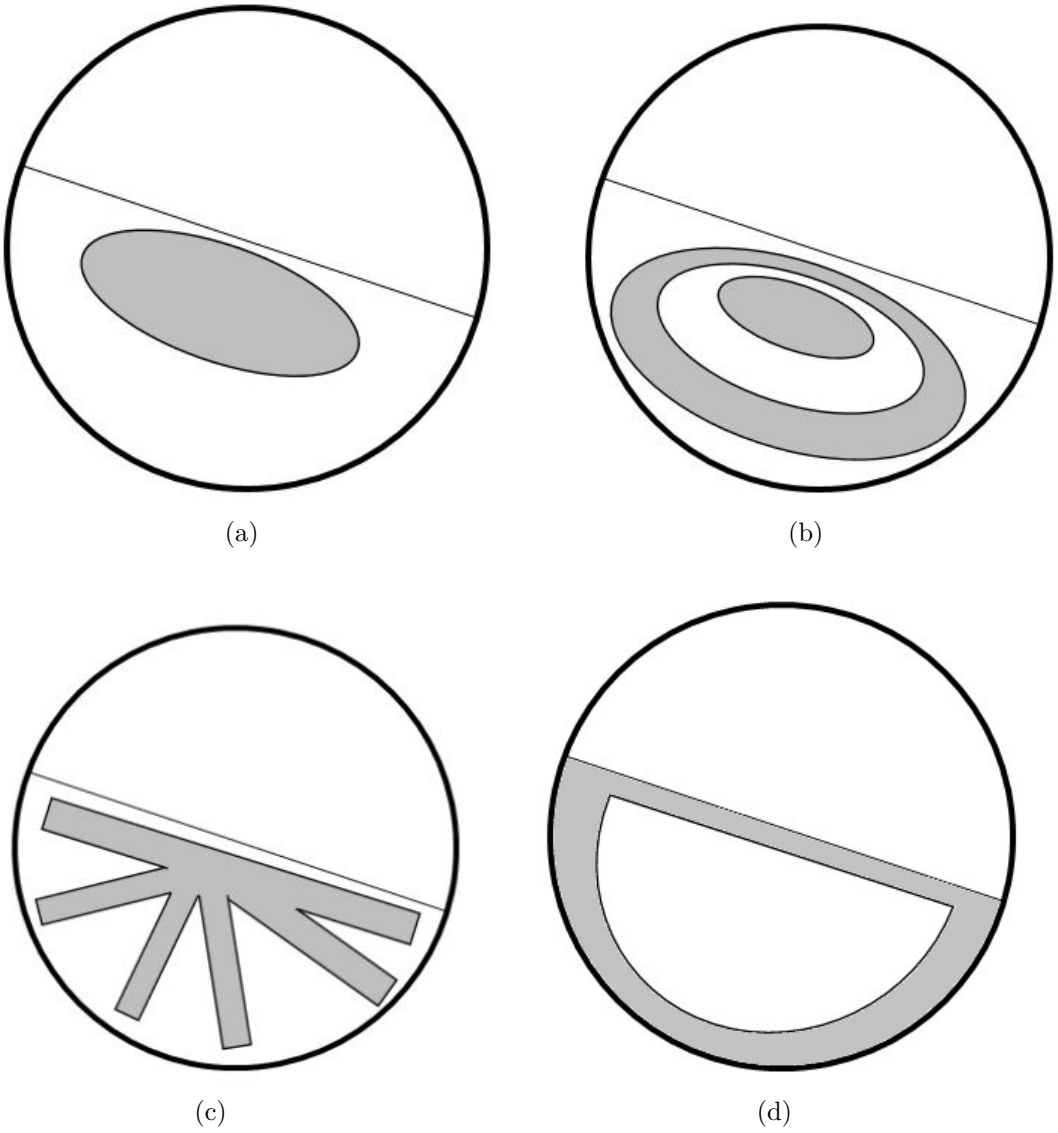


Figure 7.3 Segregation patterns encountered in a rotating drum. In the core segregation, smaller/heavier particles (gray) go to the middle of the bed (a) ; in double segregation, smaller/heavier particles go to the middle of the bed, but a second region in the form of an annulus around the core is also present (b) ; in streak segregation, smaller/heavier particles form a star-shape pattern in the middle of the bed (c) ; while, in inverse segregation, smaller/heavier particles accumulate in the vicinity of the wall (d).

Figure 7.3(a) shows the classic and most common type of segregation in the rolling regime (i.e., at intermediate rotational speeds). For this pattern, if segregation is driven by a size

ratio, percolation tends to bring smaller particles to the middle of the bed while, if segregation is driven by a density ratio, buoyancy brings heavier particles to the middle of the bed. Three other patterns arise from more specific rotational speed conditions, and size and density ratios where percolation and buoyancy oppose each other (Figure 7.3(b)), or where the rotational speed is low (Figure 7.3(c)) or high (Figure 7.3(d)). In an operating rotating drum, these segregation patterns can lead to many runnability or quality issues. For example, in a coating process, spray injectors are often fixed above the bed inside the drum and segregation may lead to uneven particle coating. In the pharmaceutical industry, in which the dosage of active ingredients in tablets must be as uniform as possible, segregation can have disastrous consequences when preparing the tablets.

Since a lot of industrial applications operate in the rolling regime, most studies using rotating drums have focused on intermediate rotational speeds and thus classic core segregation. Yamamoto et al. [154], Alchikh et al. [162], Chand et al. [163] and Barczi et al. [164] experimentally and numerically confirmed that a core of smaller/heavier particles is created in this regime. They also reported that the segregation index decreases with an increase in the rotational speed without, however, giving a complete explanation. Jain et al. [21] studied lower speeds (avalanche and rolling) experimentally and developed a pattern map for particles that differ in both size and density. Their map encompassed the core, the double and the streak segregation patterns. All these patterns were confirmed numerically by Pereira et al. [165] using DEM with similar conditions. Some authors investigated the impact of friction at the front and rear walls of the drum on segregation patterns [163, 166, 167] and concluded that the most important factor for predicting segregation is flow behavior, underlining the importance of delimiting the flow transitions. However, Mellman [13] pointed out the difficulty of achieving this goal. Arntz et al. [20, 22] numerically studied the impact of rotational speed on a binary-sized mixture and on different combinations of size, density and mass using a mixing index based on the mixing entropy of statistical mechanics. They studied a wide range of velocities, ranging from avalanching to centrifuging and found that segregation decreases with the rotational speed up to a certain point. After that point, which they estimated as Fr=0.56 for all the systems they studied, inverse segregation takes place and the segregation index starts to increase again. They explained this evolution of the segregation index by bed dilatation and the difference in the velocities of the two types of particles in the drum.

Non-spherical particles Most DEM studies have focused on spherical particles for which contact detection between two particles is relatively easy to compute. However, particles in real life are rarely monodisperse and spherical. Examples include operations to dry wood chips, coat fertilizer pellets, pyrolyze pieces of scrap tire and mix corn or rice. These solid

particles all have different shapes and sizes, which influence their behavior in rotating drums and which have an impact on mass transfer, heat transfer, and thus global efficiency and process control. Researchers have recently begun tackling this issue by simulating non-spherical particles. One DEM tactic occasionally used with perfectly spherical particles to simulate non-sphericity involves adjusting the rolling friction coefficient, which is used to calculate the frictional torque applied to the particle as soon as it begins to rotate. The aim of this artificial parameter is to represent rotational energy loss due to particle shape and inter-particle bonds (micro-slip, friction) at the point of contact [76]. Despite the simplicity of this parameter, the DEM community is not convinced of its validity for representing highly non-spherical particles and, as such, researchers still lack a good method for estimating its value. Wensrich and Katterfeld [77] suggested using the eccentricity of the particles and the equivalent radius to calculate the rolling friction parameter value. However, they observed significant discrepancies in the measured angle of repose when comparing piles formed by clumped particles and by spherical particles with a constrained rolling friction coefficient. They suggested that the discrepancies were caused by the fact that clumped particles can either have a promoted or hindered rotation depending on their shape and their orientation, whereas constrained spherical particles can only be prevented from rolling. As there is no way to accurately estimate the rolling friction coefficient, it is often ignored in DEM simulations. Also, it is reasonable to think that the shape effect on behavior is very complex and cannot be lumped into one only parameter. Other models have thus been developed that not only represent the shape with a rolling friction coefficient but also numerically represent the true particle shape. Lu et al. [78] and Wachs et al. [79], among others, provided detailed reviews of methods to simulate non-spherical particles using DEM. They categorized non-spherical models into five classes : ellipsoids, super-quadrics, polyhedrons, composite spheres and composite elements. They also pointed out that the main computational challenge associated with modelling non-spherical particles is the added complexity caused by particle orientation, rotational motion, and contact detection.

Rakotonirina et al. [34] showed numerically that the angularity of monodisperse particles changes the flow regime in a rotating drum. Indeed, angular particles exhibit an avalanching regime at higher rotational speeds than spheres and start to centrifuge at lower speeds, making the rolling regime of 3D cross-shaped particles disappear. Similarly, He et al. [35] and Norouzi et al. [36] observed, visually and numerically, that the transition between rolling and cascading occurs earlier with non-spherical particles than with spheres. They used a multi-sphere approach to simulate oval and oblong particles. Gui et al. [37] used the soft-sphere imbedded pseudo-hard particle model (SIPHPM) to show that, at 60 RPM, monodisperse spherical particles in a tumbler continue cataracting when monodisperse cubic particles have

already transitioned to centrifuging.

In terms of segregation in a rotating drum, it is still an open question as to whether non-spherical particles flow and eventually segregate in the same way as spheres at equivalent rotational speeds. Makse [39] analytically showed that more rounded particles segregate at the bottom of a pile whereas cubic particles segregate at the top of a pile. They explained this by the fact that spherical particles can roll more easily than cubic particles, allowing them to roll downhill. Similarly, Höhner et al. [16] and Santos et al. [38] used DEM to show that an increase in the angularity of monodisperse particles results in an increase in the dynamic angle of repose of the bed in a rotating drum. This extends and confirms the hypothesis of Makse [39] for piles. Dube et al. [73] used an experimental approach, the radioactive particle tracking (RPT), to study segregation in pharmaceutical ellipsoid tablets. They observed that ellipsoids segregate either in the core of the drum (core segregation) or at the periphery (inverse segregation), depending on the specific shape of the ellipsoid. They suggested that the mechanisms of percolation and buoyancy are hampered by the ellipsoid shape, leading to unexpected segregation patterns. In terms of the percolation mechanism in particular, they suggested that, for non-spherical particles, the criterion for determining which particle goes to the core of the drum is not the volume of the particles but the cross-section perpendicular to their sliding direction. However, they could not confirm their hypothesis. Along the same line, Pereira et al. [40] and He et al. [41] studied segregation in a rotating drum filled with cubes and spheres and with ellipsoids and spheres, respectively, at low rotational speeds. They introduced a new concept to explain the shape segregation patterns observed, i.e., flowability. Flowability is defined as the ease with which particles flow along the active layer close to the surface. Rounder particles experience fewer deviations and thus lose less energy and have higher velocities. As such, rounder particles segregate at the periphery of the drum whereas particles with sharper edges/corners segregate in the core of the drum, as shown by the difference in velocity of the two types of particles in the flowing layer. Since this mechanism depends on the shape difference and the rotational speed, it can also explain the inverse segregation patterns observed. Pereira et al. [40] and He et al. [41] also pointed out that this segregation is weaker than percolation or buoyancy because it occurs along the flowing layer rather than perpendicular to it. Maione [168] used a multi-sphere approach to show that, at high rotational speeds, an approximation with spheres gives the same segregation pattern in a rotating drum with baffles as the pattern with non-spherical particles.

Our literature review revealed that there is no consensus on granular segregation in a rotating drum based on the impact of the rotational speed, the size and density ratios, and the shape of particles in binary systems. The main objective of the present work was thus to study the behavior of non-spherical convex particles in a rotating drum at a wide range of rotational

speeds and to compare it with the behavior of spheres in order to validate existing theories. Our hypothesis was that the corners and edges of angular shapes (cubes or icosahedra) have an impact on the segregation patterns. Our aim was to qualify and quantify this impact. To do so, we studied the impact of rotational speed on a segregation mechanism (percolation) using DEM. The remainder of this article is organized as follows : Section 7.2 describes the simulation method and conditions, Section 7.3 describes how the segregation was quantified, Section 7.4 presents the experimental validation of our DEM code for a monodisperse case in a rotating drum, Section 7.5 reports our results and Section 7.6 provides concluding remarks.

7.2 Simulation methods and conditions

In this section, we present the governing equations of DEM and the specific models we used in the present study. We explain how we selected the time step and the various numerical parameters. We then explain how the drum geometry, boundary conditions and particle properties were characterized. To study the impact of particle shape on segregation, we selected spherical, cubic, and icosahedral particles. Cubes are not only non-spherical but also feature sharp edges and corners. To some extent, cubes constitute a simplified model of wood chips or pieces of scrap tire processed in rotating drums in the wood industry or in the production of biofuel, respectively. Spheres, which are better documented in the literature, were used as a reference point, and icosahedra were chosen as an intermediate shape to study the trends.

7.2.1 Governing equations of DEM

The motion of rigid bodies is governed by Newton's law of motion. Of the possible forces exerted on particles, we ignored non-contact cohesive forces such as van der Waals forces, capillary forces and electrostatic forces, and hydrodynamic forces related to the interaction with a surrounding fluid. Thus, the gravity force and the contact forces were the only forces exerted on particles that were considered in the present study. As a result, Newton's second law with respect to the translation and rotation of a particle i reads as follows, respectively :

$$m_i \frac{d\mathbf{v_i}}{dt} = \sum_{j,j\neq i} \mathbf{F_{c,ij}} + \sum_{w} \mathbf{F_{c,iw}} + m_i \mathbf{g} \tag{7.2}$$

$$\frac{d(I_i \boldsymbol{\omega_i})}{dt} = \sum_{j,j\neq i} \mathbf{R_j} \times \mathbf{F_{c,ij}} + \sum_{w} \mathbf{R_w} \times \mathbf{F_{c,iw}} \tag{7.3}$$

where m_i, $\mathbf{v_i}$, I_i, ω_i, $\mathbf{F_{c,ij}}$, $\mathbf{F_{c,iw}}$, $\mathbf{R_j}$, $\mathbf{R_w}$ and $\mathbf{g}$ are the particle mass, particle translational velocity, particle moment of inertia tensor, particle angular velocity, contact force with par-

ticle j, contact force with wall w, vector pointing from the center of mass of particle i to the contact point with particle j, vector pointing from the center of mass of particle i to the contact point with wall w and gravity acceleration, respectively. It is important to note here, that for a contact between two spherical particles, only the tangential force contributes to the torque calculation and the rotation because the normal force is colinear with the vector $\mathbf{R_j}$. This does not apply to non-spherical particles, for which the normal force also contributes to the torque.

Following Lu et al. [78], Wachs et al. [79] and Blais et al. [52], a general contact force model was constructed as follows :

$$\mathbf{F_{c,ij}} = \underbrace{\left(k_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{a}\,\delta_{\mathbf{n,ij}} - \gamma_{n,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{b}\,\mathbf{v_{n,ij}}\right)}_{\mathbf{F^n_{c,ij}}} + \underbrace{\left(k_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{c}\,\delta_{\mathbf{t,ij}} - \gamma_{t,ij}\,||\delta_{\mathbf{n,ij}}||^{d}\,\mathbf{v_{t,ij}}\right)}_{\mathbf{F^t_{c,ij}}} \tag{7.4}$$

$$\mathbf{F^t_{c,ij}} \leq \mu_C \mid \mathbf{F^n_{c,ij}} \mid \tag{7.5}$$

where $\mathbf{F^n_{c,ij}}$ and $\mathbf{F^t_{c,ij}}$ are the normal and tangential components of the contact force, $k_{n,ij}$ and $\gamma_{n,ij}$ are the normal spring and dashpot coefficients, $k_{t,ij}$ and $\gamma_{t,ij}$ are the tangential spring and dashpot coefficients, $\delta_{\mathbf{n,ij}}$ and $\delta_{\mathbf{t,ij}}$ are the normal and tangential overlaps, $\mathbf{v_{n,ij}}$ and $\mathbf{v_{t,ij}}$ are the normal and tangential relative velocities (which are expressed as derivatives of the overlaps with respect to time), and μ_C is the Coulomb friction coefficient. The exponents a, b, c, and d are non-negative constants whose values define the contact force model. In the case of spheres, the contact force model may be supplemented by a rolling resistance torque model to account for the fact that so-called spherical particles are never perfect spheres, inducing micro-slip or micro-friction at the point of contact (see [76] for more details). The simplest rolling resistance torque model, which is implemented in the present work, reads as follows :

$$\mathbf{T_{ij}} = -\mu_r \mid \mathbf{F^n_{c,ij}} \mid r^* \frac{\omega_{\mathbf{ij}}}{\mid \omega_{\mathbf{ij}} \mid} \tag{7.6}$$

where μ_r is the rolling friction coefficient of the material, $r^* = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j}$ is the reduced radius and $\omega_{\mathbf{ij}}$ is the relative angular velocity $\omega_{\mathbf{ij}} = \omega_{\mathbf{i}} - \omega_{\mathbf{j}}$.

We set a, b, c, and d and the coefficient k_t to 0. Our contact force model is thus characterized by a Hookean spring and a constant dissipation coefficient in the normal direction and dynamic friction dictated by the Coulomb threshold in the tangential direction. This model is appropriate for a system like a rotating drum that is never in a quasi-static state. Indeed, we observe that the spring-like component of the tangential friction force k_t based on the

cumulative tangential displacement has literally no effect on the dynamics of the system as the relative velocity between two particles is always large enough for the tangential friction force to saturate to the Coulomb limit. The numerical parameters and definitions used for our Hookean model are given in Tables 7.2 and 7.3, where m, r and e_n are, respectively, the mass, the radius and the coefficient of restitution of the particle. The contact force model parameters (friction coefficients μ_c and the coefficients of restitution e_n) are taken as those of polycarbonate particles in a steel drum. The numerical parameters k_n are selected following Wachs et al. [75]. Computations were performed with the DEM Grains3D code that handles non-spherical particles through quaternions and a Gilbert-Johnson-Keerthi (GJK) algorithm-based collision detection strategy. The code integrates Equations 7.2 and 7.3 together with kinematic equations with an explicit second-order leap-frog scheme (see [34,75,169] for more details).

7.2.2 Time step selection

The choice of the time step Δt in DEM simulations is critical as it dictates the frequency at which all the forces, positions and velocities are recalculated in the simulation. Too large a time step leads to unstable simulations or wrong results because the calculation of the contact force between particles would be too coarse. On the other hand, too small a time step leads to very long simulation times despite the recent trend to use supercomputers and parallel codes. Finding a valid time step that is a good compromise between misleading results and an acceptable time of simulation is not straightforward in DEM. A trade-off strategy to determine an estimate of Δt is to relate it to the shortest contact duration in the system. The time step magnitude is then selected such that the shortest contact time between two particles lasts at least 10 time steps [34]. With our Hookean model, it is possible to calculate a theoretical contact time T_C between two similar spheres colliding in a zero-

Tableau 7.2 Contact force model parameters.

	Particle-Particle	**Particle-Wall**
k_n (sphere) (Pa.m)	3×10^5	3×10^5
k_n (cube) (Pa.m)	2×10^5	2×10^5
μ_C (-)	0.58	3
μ_r (-)	0	0
e_n (-)	0.8	0.8

Tableau 7.3 Hooke model parameter definition.

Parameter	**Definition**
γ_n (kg/s)	$2\beta_n m^*$
γ_t (kg/s)	$2\beta_t m^*$
β_n (s^{-1})	$\frac{ln(e_n)\omega_0}{\sqrt{ln^2(e_n)+\pi^2}}$
β_t (s^{-1})	1×10^5
k_t (Pa.m)	0
ω_0 (s^{-1})	$\sqrt{\frac{2k_n}{m^*}}$
$\frac{1}{r^*}$ (m^{-1})	$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}$
$\frac{1}{m^*}$ (kg^{-1})	$\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

gravity environment [170], such that :

$$T_C = \frac{\pi}{\sqrt{\omega_0^2 - \beta_n^2}} \tag{7.7}$$

where ω_0 and β_n are two parameters related to the spring constant and physical parameters, which are defined in Table 7.3. In the present study, we used $\Delta t \leq T_c/10$, which gave values ranging from $5\times10^{-6}s$ to $1.5\times10^{-5}s$, depending on the type of particle used in the simulation. Computations were performed in parallel mode using 4 cores of 2.1 GHz processors of an Intel E5-2683 v4 Broadwell of the Graham cluster operated by Compute Canada. Computations were halted once a pseudo-steady state was reached, which was determined when the following criterion was satisfied after five consecutive evaluations (see Figure 7.4) :

$$\frac{\left|\left|\overline{I_{seg}(t)} - \overline{I_{seg}(t-1)}\right|\right|}{\overline{I_{seg}(t)}} < \epsilon_{steady} \tag{7.8}$$

where $\overline{I_{seg}(t)}$ represents the time average over $[t-t_{4rot}, t]$ of the segregation index I_{seg} defined in Section 7.3.1 and where t_{4rot} is the time interval corresponding to four complete drum rotations. $\overline{I_{seg}(t-1)}$ corresponds to the time average evaluated at the previous output. For low rotational speeds, we took $\epsilon_{steady} = 0.005$ while for high rotational speeds we relaxed ϵ_{steady} to 0.02 due to the strong dynamics.

7.2.3 Simulation domain geometry and boundary conditions

The geometry used in the present study was a cylindrical tumbler rotating around the Z'-axis (see Figure 7.5). The inside drum diameter D was 0.28 m (R=0.14 m) and the length of the

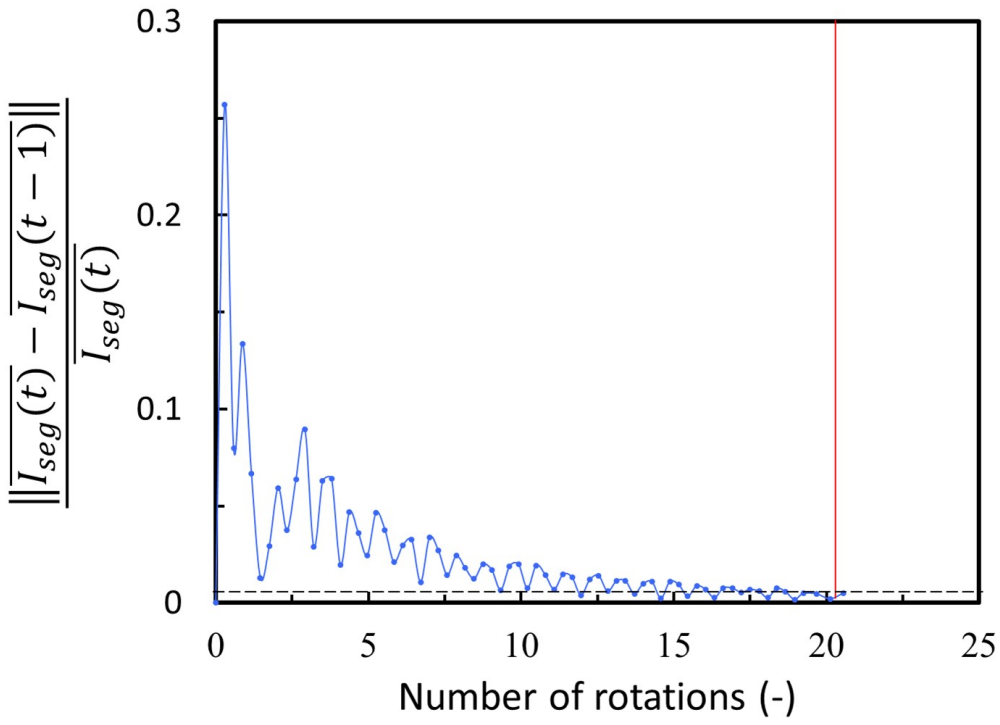


Figure 7.4 Simulations were halted when a pseudo-steady state was reached based on criterion defined in Equation 7.8.

drum L was 0.10 m. Gravity was in the opposite direction to the Y'-axis. The origin O was located in the middle of the drum in the $Z' = 0$ plane. The drum wall was discretized using 72 elongated rectangular 0.005-m thick prisms. Various constant rotational speeds ω ranging from 15 to 115 RPM were imposed on the cylinder at time t=0 in a clockwise direction. Given that radial segregation is the focus of the present article, periodic conditions were imposed on the walls at Z'=0 m and Z'=0.1 m to simulate a very long drum and to avoid end-wall effects that can lead to axial segregation.

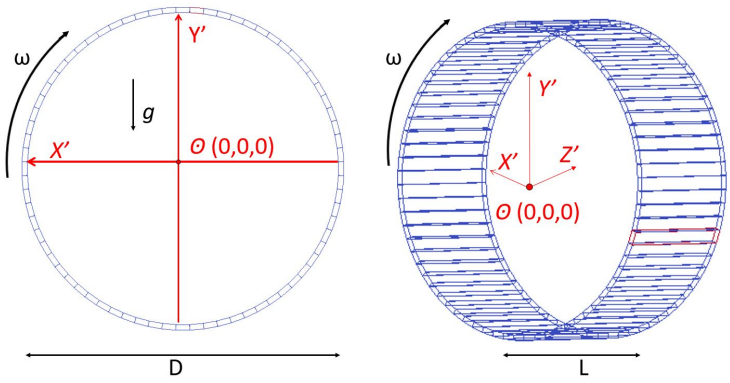


Figure 7.5 Lateral (left) and perspective (right) views of the domain geometry and its discretization.

The initial particle condition was always a well-mixed blend of bidisperse particles. We obtained this mixed state by randomly inserting the two types of particles from two insertion windows located at the top of the drum. Particles fell down under gravity and settled randomly at the bottom of the drum. Subsequently, the drum was rotated at the abovementioned rotational speeds, making it possible to study the demixing process over time.

7.2.4 Particle properties

To quantify the impact of the shape or, more precisely, the angularity of the shape on size granular segregation in a tumbler, we used three blends of bidisperse cubes, icosahedra and spheres. Cubes were chosen because they represent a perfectly symmetric convex shape with respect to the three coordinate axes and exhibit a high degree of angularity. Icosahedra, which are convex regular polygons with 20 triangular faces, were chosen as an angular shape intermediate between spheres and cubes, giving us the opportunity to determine whether segregation is a monotone function of angularity.

The size ratio was set at 1.5, allowing us to compare our results with similar analyses in the literature [21, 22]. Also, a small size ratio of 1.5 restricts the segregation mechanism in

the active layer where particles are in motion (sieving) and prevents spontaneous segregation in the unmoving passive layer (percolation). According to Mosby et al. [19], spontaneous percolation occurs in any system with a large size ratio under gravity only. On the other hand, sieving is a mechanism that is possible with a smaller size ratio as long as the large particles are in motion. In our case, a large size ratio would allow small particles to percolate, even in the passive layer, and to accumulate at the bottom of the drum. We thus chose the 1.5 ratio to limit percolation and to focus on sieving (only in the active layer). In the remainder of the present article, however, we use the term percolation despite the somewhat improper terminology given that sieving is commonly referred to in this way in the drum granular segregation literature. We limit our study here to one size ratio, but we believe that the findings can be extended to other size ratios as long as sieving remains the dominant mechanism.

All particles had a density of 1200 kg/m^3 (polycarbonate). For the spheres, the bidisperse system was a 50%-50% volume fraction mix of 5-mm and 7.5-mm-diameter particles. The edge length of the cubes and icosahedra was determined such that angular shapes and spheres had the same volume. This led to a 50%-50% volume fraction mix of 4-mm and 6-mm-edge length cubes and a mix of 3.11-mm and 4.66-mm-edge length icosahedra. We used a filling degree f of 50% of the drum volume at rest to estimate the number of spheres required. The filling degree was obtained by dividing the bulk volume of the particles by the total volume of the drum, leading to a total number of 18,293 particles. To compare the results from the different shapes, we kept the same number of particles for spheres, icosahedra and cubes. All our simulations thus contained 14,112 small particles and 4,181 large particles. As the packing solid fraction slightly varies between spheres and cubes [34], the filling fraction of the drum was slightly larger for cubes than for spheres (51.9% vs. 50.0%). This also applies to icosahedra but to a lesser extent. This very small difference in filling degree can however be neglected. Indeed, Jain et al. [21] found no impact of the filling level varying 40% to 65% (i.e. over a much wider range) on the core segregation and on the band segregation patterns for spherical particles at 2 RPM. The filling level only influenced the length of the streaks, which is a segregation pattern that we do not study here. The physical properties of the particles used in the present study are given in Table 7.4.

7.3 Segregation characterization

Different metrics to assess mixing or segregation in a system have been proposed in the literature ([10, 30, 33, 59, 73, 150, 154, 155]). In the present study, we mainly used the relative standard deviation based on the work of Lemieux et al [155].

Tableau 7.4 Particle properties.

	Type 1	**Type 2**
d_p (sphere) (mm)	5	7.5
ρ (sphere) ($\frac{kg}{m^3}$)	1200	1200
l_p (cube) (mm)	4	6
ρ (cube) ($\frac{kg}{m^3}$)	1200	1200
l_p (icosahedron) (mm)	3.11	4.66
ρ (icosahedron) ($\frac{kg}{m^3}$)	1200	1200

7.3.1 Segregation index

The segregation index I_{seg} represents the relative standard deviation of the mass concentration of one type of particle. I_{seg} hereafter is defined as :

$$I_{seg} = \frac{\sigma}{\bar{x}} \tag{7.9}$$

with the standard deviation, σ, defined as :

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{M} \lambda_i \left(\bar{x} - x_i\right)^2}{M-1}} \tag{7.10}$$

where M, $\bar{x}$, x_i and λ_i are, respectively, the total number of samples, the mean concentration of the type 1 particle in the drum, the mass concentration of this type of particle in sample i and a sample weighting coefficient. Because we used a Cartesian grid to sample our concentrations while the drum geometry was cylindrical (Figure 7.6), a cell volume-based weighting coefficient λ_i was added, unlike the usual definition of I_{seg}, to account for the excluded volume for cells near the drum walls or the free surface. This coefficient is defined as :

$$\lambda_i = \frac{V_{p,cell}}{V_{cell}} \tag{7.11}$$

where $V_{p,cell}$ and V_{cell} denote the volume occupied by particles in the cell and the volume of the cell, respectively. I_{seg} is equal to 0 for a perfectly mixed system where the concentration of each sample is equal to the average concentration.

The choice of the grid dimensions has an impact on the calculated absolute values of I_{seg}. We used the same grid for all our simulations to be able to compare the results. Too coarse a grid can dissimulate important segregated zones, whereas too fine a grid leads to an asymptotic value in all cases of segregation because there is more or less one particle in every cell. We

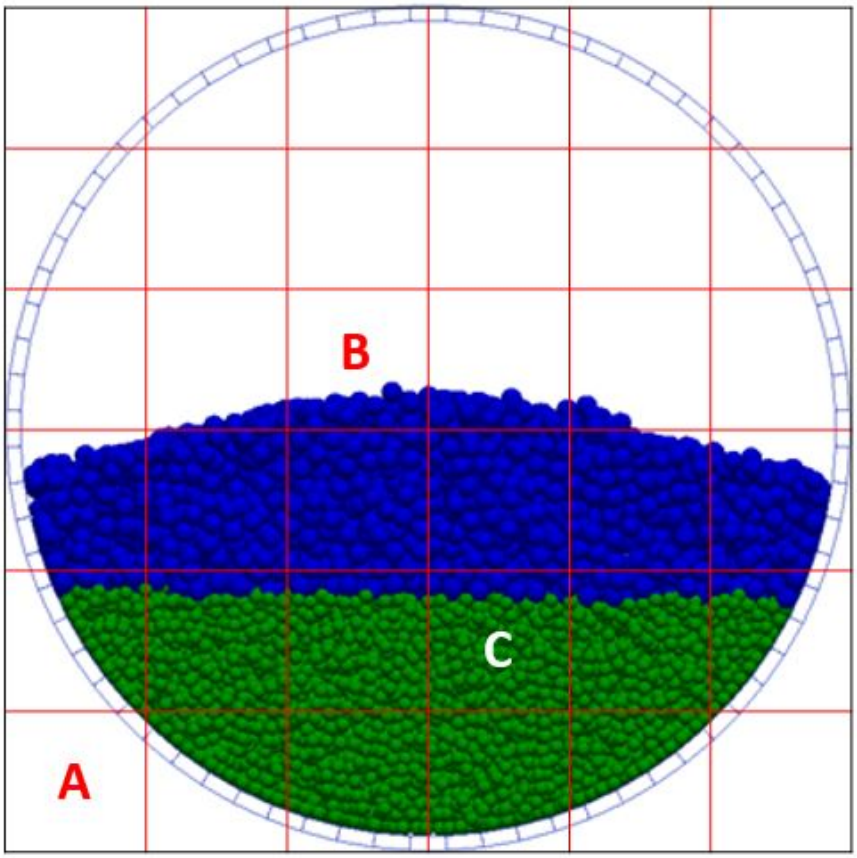


Figure 7.6 The segregation index I_{seg} is calculated using a Cartesian sampling grid.

tested different grid dimensions ranging from 2 x 2 to 30 x 30, and chose a 7 x 7 (4 cm x 4 cm) grid because it best represented the scale of segregation in the drum.

7.4 Model validation

The Grains3D code used in the present study was previously validated using experimental data in the context of cylindrical particle packing [75] and non-convex cross-like particles in a rotating drum [34]. To further assess the validity of the code, a new set of experiments with monodisperse pine wood cubic particles in a rotating drum was conducted and the results were compared with the predictions from Grains3D.

The same experimental set-up as in Rakotonirina et al. [34] was used, and our analysis procedure was inspired by these authors. The set-up consisted of a rotating drum with transparent Plexiglas walls in which different sizes of drum could be inserted (see Figure 7.7). The front Plexiglas circular wall allowed us to record the motion of particles with a 30-frame-per-second video camera. The back circular wall of the drum was opaque and could be adjusted to adapt to the length of the drum. The whole apparatus was driven by two rotating rods connected to an electrical motor. The numerical and physical properties of the cubic particles and the two drum configurations used for the model validation are summarized in Tables 7.5 and 7.6. The density ρ of the wooden cubes was measured and the friction coefficients μ_C, as well as the coefficients of restitution e_n, were found in the literature for the wood and Plexiglas materials. Here again, the numerical parameters k_n were selected following Wachs et al. [75].

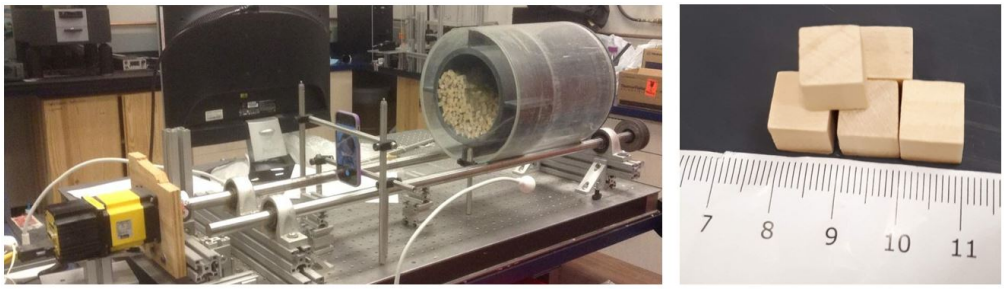


Figure 7.7 Experimental set-up used for the model validation

For most of the selected low rotational speeds ($Fr \sim 10^{-3}$) dictated by the available set-up, the resulting dynamics in the drum were characterized by episodic avalanching. At 8 RPM, the flow appeared close to the transition with rolling. To assess the validity of Grains3D, we examined the evolution over time of the free surface obtained by image analysis. We characterized the free surface using the dynamic angle of repose and with a Fourier analysis

Tableau 7.5 Modeling parameters used for the model validation.

	Particle-Particle	**Particle-Wall**
k_n (Pa.m)	2×10^4	2×10^4
μ_C (-)	0.5	0.7
μ_r (-)	0	0
e_n (-)	0.6	0.6

Tableau 7.6 Physical drum configurations used for the model validation.

	Drum 1	**Drum 2**
D (cm)	19.0	15.0
L (cm)	11.1	5.5
f (%)	50	30
ω (RPM)	2-4-6-8	
Particles	Pine wood cubes : $l_p = 1cm$; $\rho = 631 \frac{kg}{m^3}$	

of this latter signal. The procedure analysis is described below and is shown in Figure 7.8(a). First, to calculate the dynamic angle of repose, we converted images from the video recordings and the DEM simulation visualizations into binary images to identify the stack of cubes. We then localized the free surface by scanning the image from top to bottom and by detecting the first white pixel for every X-coordinate (red and green lines in Figure 7.8(a)). We then calculated an angle of repose by fitting a linear regression through all the free surface points between the highest point and the point with the highest X-coordinate (purple circles in Figure 7.8(a)). The selected pixels are in green in Figure 7.8(a). As shown in Figure 7.8(b), the angle varied over time as avalanches occurred in the drum, for both experiments and simulations with a good agreement. All the configurations were performed for 50 seconds. Once a pseudo-steady state was reached after approximately one full revolution, the angle of repose was averaged over the remaining time and its standard deviation was determined. Figure 7.9 illustrates the resulting analysis for both simulations and experiments for the two drum configurations. Figure 7.9 shows satisfactory agreement between the simulations and the experiments for the mean angle of repose as well as the standard deviation over time. Both experiments and simulations showed that, for the two configurations studied, the filling degree, the rotational speed (in the range studied), and the drum diameter have no significant impact on the mean dynamic angle of repose, with averaged values for all speeds of 44.1 $\pm$ 5.4 (experiments) and 46.2 $\pm$ 4.2 (Grains3D), and 44.5 $\pm$ 6.7 (experiments) and 44.8 $\pm$ 6.3 (Grains3D), respectively, for the Drum 1 and Drum 2 configurations. The values

obtained are coherent with the experimental and numerical DEM results reported by Höhner et al. [16] for cubic particles in similar drum configurations (ω = 7.4 RPM, D = 29cm, f =30%, l_p = 16.1mm) who obtained 42.1 ± 2.9 (experiments) and 44.5 ± 2.3 (DEM).

To extend the validation of the model, we examined the avalanching frequency using a fast Fourier transform (FFT) applied to the angle of repose signal over time such as the one presented in Figure 7.8(b). Figure 7.10 shows the discrete Fourier spectrum, with amplitudes averaged over 0.5-Hz intervals for both drum configurations at 2 RPM and 8 RPM (other rotational speeds gave intermediate results between these two limits).

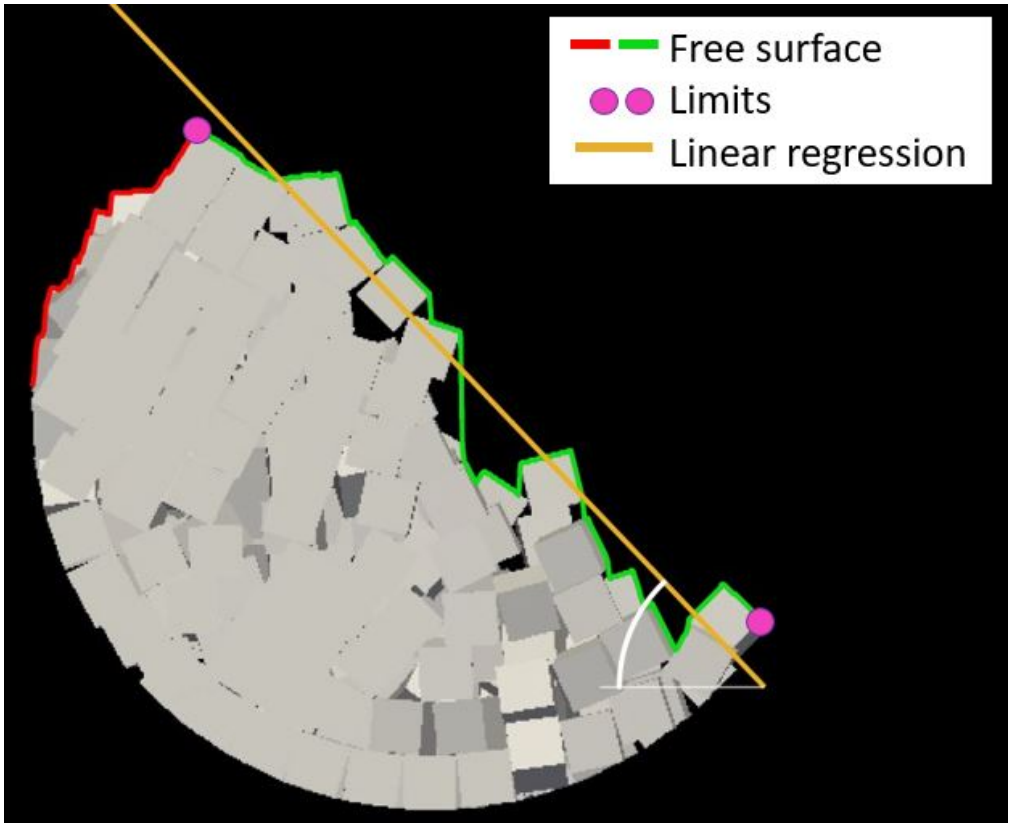
There was good agreement between the experiments and the simulations. As expected, the dominant frequency associated with avalanches depended on the rotational speed for the two drum configurations, with a higher rotational speed leading to a higher frequency of avalanches. Overall, these results confirmed the good predictive capabilities of our DEM simulations for studying the dynamics of non-spherical particles.

7.5 Results and discussion

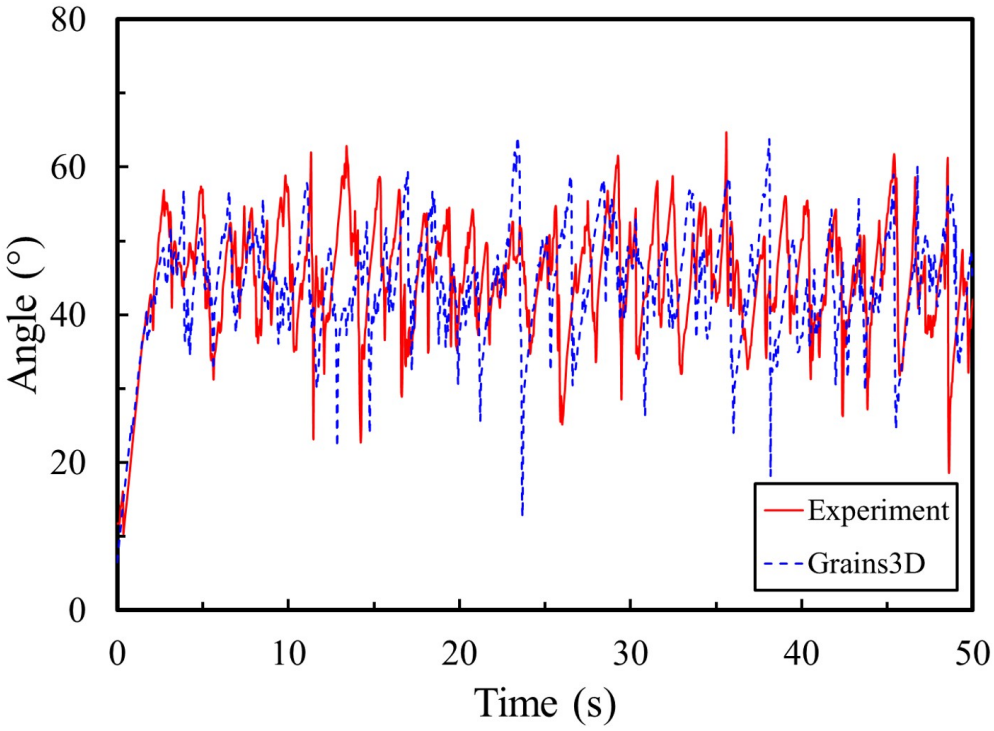
In this section, the granular segregation dynamics in a rotating drum were studied at different rotational speeds with bidisperse blends of spheres, cubes and icosahedra. We first illustrate a typical time evolution for a blend of bidisperse cubes (Section 7.5.1). Then, the analysis is divided into two main sections : the impact of shape on segregation once the pseudo-steady state is reached (Section 7.5.2), and the impact of shape on flow regime transitions in the drum (Section 7.5.3). We quantified the segregation intensity of the three shapes studied using our segregation index, I_{seg}, and we explained the segregation patterns (core, mixed or inverse) formation with the percolation mechanism.

7.5.1 Typical time evolution

As the drum rotates, the particles get rearranged, which translates into a change in I_{seg}. To illustrate the global dynamics, Figure 7.11 shows the evolution over time of 4- and 6-mm cubes rotating in the drum at 25 RPM. At this speed, the cubes get segregated over time. This is confirmed by the increase in I_{seg} over time (Figure 7.11(e)). At 0 second (Figure 7.11(a)), the two types of cubes are relatively well mixed ($I_{seg} = 0.070$). At 5 seconds (Figure 7.11(b)), the particles are carried by the wall in motion, and mixing/segregation starts to take place in the active layer, which is just underneath the free surface, as shown in Figure 7.2. At 20 seconds (Figure 7.11(c)), the small cubes are more concentrated in the core of the bed. During this time, the I_{seg} for the cubes increases with the number of rotations, confirming that

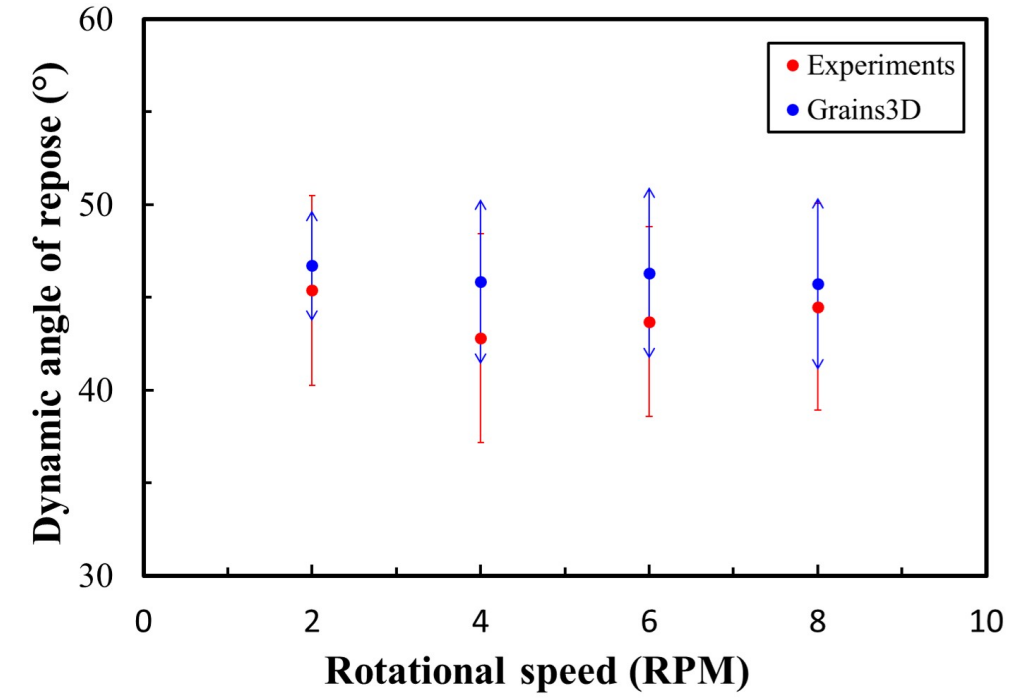


(a)

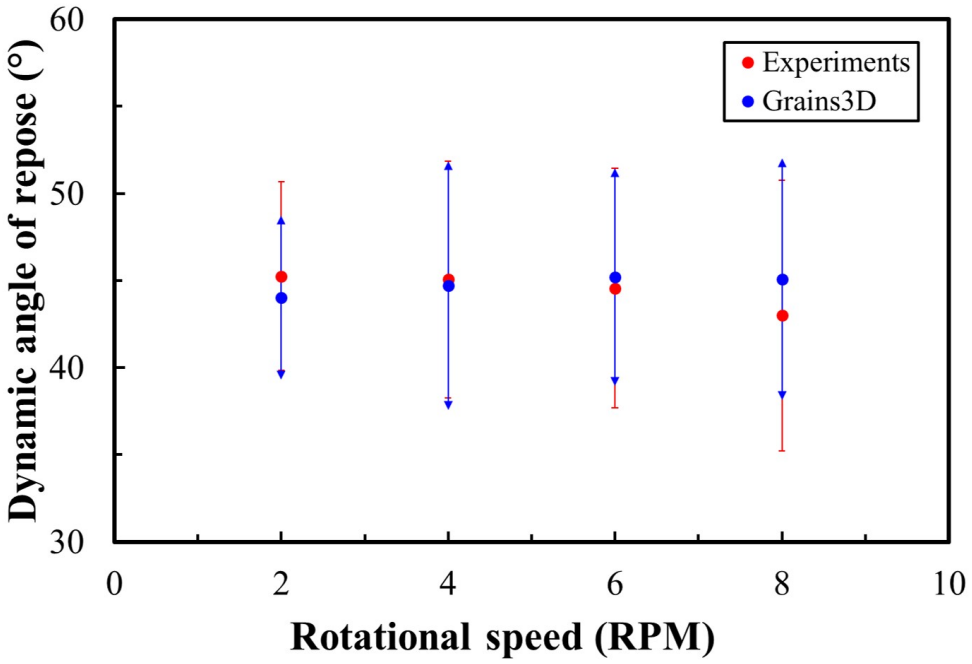


(b)

Figure 7.8 The dynamic angle of repose is calculated using image analysis (a) and is plotted over time (b).

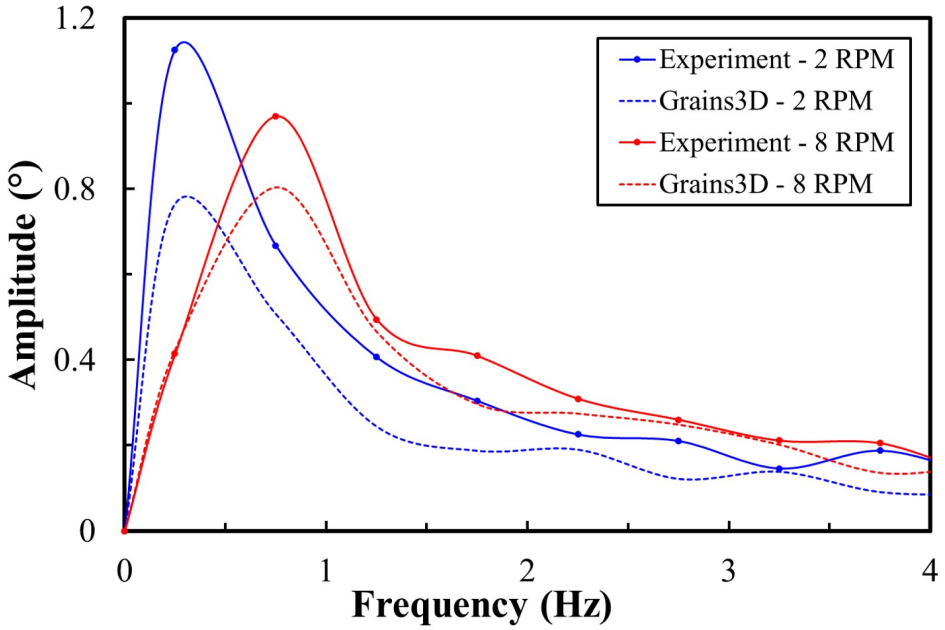


(a)

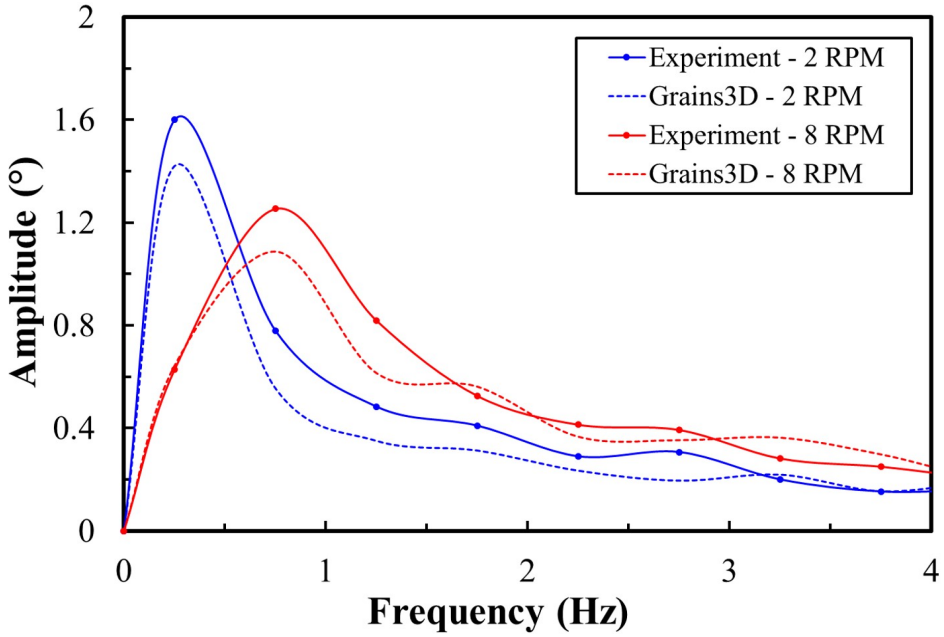


(b)

Figure 7.9 There is good agreement between the experiments and the simulations according to the mean dynamic angle of repose at pseudo-steady state for both the Drum 1 (a) and Drum 2 (b) configurations. The error bars represent the standard deviation around the mean value over time.



(a)



(b)

Figure 7.10 Discrete Fourier spectrum of the angle of repose signal over time for the Drum 1 (a) and Drum 2 (b) configurations, with amplitudes averaged over 0.5-Hz frequency intervals.

segregation is occurring and that particles are moving in the drum in a preferred direction that is dependent on their size. As the drum continues to rotate, segregation intensifies, and more and more small cubes migrate toward the middle (Figure 7.11(d)), leading to a small increase and stabilization of the segregation index around a pseudo-steady state value ($I_{seg} = 0.315$) (Figure 7.11(e)).

7.5.2 Effect of particle shape on segregation in the pseudo-steady state

In this section, the effect of particle shape on size segregation in a half-filled drum was studied as a function of rotational drum speed (or dimensionlessly as a function of the Froude number). Based on the literature and our simulations, we confirm that all shapes experience rolling, cascading, cataracting and then centrifuging (see Figure 7.1) as the Froude number increases. Figure 7.12 compares our pseudo-steady state segregation index I_{seg} for bidisperse blends of spheres, cubes and icosahedra with a size ratio of 1.5 (all equivalent in volume) at different rotational speeds ranging from 15 (rolling regime) to 115 RPM (centrifuging regime).

Figure 7.12 shows that the variation in I_{seg} with the Froude number exhibits the same qualitative trend regardless of particle shape. The three curves start at a high I_{seg} value at low rotational speeds (highly segregated), decrease as the rotational speed increases until they reach a minimum, increase toward a local maximum, and then decrease again. Again, the similarity of the curves suggests that the same segregation mechanisms occur for all particle shapes, leading to the same segregation patterns. The local extrema on all three curves represent the operating points at which the particles inside the drum change flow regime, the minimum and maximum being the transitions between cascading and cataracting and between cataracting and centrifuging, respectively. As is well established in the literature for spheres, the segregation pattern obtained for a bidisperse blend of a given size ratio is dependent on the rotational speed of the drum [21,22]. Here, we confirm that a change in the flow regime triggers a change in the segregation pattern (see Figure 7.3) for all three shapes.

Rolling regime In the rolling regime, the percolation mechanism occurs in the active layer of the bed. Indeed, in the active layer, the particles are more in motion and their motion creates space and voids between them. Random collisions between the particles allow the smaller to pass through the voids between the large particles and provide them with a preferential motion direction. Small particles percolate toward the core of the drum until they reach the denser layers of the passive layer. Since the particles in this layer are more compact and are not in relative motion among themselves, the small particles cannot percolate further

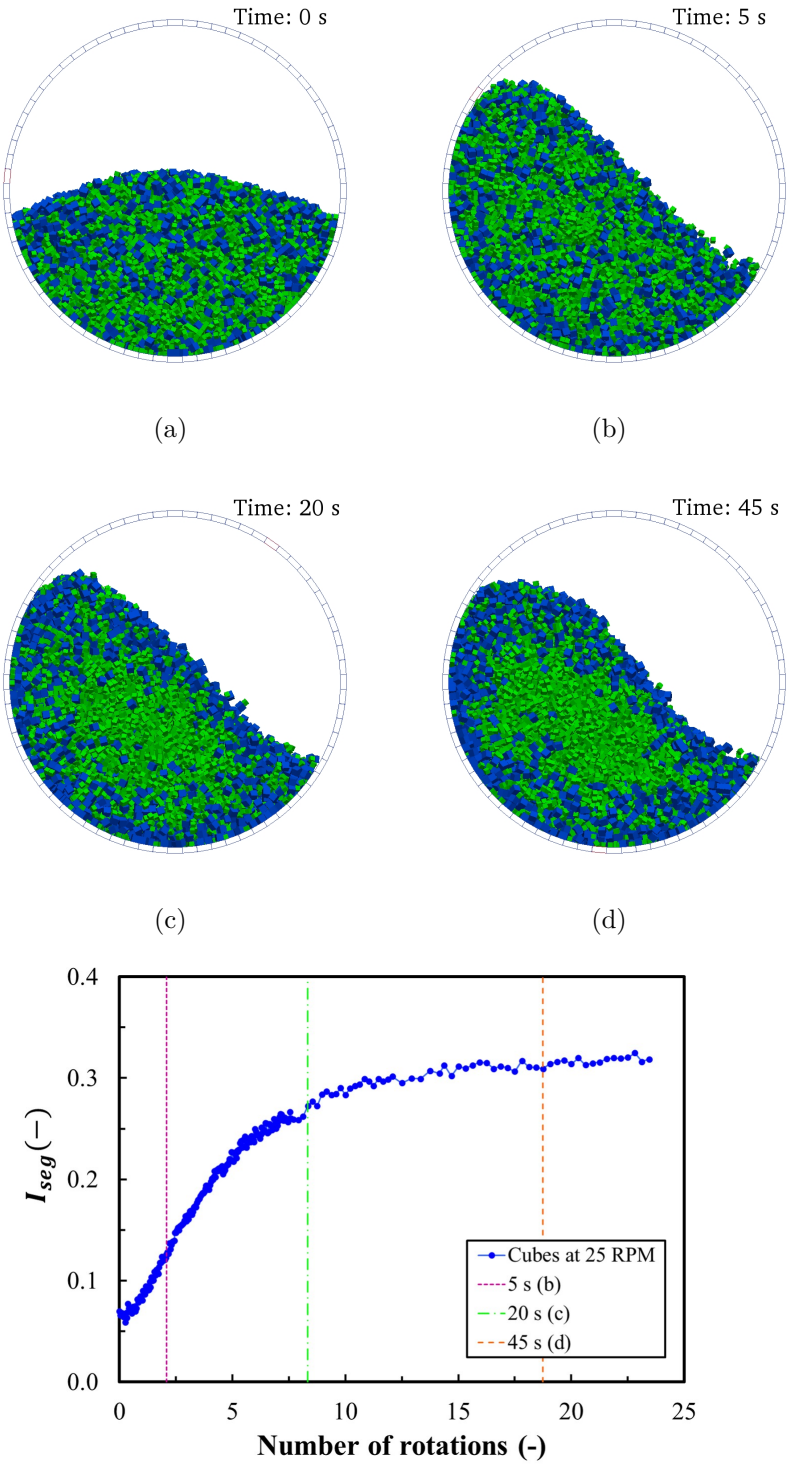


Figure 7.11 The radial core segregation for a blend of 4-mm and 6-mm cubes rotating at 25 RPM intensifies as time goes by and is represented by the increase in the segregation index I_{seg} over time.

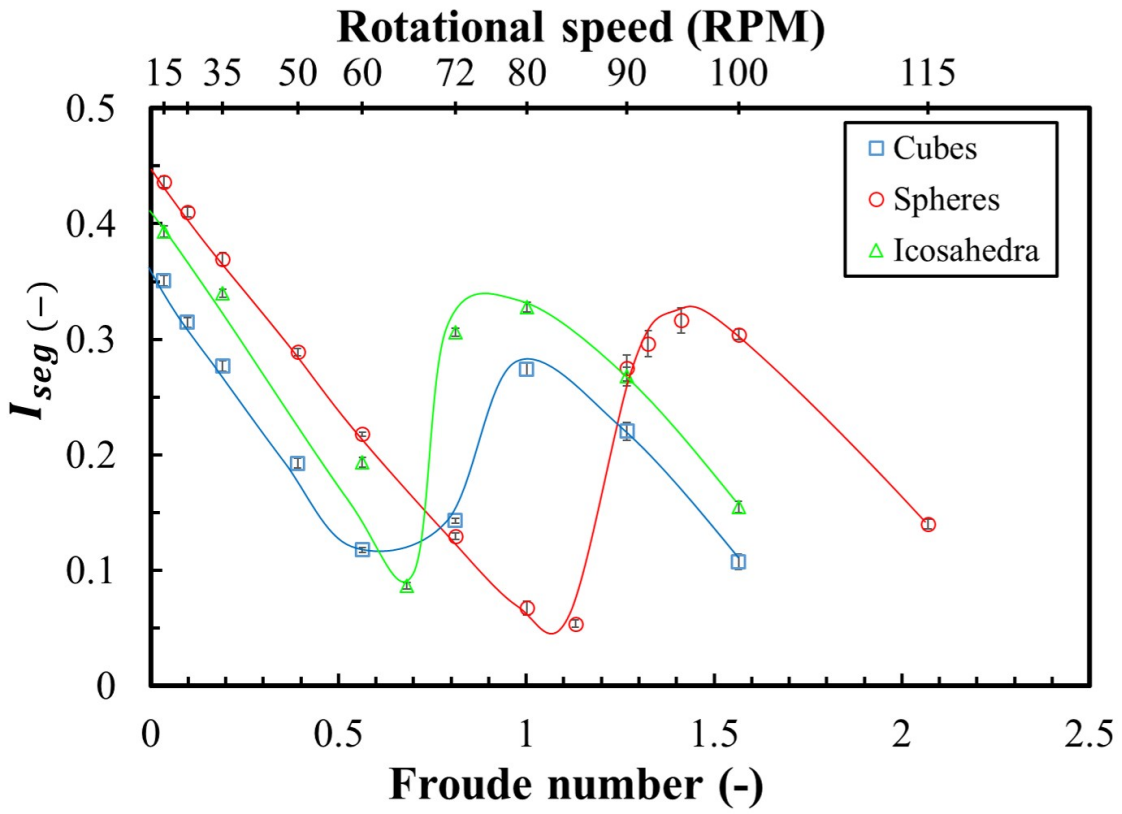


Figure 7.12 The segregation index (I_{seg}) at the pseudo-steady state for a bidisperse blend of cubes, spheres and icosahedra with a size ratio of 1.5 evolves through the same trends with variations in the Froude number. The error bars represent the standard deviation of all the values in the last rotations used to calculate the average value. The lines are a guide for the eye.

and conglomerate in the core of the bed. Figure 7.11 shows that cubes also form a core of smaller particles at 25 RPM, and visual observations of the simulations showed that the three shapes exhibit a core of small particles at lower speeds (before the minimum in Figure 7.12). In this regime, the I_{seg} of all the shapes decreases as the rotational speed increases, until it reaches a minimum corresponding to the cascading regime and a well-mixed system. We thus postulate that the same segregation mechanism as for spheres, i.e. percolation, can be used to explain the classic core segregation of angular shapes. This may seem to contradict Dube et al. [32], who observed an inverse segregation pattern with ellipsoids while spheres exhibited core segregation. However, they used particles with different aspect ratios, whereas we consider angular isometric shapes. Because of the isometric nature of the shapes studied, we can expect the same segregation mechanism to take place in the drum and thus the same segregation pattern, assuming all shapes are in the same flow regime. In other words, if it is known that the mixture of spheres will give a classical core segregation in the rolling regime, it can be expected that an equivalent mixture of cubes or icosahedra will also give a classical core segregation in the same regime.

However, it is interesting to note that the intensity of segregation (absolute value of I_{seg}) is different for all the shapes for a given rotational speed. In the rolling regime, spheres are always more segregated than icosahedra, which are themselves always more segregated than cubes. This confirms our hypothesis that angularity has an impact on segregation. A rounder shape has a higher potential to segregate for a given rotational speed. We explain this using the theory of Arntz et al. [22] who studied segregation in blends of spheres.

As explained by Arntz et al. for spheres [22], a more porous active layer makes the segregation less selective, and thus decreases the RSD value. Indeed, in a more porous active layer, the large particles can percolate just as well as small ones through the larger voids. The percolation is thus less selective. Figure 7.13 shows the porosity of the active layer as a function of the rotational speed of the drum. Figure 7.13 highlights this bed expansion phenomenon and confirms this explanation. There is indeed a strong correlation between the porosity of the active layer and the intensity of the segregation (values beside each data points in Figure 7.13) for both cubes and spheres. We see that both spheres and cubes get linearly less segregated as the rotational speed increases in the rolling/cascading regimes (Figure 7.12). This can now be explained by the gradual increase in the porosity of the active layer (Figure 7.13), reducing the selectivity of the percolation mechanism, for both spheres and cubes. Also, the porosity obtained for cubes is always higher than for spheres, explaining why cubes are less segregated than spheres for a given rotational speed. For example, at 60 RPM, the porosity of the active layer for cubes is of 68.2% versus 51.9% for spheres. The high value explains the very low RSD for cubes and the mixed state. A higher porosity means a lower propensity to

segregation.

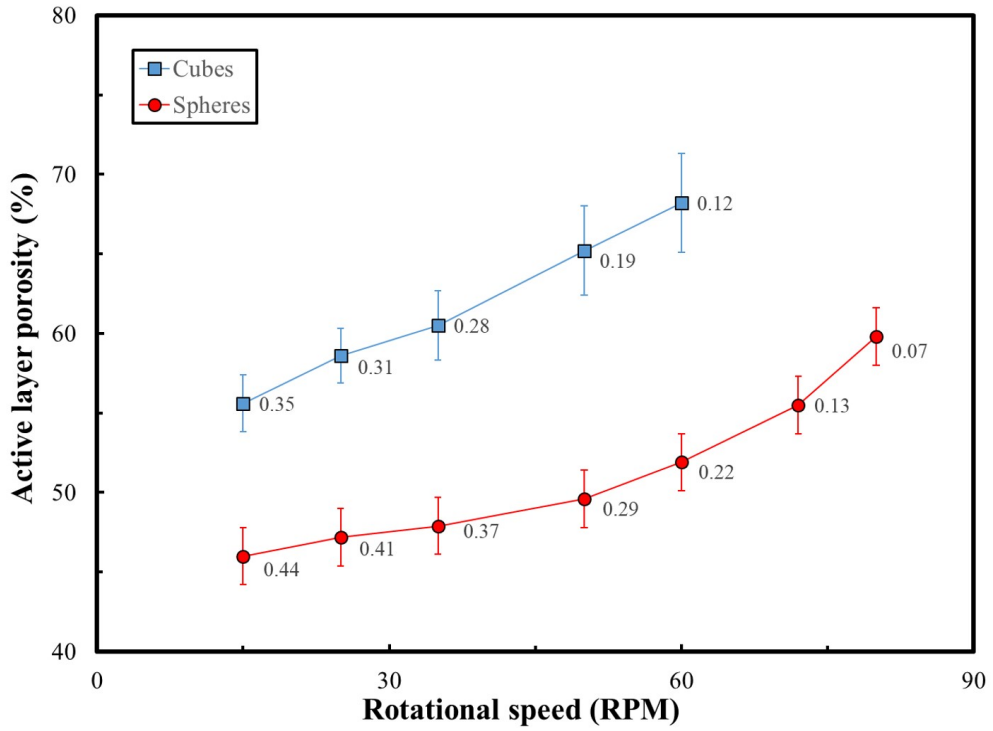


Figure 7.13 Porosity of the active layer for bidisperse systems of cubes and spheres at different rotational speeds in the rolling and cascading regimes. As the rotational speed increases, the porosity of the active layer increases, leading to a less selective segregation. The porosity obtained for cubes is always higher than for spheres, explaining why cubes are less segregated. Values besides each point represent the intensity of the segregation (I_{seg}) of that point. The porosity value is calculated by looking at the volume occupied by particles found in the active layer at $X = 0$.

For this regime, icosahedra data are located between the spheres and the cubes, as expected. This means that the active layer thickness of icosahedra is in between the those of the spheres and the cubes. Thus, the more angular the shape is (sphere $\rightarrow$ icosahedron $\rightarrow$ cube), the more the active layer is porous for a given speed, leading to a lower I_{seg} in the rolling and cascading regimes.

To summarize, the intensity of segregation is related to the efficiency of the percolation mechanism, which is dependent on the porosity of the active layer. Since the active layer of non-spherical particles is more porous than the one with spheres for a given rotational speed (see Figures 7.14(a) and 7.13), the percolation mechanism is less selective, explaining why spheres are always more segregated than icosahedra and cubes in the rolling regime. In addition, spheres reach the most well-mixed system (lowest value of I_{seg}) in the cascading

regime. We will explain why in Section 7.5.3.

Cataracting and centrifuging regimes In the cataracting regime, spheres, cubes and icosahedra all display inverse segregation, with small particles accumulating near the walls. As described by Artnz et al. [22], the same segregation mechanism (percolation) can be used to explain both inverse segregation (cataracting regime) and core segregation (rolling regime). However, the zone where the percolation takes place is different. In the cataracting regime, the percolation mechanism does not take place in the active layer as shown in the rolling regime, but rather in the air in the upper-right section of the drum as particles are tumbled throughout the drum volume. Smaller particles can thus percolate through the voids between large particles and reach the vicinity of the drum wall, whereas large particles stay in the middle. For inverse segregation to occur, particles need to detach from the wall and be projected into the air. The highest state of inverse segregation occurs around 80 RPM for both cubes and icosahedra, and around 95 RPM for spheres. Also, spheres and icosahedra get more segregated than cubes. Lastly, in the centrifuging regime, all shapes undergo inverse segregation, albeit to a lesser extent than in the cataracting regime because the particles do not have the time to rearrange and because more layers of particles are stationary at the drum wall. As in the rolling regime, for a given rotational speed, spheres are still more segregated than icosahedra, which in turn are more segregated than cubes. We explain this with the fact that, for a given rotational speed, a larger fraction of angular shape particles is centrifuging than spherical particles (see Figures 7.14(d) and Table 7.7), thus decreasing I_{seg}.

We consider that a particle is centrifuging when its translational velocity is aligned with a solid body motion following the drum wall tangential velocity. Table 7.7 shows the results for the three shapes studied at high rotational speeds. We can see that at 90 RPM, some cubes are already centrifuging whereas spheres are not. Spheres are still rolling and slipping at the wall. On the other side, an annulus having a thickness equivalent to 23% of the drum radius is filled with cubic particles that are stacked and stationary with respect to the drum wall. No movement or rearrangement can be created there. Thus, particles remain in their original configuration, which is well mixed. This corresponds to 91.4% of the total number of particles. The difference in I_{seg} between spheres and cubes at 90 RPM and at higher rotational speed (100 RPM) is then related to the fraction of particles centrifuging in the drum reported in Table 7.7. Cubes enter the centrifuging regime before spheres because they transfer the energy from the walls more efficiently (less rolling and less slipping). This gives a lower intensity for inverse segregation of cubes at 90 and 100 RPM. The same reason explains why cubic particles start to cataract before spheres (we will get into more details about the

flow regime transitions in Section 7.5.3). At 100 RPM, 96.1% of the cubes are centrifuging, versus 66.4% for spheres. That is why we see a large difference in the I_{seg} shown in Figure 7.12. The same logic applies for icosahedral particles.

Another important point to note is that the transitions between the flow regimes (the minimum and the maximum) occur at different Froude numbers for all the shapes studied (Figure 7.12). The angularity of the shape thus has a clear impact on the intensity of segregation as well as on the flow regime transitions. These transitions are very important to know in any process in order to predict the best operating conditions for reaching a specific flow regime and this is why we study them more in the following section. Also, since the local extrema in Figure 7.12 represent these transitions, we think that our segregation index could be a good metric to characterize the flow regimes for all shapes and to compare them.

7.5.3 Effect of particle shape on flow regime transitions

As already noted in the literature [34, 35, 37], monodisperse non-spherical particles exhibit flow transitions at different speeds than their spherical counterparts. We observed the same difference between the bidisperse blends of spherical and angular shapes. Since the flow regime is the main parameter that defines the segregation pattern, it is important to take a closer look at these regime transitions. We mainly focused on cubes and spheres for this analysis. Figure 7.14 shows that these two shapes experience flow transitions at different rotational speeds. Indeed, noticeable differences can be seen with a simple visual observation of the flows of cubes and spheres at the same rotational speeds. At 25 RPM, cubes have a larger angle of repose (38.9°) than spheres (32.4°). Also, cubes start to display an S-shape free surface, characteristics to the cascading regime, whereas spheres retain a very flat free surface. This behavior was also observed by He et al. [35], although they did not provide a detailed explanation of it. At 80 RPM (Fr = 1), the differences in the flow patterns are even more pronounced. Spheres are still in the cascading regime when cubes have already reached the cataracting regime and have even started centrifuging. Indeed, cubes fly through

Tableau 7.7 Fraction of particles centrifuging at high rotational speeds. The more there are particles centrifuging, the lower is I_{seg} for the three shapes.

	Spheres (%)	**Cubes** (%)	**Icosahedra** (%)
80 RPM	0	80.6	43.5
90 RPM	0	91.4	89.0
100 RPM	66.4	96.1	96.4
115 RPM	94.6	not simulated	not simulated

the drum and occupy the entire drum space when the spheres are still flowing along the free surface in cascades. At 100 RPM, most of the cubes are centrifuging whereas many spheres have still not begun centrifuging, confirming the results of Gui et al. [37]. Two mechanisms can explain the strong impact of shape on the flow regime, i.e. slip at the wall and energy transfer through particle-particle interactions.

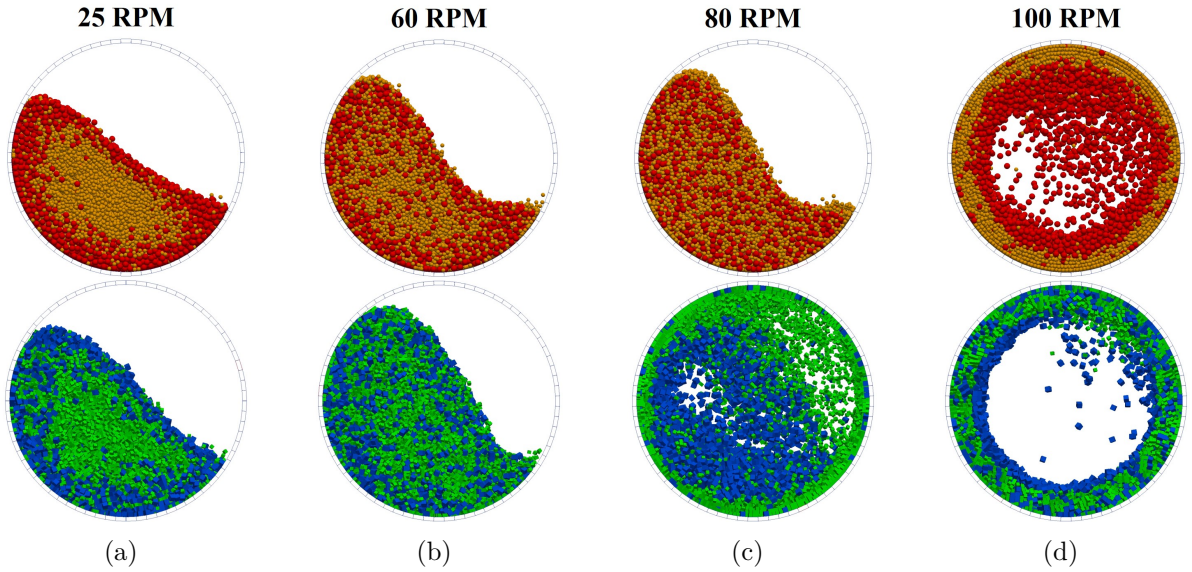


Figure 7.14 The transitions from cascading to cataracting and from cataracting to centrifuging occur at a lower rotational speed for cubes (bottom) than for spheres (top).

Slip at the wall

The motion of any bed of particles in a rotating drum is induced by friction with the rotating wall. The impact of friction with the wall on the motion of monodisperse cubes in a drum was studied by Gui et al. [37] and was compared to the impact on spheres. They defined two main modes of driving motion. The primary mode represents the case where particles are in contact with a frictional wall and are driven directly by its motion. The secondary mode occurs with smooth walls where the motion of particles is driven by particle-particle interactions. They found that the primary mode is more efficient than the secondary mode in entraining particles. Here, we determined the average velocity of particles close to the wall in order to compare the primary mode of driving motion of spheres and cubes. We calculated a dimensionless mean velocity at the wall ($\overline{v_w}$) defined as the mean translational velocity of the particles located within a distance of two large cubes (or two large spheres) from the wall divided by the tangential velocity of the drum :

$$\overline{v_w} = \left(\frac{\frac{1}{j} \sum_{i=1}^{j} ||\mathbf{v_i}||}{||\boldsymbol{\omega}|| \, R} \right) \tag{7.12}$$

where j is the number of particles located within two sizes of the largest particle dimension (diameter for spheres and side length for cubes) of the wall.

Figure 7.15 shows that, for a rotational speed of 80 RPM, cubes possess a higher translational velocity than spheres in the vicinity of the wall. Indeed, the dimensionless mean particle velocity calculated here is close to 1 for cubes, meaning that they travel at the same speed as the drum. Conversely, the dimensionless mean velocity of spheres located within a diameter of two large spheres from the wall stabilizes at a much lower ratio, meaning that spheres slide and roll more on the wall than cubes. Since cubes have a higher number of contact points with the wall than the spheres (theoretically corners and edges versus one single contact point), they are more easily dragged by the motion of the drum. This impact of the particle-wall contact points was also suggested by Santos et al. [38], who observed that the flow regime in a drum of rice grains is different from that of spheres. We can thus conclude here that cubes are more efficient than spheres at transferring energy from the rotating wall into the flow, which would explain the earlier changes in the flow regime.

Energy transfer through particle-particle interactions

Once the motion of particles touching the wall is being driven by friction, the energy can be transferred to the other particles through particle-particle interactions. This is equivalent to the secondary driving mode defined by Gui et al. [37], who studied monodisperse systems. Our assumption, which was different from that of Gui et al. [37], was that the ability of any shape of particle to transfer motion through collisions depends on their ability to rotate in a dense system. Indeed, when two particles collide, the total energy of collision is conserved. Part is dissipated as heat or deformation, which is taken into account in DEM models by the coefficient of restitution, and the remaining part is converted into translation and rotation. To get a better understanding of how energy is transferred in the drum at different rotational speeds, we compared the total translational and rotational kinetic energies of spheres, cubes and icosahedra in Figure 7.16.

The translational kinetic energies of the cubes and icosahedra are higher than that of the spheres for all the speeds studied (Figure 7.16(a)). Similar results were obtained by Gui et al. [171], who reported that tetrahedra were harder to rotate than spheres, leading to higher translational velocities and lower rotational velocities. In our case, at 80 RPM, the difference

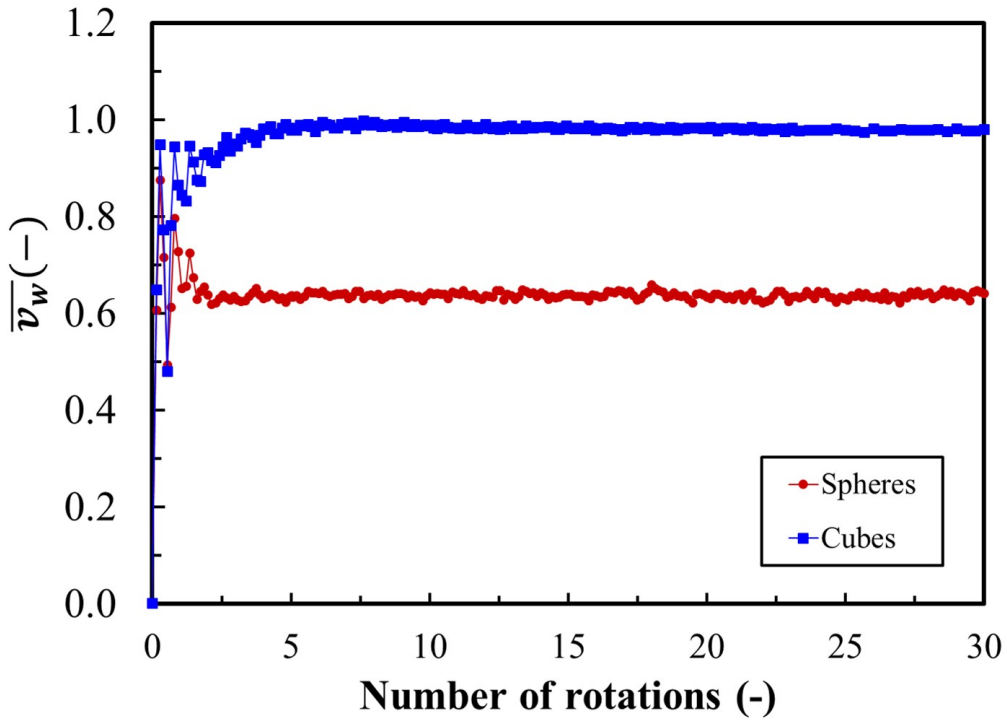
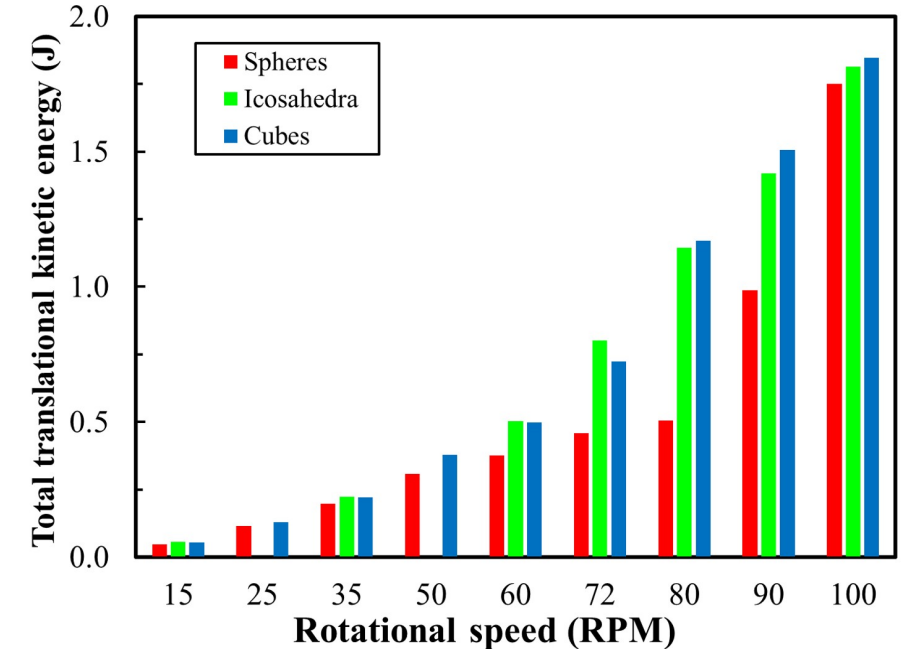
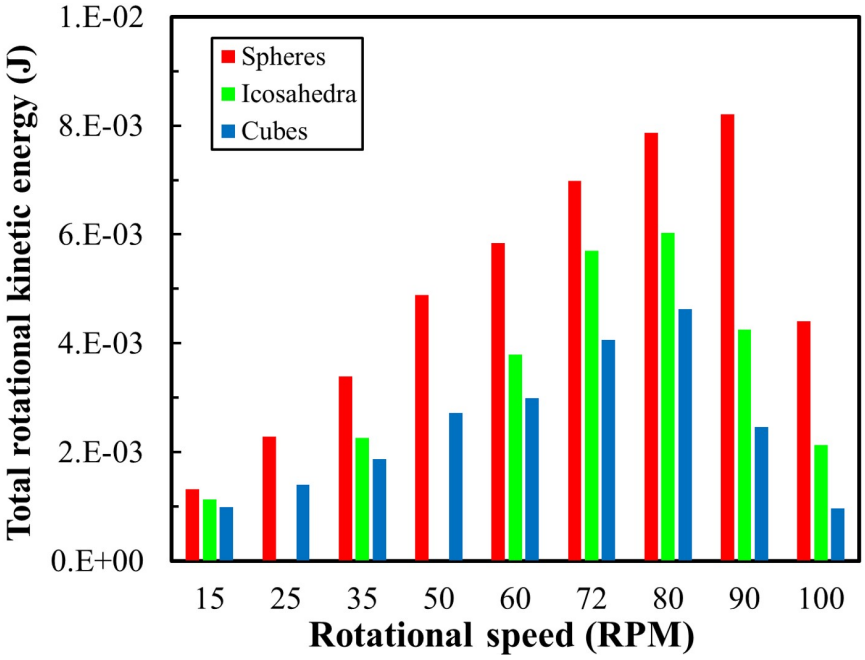


Figure 7.15 At 80 RPM, cubes near the wall travel at the same speed as the drum whereas spheres travel significantly slower according to the dimensionless translational mean velocity of the particles.



(a)



(b)

Figure 7.16 Because of their angularity, cubes and icosahedra have a higher total translational kinetic energy and a lower total rotational kinetic energy than spheres for all the speeds studied. Note that not all speeds were simulated for icosahedra, which explains the absence of some green bars.

between spheres and angular shapes (cubes and icosahedra) is larger than for all the other speeds tested. That can be explained by the fact that when spheres are still cascading, cubes and icosahedra are cataracting. A higher translational kinetic energy translates into a higher translational velocity for angular shapes, allowing them to fly through the drum space in a cataracting motion. It should also be noted that rotational kinetic energy is always higher for icosahedra than for cubes, and higher for spheres than for icosahedra (Figure 7.16(b)), meaning that rounder shapes always have a higher propensity to spin and that they transfer a higher proportion of their collision energy to rotation than cubes, which extends their cascading regime to higher drum rotational speeds. This explains why spheres reach a very low I_{seg} value before beginning inverse segregation (see Figure 7.12). The same logic explains why spheres and icosahedra reach a high I_{seg} value in inverse segregation before starting to centrifuge. For cubes, rotation is impeded by their angular shape (corners and sharp edges) and by surrounding cubes. This explains why cubes have larger translational velocities than spheres after each collision and why spheres have a higher spinning. It also confirms the findings of Rakotonirina et al. [34], who reported that angular particles start centrifuging earlier than spheres.

We performed an additional set of simulations with a larger rolling resistance coefficient to examine the importance of sphere rotation. Figure 7.17 shows that it is possible to force spheres to start cataracting at 80 RPM by increasing their rolling friction coefficient, which increases their translational velocity and thus translation kinetic energy. However, even with a $\mu_r = 1$ (Figure 7.17(g)), which is 20 [85] to 1,000 [164] times higher than typical values for glass spheres, we can see that the flow of spheres still does not occupy the whole space of the drum like the cubes (Figure 7.17(h)). Figure 7.17 thus shows that impeding spheres from rotating allows them to transfer the collision energy more efficiently to translational velocity, but it does not allow them to adhere to the drum wall and display a well-developed cataracting regime at 80 RPM.

This is in agreement with the conclusion of Wensrich and Katterfeld [77], who stated that the rolling friction coefficient alone is not enough to imitate the behavior of non-spherical particles. However, increasing this parameter allowed the flow of spheres to approach the flow of cubes, without imitating it completely. This may be explained by a lower number of contact points with the drum for spheres than for cubes. It is worth recalling here that the rolling resistance coefficient is applied to spheres in DEM to avoid an artificially high angular velocity and is there to take into account that spherical particles are never perfectly spherical in real life. This parameter is thus not mandatory for cubes, because our code actually models the real shape of the particle.

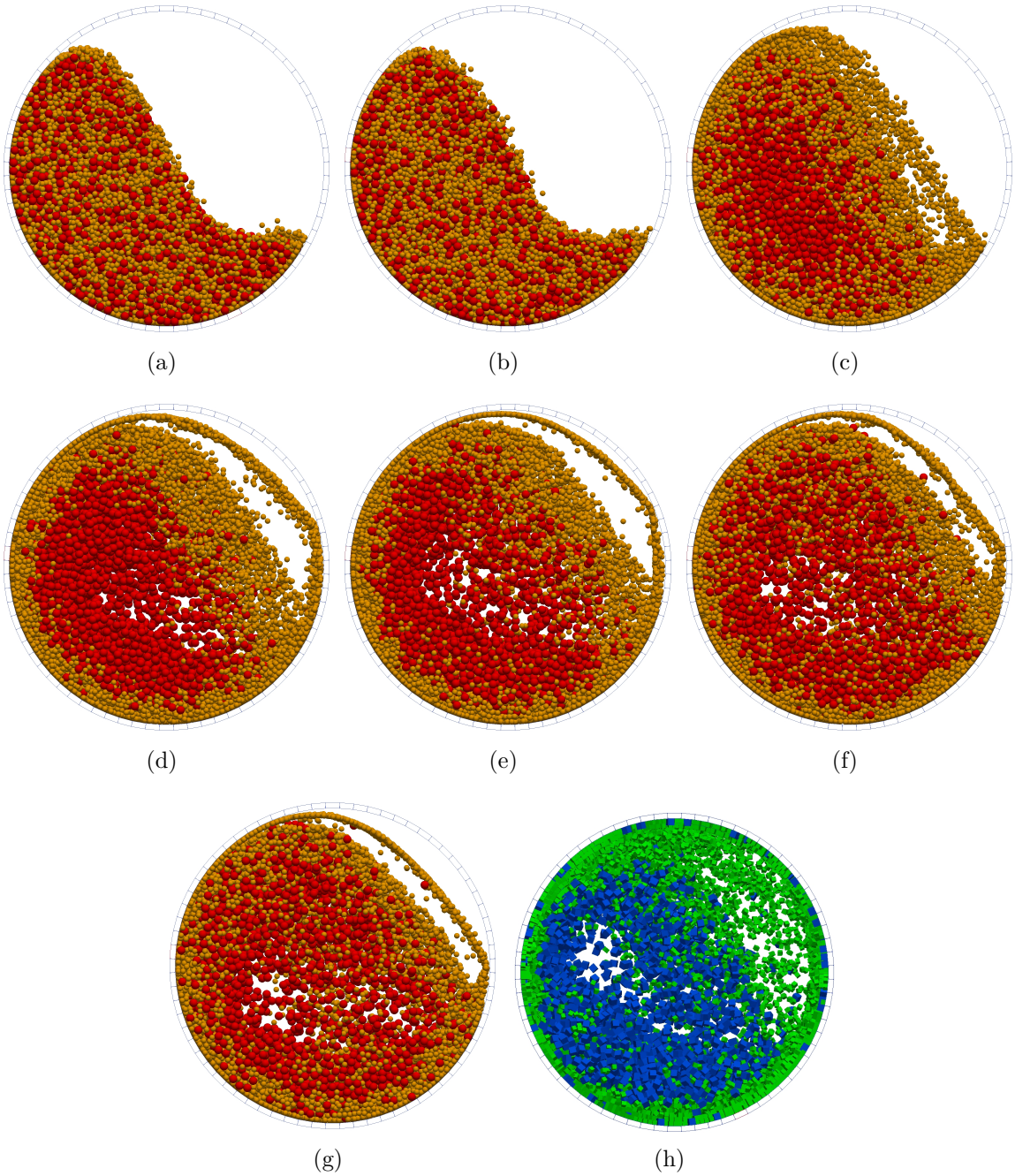


Figure 7.17 Comparison of the flow patterns of spheres at 80 RPM, with μ_r =0 (a) 0.001, (b) 0.05, (c) 0.1, (d) 0.25, (e) 0.5, (f), 1 (g), and cubes (h).

Apparent Froude number

In light of the above and knowing the importance of the translational kinetic energy of the particles inside the drum for determining the flow regime, we introduced an apparent Froude number defined as :

$$Fr_{app} = \frac{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \, ||\boldsymbol{v_i}^2||}{m_{tot} \, ||\boldsymbol{g}|| \, R} \tag{7.13}$$

where N, m_i, $\boldsymbol{v_i}$ and m_{tot} are, respectively, the total number of particles in the system, the mass of particle i, the velocity of particle i and the total mass of particles. The main difference between our definition and the classic definition of the Froude number (Equation 7.1) is that we use the actual velocity of each particle instead of the rotational speed of the drum. A similar Froude number was already used by Gui et al. [37] to study the impact of the friction of the walls on the motion of cubic particles in a drum.

Figure 7.18 shows the segregation indexes at a pseudo-steady state of all the cases studied versus the apparent Froude number. As can be seen, the transitions now occur at the same values of Fr_{app}, i.e., ≈ 0.20 for cascading to cataracting and ≈ 0.35 for cataracting to centrifuging. Hence transitions between flow regimes depend on a translational energy threshold inside the drum. An optimal energy level at $Fr_{app} \approx 0.20$ also exists, where particles of all shapes are well mixed just before inverse segregation starts. Segregation intensity remains dependent on particle shape, but the transitions are independent of particle shape when characterized with Fr_{app}. This confirms the importance of the mechanisms pointed out in Sections 7.5.3 and 7.5.3. The apparent Froude number allows us to better understand the impact of the shape on the flow regime transitions in rotating drums. It shows that the impact of the shape is mainly felt in the ability of each particle to transfer translational energy from the wall to the particle bulk. However, for the same total kinetic energy transferred from the drum to particles, all three shapes exhibit a similar flow regime. To the authors' knowledge, no previous work has ever used this apparent Froude number to delimit the flow regime transitions for non-spherical particles.

7.6 Conclusions

The radial segregation of bidisperse spherical, cubic and icosahedral particle blends was numerically investigated to determine the impact of the angularity of convex particles inside a rotating drum. A wide range of rotational speeds was studied, ranging from the rolling to the

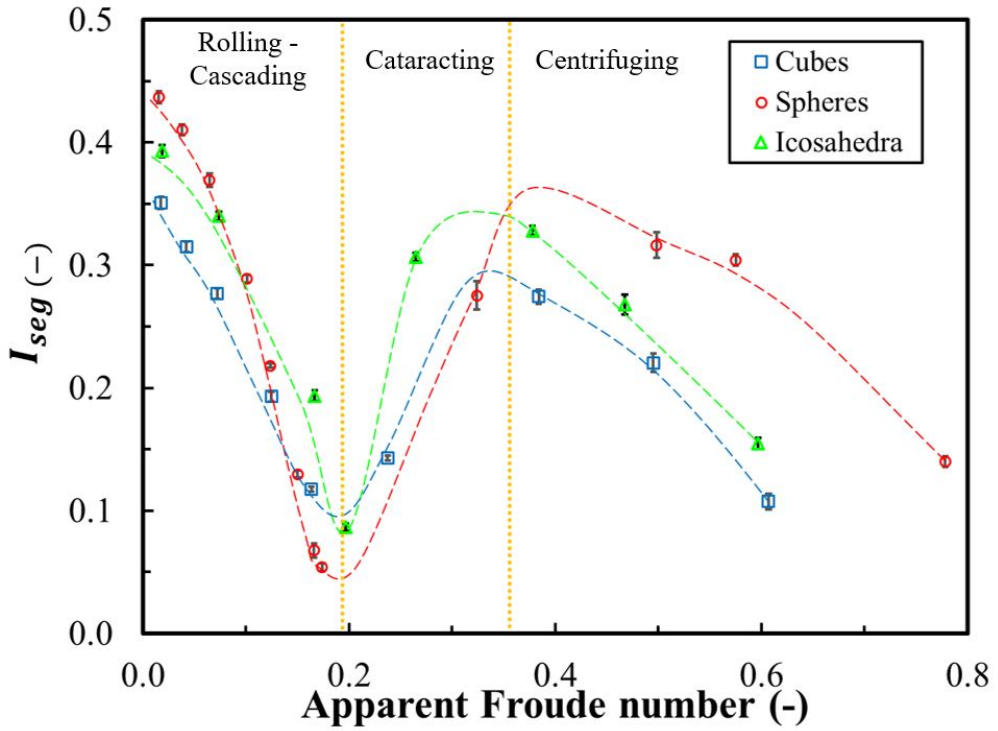


Figure 7.18 The apparent Froude number reconciles the transitions between the flow regimes according to the segregation index (I_{seg}) at pseudo-steady state for a bidisperse blend of spheres, cubes and icosahedra with a size ratio of 1.5. The error bars represent the standard deviation on all the values in the last rotations used to calculate the average value. The lines are a guide for the eye.

centrifuging regime. Different segregation patterns were found throughout these regimes. We used DEM and a proprietary code, Grains3D, to simulate the flow of particles in the rotating drum. Knowing the particle positions, and the linear and angular velocities, we determined the segregation index (I_{seg}), the velocity profile and the distribution of the rotational and translational kinetic energies. A detailed analysis of these various metrics led to the following findings :

- Size segregation intensity at pseudo-steady state varied nonlinearly as a function of the Froude number, and all the particle shapes studied displayed the same global trends, but shifted to lower Froude numbers as shape angularity is increased. To the authors' knowledge, this has never been shown before.
- The segregation pattern was mostly dependent on the flow regime, which in turn depended on the shape of the particles at a given rotational speed.
- In the rolling regime (core segregation), spheres were always more segregated than icosahedra which in turn were more segregated than cubes at a given rotational speed, because their active layer was less porous.
- In the cataracting and centrifuging regimes (inverse segregation), spheres were always more segregated than icosahedra which in turn were more segregated than cubes at a given rotational speed, because the fraction of stationary particles at the wall was lower for spheres.
- The cascading-cataracting and cataracting-centrifuging regime transitions occurred at lower Froude numbers as the particle angularity increased. Indeed, the greater number of contacts with the wall enabled angular shapes to transfer the energy from the rotating drum more efficiently. In addition, most of the kinetic energy released after collisions between angular particles was converted into particle translation rather than into particle spinning, leading to the projection of particles through the entire drum and a transition to cataracting at a lower Froude number. As a consequence, inverse segregation took place at lower Froude numbers for cubes and icosahedra.
- Increasing the rolling friction coefficient in a simulation with spheres made the flow of particles approaching the behavior of cubes, without imitating it completely.
- An apparent Froude number that takes the translational velocity of every particle into account rather than the global drum rotational speed is used to confirm the mechanisms of flow regime transitions for spherical, cubic and icosahedral particles. For the first time, this apparent Froude number is also used to reconcile segregation index data for all the shapes studied in such a way that regime transitions occur at the same values regardless of the particle shape. $Fr_{app} \approx 0.20$ and $Fr_{app} \approx 0.35$ represent cascading-cataracting and cataracting-centrifuging regime transitions, respectively. These changes of regime corres-

pond to local extrema in the I_{seg} graph.

A size ratio of 1.5 was used to avoid spontaneous percolation in the unmoving layer and to limit the study to percolation in the active layer (sieving). Despite the fact that segregation depends on size ratio, it is expected that the same conclusions would be obtained for other size ratios where sieving is still the dominant segregation mechanism (i.e. for all ratios below 3 approximately). This assumption would need to be confirmed and would require further investigations. Although we found that I_{seg} for all shapes can be reconciled using an apparent Froude number, there is no straightforward way to calculate a priori this dimensionless number from the operating conditions without knowing the individual particle velocities. This justified the use of numerical methods. However, this dimensionless number highlights the particle-shape related mechanisms that trigger the transitions in flow regimes and segregation patterns in a rotating drum. Also, the relationship of I_{seg} as a function of the Froude number for spheres can still be used to determine the upper limits of rotational speed that trigger flow regime transitions and to predict the segregation pattern for any non-spherical convex particle.

7.7 Acknowledgments

The authors thank Calcul Quebec, Compute Canada, and the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada for computational resources and funding. The authors also gratefully acknowledge financial support from the Simulation-based Engineering Science (Genie Par la Simulation) program funded through the CREATE program of the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada. Special thanks to Prof. Balmforth (UBC) for the use of the rotating drum and to Dr. Daniel Rakotonirina for introducing and helping understand Grains3D, even remotely.

Nomenclature

D : drum diameter (m)
d_p : particle diameter (sphere) (m)
e_n : coefficient of restitution (-)
f : drum filling degree (%)
$\mathbf{F_{c,ij}}$: contact force between particles i and j (N)
$\mathbf{F_{nc,ik}}$: non-contact force between particles i and k (N)
$\mathbf{F_{g,i}}$: gravitational force acting on particle i (N)
$\mathbf{F_{i,f}}$: interaction force between particle i and a fluid f (N)
$\mathbf{F_{c,iw}}$: contact force between particles i and the wall (N)
Fr : Froude number (-)
Fr_{app} : apparent Froude number (-)
$\boldsymbol{g}$: gravitational acceleration (9.81 m/s^2)
h : active layer thickness (m)
I_i : inertia of particle i ($kg \cdot m^2$)
I_{seg} : segregation index (-)
k_n : numerical stiffness (Pa.m)
L : drum length (m)
l_p : cube or icosahedron edge length (m)
m_i : mass of particle i
N : total number of particles in the system (-)
r : particle radius (sphere) (m)
R : drum radius (m)
$\boldsymbol{R_j}$: vector pointing between the center of mass of particle i and the contact point with particle j (m)
$\boldsymbol{R_w}$: vector pointing between the center of mass of particle i and the contact point with the wall (m)
t : time (s)
T_C : contact duration (s)
$\boldsymbol{T_{ij}}$: torque calculated between particles i and j in contact ($N \cdot m$)
$\mathbf{v_i}$: translational total velocity of particle i (m/s)
V_{cell} : volume of the cell (m^3)
$V_{p,cell}$: volume occupied by particles in the cell (m^3)
$\overline{v_w}$: dimensionless mean velocity at the wall (m/s)
x : mass concentration (kg/kg)

Greek letters

Δt : time step (s)

θ : dynamic angle of repose (°)

λ_i : weighting coefficient (-)

μ_C : sliding friction coefficient (-)

μ_r : rolling friction coefficient (-)

ρ : density (kg/m^3)

σ : standard deviation (kg/kg)

$\boldsymbol{\omega}$: rotational speed of the drum ($\frac{rad}{s}$)

$\boldsymbol{\omega_i}$: angular velocity of particle i ($\frac{rad}{s}$)

CHAPITRE 8 DISCUSSION GÉNÉRALE

L'objectif de cette thèse était de **quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans un lit rotatif**. Afin de répondre à cet objectif, nous avons opté pour la voie de la simulation numérique, qui connaît un fort essor dans le domaine des matériaux granulaires depuis quelques années étant donné qu'elle permet de bien cibler le caractère discret des matériaux granulaires, notamment grâce à la méthode de modélisation de la DEM (*Discrete Element Method*). Alors que cette méthode est bien éprouvée et utilisée à ce jour, les modèles pour représenter le transfert thermique dans les matériaux granulaires sont beaucoup plus récents. Pour atteindre notre objectif général, nous avons rencontré plusieurs surprises et avons relevé plusieurs défis. Nous tenterons dans la section suivante de faire un survol des trois articles présentés en discutant des défis qu'ils ont représentés et en soulignant les liens entre chacun.

Le **premier article** (Chapitre 5) nous a permis de solidifier nos connaissances sur les modèles de transfert de chaleur existants dans la littérature. L'idée initiale au début de ce projet était de traiter le transfert de chaleur en utilisant directement les modèles de TDEM existants. Les expériences de validation en monodisperse présentées dans l'Article 1 n'avaient été prévues à la base que pour s'assurer que ces modèles représentaient bien la réalité. Cependant, comme nous l'avons vu, en utilisant des billes de verre, d'acier inoxydable et d'aluminium (les alliages 7A03 et 1100) dans nos expériences, nous nous sommes rendu compte que les modèles existants, et même les corrélations énoncées dans la littérature, fonctionnaient plutôt bien pour les billes de verre et d'acier, mais n'arrivaient pas à reproduire les données obtenues avec les billes d'aluminium. Après nous être acharnés sur le montage expérimental, avoir refait les expériences plusieurs fois, avoir douté du fournisseur [1], nous avons dû nous rendre à l'évidence que quelque chose nous échappait. Ces tests nous ont donc amenés à revisiter la littérature, particulièrement à la recherche de davantage de données expérimentales à des valeurs de κ élevées. Cette revue plus poussée s'est révélée fort intéressante et a complètement réenligné les objectifs du premier article de cette thèse. Nous avons trouvé que la rugosité de la particule, paramètre très souvent négligé dans les modèles existants, jouait un rôle significatif dans le transfert de chaleur, particulièrement pour les particules à haute conductivité thermique, comme c'est le cas de l'aluminium. Dans cet article, nous avons ainsi développé un nouveau modèle de TDEM plus universel et considérant la rugosité qui permet de (1) modéliser le transfert de chaleur pour des particules avec une gamme de valeurs de κ

1. et pour ma part, m'être insurgée contre la Science qui ne fonctionnait jamais

beaucoup plus large, à condition de connaître les propriétés de surface de ces particules, (2) expliquer le transfert de chaleur au niveau du contact entre deux particules, (3) réconcilier plusieurs données expérimentales de la littérature avec les modèles de TDEM existants en expliquant la variabilité des résultats à hautes valeurs de κ et (4) se renseigner facilement sur la contribution de chaque mécanisme selon la nature des particules solides et du fluide en jeu. Grâce à ce modèle, nous avons pu générer numériquement plusieurs données de conductivité thermique effective pour différents lits de particules (Figure 5.14). Nous tentons présentement de regrouper ces données numériques obtenues sur une seule courbe maîtresse permettant de prédire la conductivité effective en fonction de la rugosité et du diamètre (travail en cours).

Ainsi, une fois que nous avons développé un modèle de TDEM prédictif et validé de transfert de chaleur satisfaisant en monodisperse (Article 1), nous avons pu étendre ce modèle vers le bidisperse, dans le but de nous attaquer aux phénomènes de ségrégation dans un lit rotatif. C'est ce que nous avons fait dans **l'Article 2** (Chapitre 6). Étant donné que la littérature en milieu bidisperse était très limitée, nous avons réutilisé notre montage expérimental conçu dans le cadre du premier article pour faire une expérience en bidisperse. Cette expérience avait comme but premier de déterminer quelles modifications devaient être effectuées au modèle pour qu'il représente des milieux bidisperses. En effet, nous avions des interrogations à savoir quelle définition de rayon équivalent devait être utilisée pour le calcul du transfert de chaleur dans la partie gazeuse. Nous n'avons pas trouvé de réponse à cette question dans la littérature et c'est pourquoi nous avons testé différentes définitions de rayons équivalents numériquement pour comparer les résultats avec nos propres expériences. Pour ces dernières, nous avons réutilisé les billes dont la caractérisation de surface avait été obtenue pour l'Article 1. Notre test en bidisperse nous a permis de déterminer que le rayon harmonique était le plus approprié pour calculer le transfert de chaleur dans un lit de particules bidisperses. Ce rayon équivalent permet en effet de représenter parfaitement l'élévation de température dans un lit de particules à trois hauteurs différentes, ce qui n'était pas le cas pour les autres définitions de rayon.

Notre modèle de TDEM a ensuite été utilisé pour étudier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans différents lits de particules ségréguées. Dans cet article, nous avons décidé de séparer la dynamique de la thermique. Nous ne répondons donc pas à la problématique entière du transfert de chaleur couplé au mouvement des particules. La principale raison pour laquelle nous avons choisi d'effectuer notre analyse thermique en statique est que notre modèle de TDEM n'avait toujours pas été validé en dynamique. Considérant les surprises et le comportement très non linéaire du transfert de chaleur dans les matériaux granulaires, nous pensions que sauter des étapes et nous lancer dans la modélisation du transfert thermique en mouvement sans validation n'aurait pas représenté une démarche scientifique

rigoureuse.

Dans l'Article 2, nous montrons que l'intensité de ségrégation d'un lit de particules a un effet marqué sur les profils de température, sur l'uniformité de température, sur les temps de chauffage et sur le coefficient de transfert de chaleur effectif dans le four, et ce, pour une fraction volumique de petites particules aussi faible que 20%. La dernière figure de l'Article 2 (Figure 6.14) démontre que l'intensité de ségrégation d'un lit de particules, qui modifie le réseau de contacts entre les particules, a un effet marqué sur le coefficient de transfert de chaleur effectif dans le four. Un coefficient de transfert de chaleur effectif significativement plus faible correspond à un temps de chauffage plus élevé.

Les résultats de l'Article 2 représentent un cas de figure où les petites particules, qui se retrouvent emprisonnées au centre du cylindre (aluminium) ont une diffusivité thermique beaucoup plus élevée que les grosses particules demeurant en périphérie (verre). Il serait intéressant de voir comment l'inversion des propriétés thermiques de chaque type de particules influencerait les profils de température.

Également, nous tenons à revenir ici sur deux mécanismes de transfert de chaleur négligés dans les deux premiers articles. Nous avons dit que nous posons l'hypothèse d'une température uniforme dans chaque particule, ce qui nous a évité d'ajouter des calculs coûteux. Cependant, dans notre réseau de résistances introduit dans l'Article 1, nous avons ajouté une résistance R_c qui représente la résistance thermique due à la conduction dans la particule dans le chemin du gaz interstitiel, résistance qui n'était pas considérée dans le modèle original de Bahrami et al. [118]. L'ajout de cette résistance permet à notre modèle de représenter fidèlement le transfert de chaleur dans des particules dont le nombre de Biot serait plus élevé, comme illustré à la Figure 5.14 de l'Article 1 (pour des valeurs faibles de κ). Cette résistance représente donc une alternative encourageante pour représenter ces particules à faible conductivité, sans toutefois ajouter les bilans d'énergie à l'intérieur de chaque particule.

En ce qui a trait à l'effet du rayonnement, nous avons montré qu'il était négligeable pour nos expériences en laboratoire où la température maximale variait autour de 60°C. Toutefois, dans le cas spécifique où nous avons analysé numériquement l'évolution de température à des températures de 500°C, il est bon de rappeler que l'objectif de l'Article 2 était d'étudier les impacts de la ségrégation sur les aspects conductifs du transfert de chaleur seulement. En effet, en calculant le ratio de transfert de chaleur radiatif sur le transfert de chaleur conductif pour des billes de verre de 15 mm (comme c'est le cas dans le pire scénario de l'Article 2), qui ont une conductivité thermique très faible, nous avons calculé que le transfert radiatif pouvait représenter jusqu'à environ 50% du transfert conductif. En raison des difficultés et défis d'implémentation de ce mécanisme dans notre code, et comme il ne s'agissait pas de

l'objet de ce projet, nous ne nous sommes pas penchés sur cet effet. De plus, les résultats de l'Article 2 sont présentés de manière relative les uns par rapport aux autres. Ainsi, nous pensons que le rayonnement pourrait influencer les résultats absolus obtenus pour chaque configuration étudiée, mais que nos conclusions basées sur la comparaison entre ces configurations demeurent valides. Finalement, le calcul menant au ratio de 50% est bien sûr une approximation qui utilise une valeur d'émissivité du matériau qui dépend de la rugosité et de la finition de la particule. Il a été obtenu en utilisant des propriétés approximatives du verre, ce qui représente le scénario le plus défavorable. Les contacts entre deux grosses particueles de verre ne représentent pas tous les contacts dans le système. Quoi qu'il en soit, en voyant ce ratio plutôt élevé, nous pensons que l'ajout d'un modèle de transfert radiatif représenterait une prochaine étape importante pour l'étude du transfert de chaleur dans des équipements à température élevée. Nous rappelons ici que le choix des particules de verre et d'aluminium s'est effectué selon leurs diffusivités thermiques très différentes, étant donné que nous nous intéressions à la conduction. Si nous voulions intégrer l'effet du rayonnement, d'autres particules pourraient être considérées et une plus grande attention devrait être portée à la mesure de leur émissivité.

L'Article 3 (Chapitre 7) se veut une ouverture vers une meilleure compréhension des particules non sphériques. Nous tenions à aborder ce sujet dans cette thèse étant donné que la grande majorité des particules solides en industrie ne sont pas sphériques. Cependant, le code Grains3D utilisé pour la modélisation de particules angulaires ne permettait pas l'ajout du bilan d'énergie. De toute manière, nous sommes d'avis que la modélisation du transfert de chaleur au sein de particules non sphériques, dont les aires de contact peuvent varier énormément selon la forme, représente un autre sujet de recherche foisonnant qui renferme plusieurs défis. Notre étude en non sphérique s'est donc concentrée sur les différences observables dans les patrons de ségrégation entre des sphères, des cubes et des icosaèdres. Malgré certaines études énoncées dans la revue de littérature qui relevaient de différences notables dans les patrons de ségrégation entre les particules sphériques et non sphériques, les résultats de l'Article 3 démontrent davantage une similarité de comportement. En effet, les sphères, les icosaèdres ainsi que les cubes ont tous exhibé les mêmes tendances de ségrégation à mesure que la vitesse de rotation du cylindre augmentait, avec seulement un certain décalage dans les courbes. Il est important de noter ici que les formes non sphériques que nous avons étudiées étaient certes angulaires, mais régulières et convexes, c'est-à-dire qu'elles n'avaient pas de côté plus long qu'un autre, comme c'est le cas notamment pour certains ellipsoïdes.

Nous avons remarqué que le mécanisme de percolation élaboré pour expliquer la ségrégation par taille dans des sphères arrivait parfaitement à décrire les patrons de ségrégation des formes non sphériques. L'effet de la forme se faisait surtout ressentir dans la capacité des particules

à transférer l'énergie de la rotation du cylindre à l'intérieur du lit, soit par la friction au mur soit par les collisions entre les particules. Cette similarité de patrons de ségrégation fournit une première étape vers une analyse de l'effet de cette ségrégation sur le transfert de chaleur dans un mélange de particules non sphériques.

De plus, les résultats de l'Article 3 démontrent la grande variabilité de patrons de ségrégation pouvant être obtenus dans un cylindre rotatif selon sa vitesse de rotation. Ces patrons de ségrégation influenceraient assurément le transfert de chaleur étudié dans le deuxième article, où nous nous sommes limités à une seule vitesse de rotation. La combinaison des Articles 2 et 3 présente une partie du large éventail des paramètres pouvant influencer la ségrégation granulaire, c'est-à-dire le ratio de taille, l'ajout de chicanes, la vitesse de rotation du cylindre et la forme des particules. Comme nous l'avons vu avec la relation entre le coefficient de transfert de chaleur effectif et l'intensité de ségrégation présentée dans l'Article 2, nous pouvons penser qu'une relation similaire serait obtenue pour chaque forme de particules de l'Article 3.

Finalement, comme nous l'avons vu au Chapitre 4, une large portion de la modélisation numérique réside dans l'apprentissage des logiciels, dans la création de maillages, dans l'écriture de scripts d'entrée (prétraitement) et dans l'analyse des résultats (post-traitement). Plusieurs scripts d'entrée et de traitement ont été rédigés au cours de cette thèse. Ces scripts se veulent automatiques et, le plus possible, versatiles. Ils ont été améliorés et modifiés tout au long du projet, mais les versions les plus à jour ont été téléversées dans le dossier gitHub : `https://github.com/chbeae/scriptsThese_ChristineBeaulieu`, notamment les scripts pour calculer l'indice de ségrégation en temps dans le cylindre, pour faire l'analyse thermique, pour calculer la conductivité thermique effective, pour calculer la température moyenne à certaines hauteurs spécifiques dans un lit granulaire et pour calculer des interpolations linéaires ou des splines. D'autres scripts ont également été utilisés afin de lancer automatiquement plusieurs simulations LIGGGHTS en parallèle. Ces scripts, dans un langage BaSH, ont notamment été très utiles lors de l'analyse paramétrique de la rugosité et du diamètre présentée dans l'Article 1. Ils se retrouvent également dans le dossier github : `https://github.com/chbeae/scriptsThese_ChristineBeaulieu`. Certains scripts rédigés par l'auteure et concernant la modélisation et l'analyse de particules sphériques de tailles différentes dans un cylindre rotatif ont d'ailleurs été réutilisés par Bahman Yari, alors étudiant au doctorat, afin d'étudier l'effet du ratio de taille sur les patrons de ségrégation. Cette collaboration a donné naissance à un autre article dont M. Yari est l'auteur principal : *Size segregation of bidisperse granular mixtures in rotating drum* [25] publié au journal *Powder Technology*.

Ainsi, à travers la rédaction de cette thèse, nous croyons avoir réussi à répondre à l'objectif principal en suivant une démarche scientifique et validée. Afin de répondre à notre objectif principal, nous avons développé un nouveau modèle de transfert de chaleur plus universel et complet dont les équations sont présentées en détail dans les Articles 1 et 2. Ce modèle pourrait être réutilisé par tout autre chercheur s'intéressant au transfert de chaleur dans des matériaux granulaires de tailles différentes ou identiques. De plus, les scripts automatiques rédigés tout au long de ce processus numérique ont été écrits dans un souci de compréhension et de versatilité, qui leur permettent d'être utilisés par d'autres étudiants.

CHAPITRE 9 CONCLUSION

9.1 Synthèse des travaux

L'objectif de cette section est de rappeler les résultats importants de cette thèse et surtout d'en faire ressortir les contributions scientifiques dans le domaine.

Article 1 : Impact of surface roughness on heat transfer through spherical particle packed beds

En plus d'offrir une revue détaillée sur les modèles numériques de transfert de chaleur existants et de faire ressortir les désaccords dans la littérature sur l'importance du fluide interstitiel dans le transfert de chaleur, l'Article 1 s'intéresse aux cas ayant des valeurs de κ extrêmes, souvent ignorés dans la littérature, bien qu'ils soient présents en industrie. Dans cet article, nous avons mis en lumière l'impact de la rugosité qui diminuait la conductivité thermique effective d'un milieu granulaire à hautes valeurs de κ, puis l'importance de la résistance de conduction dans la particule pour de faibles valeurs de κ. Ces ajouts nous ont permis de développer un nouveau modèle de TDEM complet qui considère plusieurs mécanismes de transfert de chaleur et qui s'adapte fidèlement à la réalité selon les propriétés physiques des particules utilisées. La force de ce nouveau modèle est de pouvoir couvrir une gamme beaucoup plus étendue de valeurs de κ (k_p/k_f). Qui plus est, dans le processus de l'élaboration de ce modèle, nous avons effectué plusieurs autres contributions scientifiques que nous déclinons ci-dessous.

- Nous avons recensé et mis en commun plusieurs données expérimentales de conductivités thermiques effectives de différents matériaux provenant de différentes sources, avec un intérêt particulier pour des points à faibles et hautes valeurs de κ. La Figure 5.2 et le Tableau 5.1 représentent donc une banque de données expérimentales comparatives plus étendue pour quiconque s'intéresse au transfert de chaleur dans les matériaux granulaires.
- À l'aide de l'ajout de la rugosité dans notre modèle, nous avons pu fournir une explication détaillée concernant l'éventail des valeurs de conductivité thermique effective à hautes valeurs de κ, et ainsi réconcilier deux modèles de TDEM existants et les corrélations qui surestimaient les valeurs expérimentales pour des matériaux très conducteurs.
- Nous avons proposé une méthode basée sur le circuit de résistances thermiques afin de prédire quels mécanismes de transfert de chaleur seraient dominants pour une bille donnée, et ce, sans nécessiter aucune simulation.

– Nous avons créé de nouvelles données expérimentales de k_e/k_f pour quatre matériaux différents (le verre, l'acier, l'alliage d'aluminium 7A03 et l'alliage d'aluminium 1100), dont deux qui se trouvent dans la région des hautes valeurs de κ, jusqu'alors souvent ignorée. Pour chacun de ces quatre matériaux, nous avons fourni l'évolution de la température en temps à trois hauteurs différentes et avons calculé leur conductivité thermique effective, que nous avons comparée avec deux corrélations souvent utilisées dans la littérature et trois modèles de TDEM. Il s'agit de données expérimentales pouvant être réutilisées pour valider de futurs modèles.

Article 2 : Impact of granular segregation on heat transfer in a horizontal rotating drum

Le deuxième article représente le coeur de cette thèse et la réponse à l'objectif général. En effet, dans cet article, nous avons combiné les effets de la ségrégation granulaire et du transfert de chaleur. Les contributions scientifiques associées à ce travail se déclinent comme suit :

– Nous avons développé un nouveau modèle de TDEM en bidisperse qui peut être utilisé tel quel pour tout mélange polydisperse.
– Nous avons généré de nouvelles données expérimentales de transfert de chaleur dans un lit bidisperse, ce qui comble un manque dans la littérature. Ces données peuvent être utilisées pour valider d'éventuels modèles.
– Nous avons établi une relation entre le coefficient de transfert de chaleur effectif et l'intensité de ségrégation dans un lit de particules, ce qui n'avait jamais été démontré avant.
– Nous avons montré que, pour un ratio de taille donné, l'indice de ségrégation était un bon indicateur pour prédire le coefficient de transfert de chaleur effectif, même si la disposition des particules dans le cylindre était différente.
– Nous avons démontré l'importance de la ségrégation granulaire sur des paramètres de contrôle de qualité comme l'uniformité de température entre les particules et le profil radial de température dans le cylindre. Ces résultats ont permis de quantifier l'impact de la ségrégation granulaire sur le transfert de chaleur dans différents lits de particules ségréguées.

Article 3 : Effect of particle angularity on flow regime transitions and segregation of bidisperse blends in a rotating drum

Finalement, le troisième article portant sur la ségrégation granulaire de particules angulaires a permis d'étendre notre étude sur les patrons de ségrégation et de comparer le comportement de cubes, d'icosaèdres et de sphères. Notre étude à ce niveau se démarque grâce aux points

ci-dessous.

- Nous avons présenté une carte de ségrégation complète allant du roulement à la centrifugation pour des cubes et des icosaèdres, ce qui n'existait jusqu'alors que pour les sphères, et avons montré que le comportement des particules non sphériques était calqué sur celui des sphères, mais avec un léger décalage relatif à la vitesse de rotation.
- Nous sommes revenus sur l'idée répandue dans la littérature qu'il est possible de représenter des particules non sphériques à l'aide du coefficient de friction en roulement, et avons montré que ce coefficient n'était pas suffisant.
- Nous avons confirmé qu'il était possible d'expliquer les patrons de ségrégation en non sphérique à l'aide des mêmes mécanismes que ceux utilisés pour les sphères.
- Nous avons réussi à unifier les courbes d'indice de ségrégation des trois formes étudiées en utilisant un nombre de Froude modifié. Ce nombre de Froude modifié et l'unification des courbes suggèrent que la principale différence entre les formes réside dans leur capacité à transférer l'énergie du mur en translation des particules.

9.2 Limitations de la solution proposée

Ainsi, les modèles numériques de DEM (dynamique) et de TDEM (thermique) utilisés tout au long de cette thèse ont permis de générer des résultats validés et fiables permettant de démystifier le transfert de chaleur dans des matériaux granulaires monodisperses et bidisperse, en plus d'étendre nos connaissances sur la ségrégation de particules non sphériques. Ces avancées sont d'une grande importance pour de nombreuses industries devant traiter des particules solides. Toutefois, nos modèles sont basés sur certains cas de figure et comportent ainsi des limitations [1]. Les limitations principales des travaux effectués dans cette thèse sont discutées ici.

D'abord, il est de l'avis de l'auteure que la principale limitation du modèle de transfert de chaleur dans sa version actuelle est qu'il soit limité à des entassements de particules statiques. Le but final serait évidemment de regrouper tous les phénomènes en mesurant le transfert de chaleur en simultané avec la rotation du four rotatif. Cela permettrait de voir à quel point le mouvement des particules influence le transfert de chaleur, lorsque le lit de particules est en cours de ségrégation.

Ensuite, il convient de rappeler que nous avons principalement ciblé notre étude sur le transfert conductif dans le lit de particules. Le modèle que nous avons établi ne permet donc pas de simuler des systèmes où il y aurait un courant d'air élevé parmi les particules dont

1. C'est la définition même d'un modèle, qui ne peut jamais représenter la réalité entière dans toute sa complexité.

la température et la vitesse influenceraient la température des particules. Puis, n'ayant pas de module radiatif, notre modèle serait incapable de représenter des systèmes à très hautes températures, autour de 800° C.

Un autre aspect que nous n'avons pas observé et qui mérite d'être mentionné est l'influence de la température sur les propriétés des matériaux qui agissent comme paramètres d'entrée de notre modèle, notamment le module de Young, la conductivité thermique des particules et de l'air, la masse volumique de l'air et la viscosité de l'air. Pour les moments, toutes ces propriétés demeurent constantes lors des simulations.

En ce qui a trait à notre étude sur les particules non sphériques, nous croyons que les tendances de ségrégation obtenues sont valides pour toute forme régulière angulaire. Cependant, nous ne pouvons pas étendre nos conclusions à des formes non convexes très différentes des sphères.

Finalement, au niveau de la DEM, une limitation souvent énoncée est le temps de calcul qui dépend grandement du nombre de particules. Les simulations traitant de particules non sphériques ont été notamment très longues, devant être relancées sur plusieurs mois afin d'obtenir les régimes permanents de ségrégation. Afin d'améliorer cet aspect, certains codes de DEM permettent une parallélisation adaptative et simultanée du domaine de simulation. Cela veut dire que la répartition des processeurs impliqués dans la simulation s'adapte au mouvement des particules. Ainsi, un nombre égal de particules est attribué à chaque processeur tout au long de la simulation, ce qui permet une utilisation optimale des ressources. Cette amélioration n'était pas possible ni avec LIGGGHTS, ni avec Grains3D. Elle est disponible dans un nouveau code de DEM actuellement en développement à Polytechnique Montréal nommé Lethe (https ://github.com/lethe-cfd/lethe/wiki). Cependant, cette plateforme n'inclut pas encore les modules de transfert de chaleur ou de modélisation non sphérique [2].

9.3 Améliorations futures

Évidemment, ce projet de recherche ouvre la porte à une multitude d'autres possibilités. En fait, et c'est le côté pervers d'une thèse il faut croire, c'est à la fin d'un projet comme celui-ci qu'on semble voir toutes les possibilités, et elles n'ont jamais semblé si facilement atteignables, maintenant que les outils sont développés et acquis. Les améliorations futures sont évidemment intimement liées aux limitations présentées à la section précédente.

La prochaine étape serait en toute logique d'étendre notre modèle de TDEM en dynamique. Pour ce faire, comme nous l'avons vu dans la revue de la littérature, certains auteurs pro-

2. et n'existait pas du tout il y a six ans !

posent de modifier le coefficient de conductance entre deux particules en mouvement, en considérant l'influence du temps de contact entre les deux particules (Équation 2.30). Cependant, cette modification n'est pas acceptée par tous les auteurs dans la littérature. La prochaine étape serait donc d'implémenter cet ajout dans notre modèle et d'étudier son impact pour différents matériaux en comparant nos résultats avec des expériences. L'idéal serait de pouvoir mesurer nous-mêmes des températures dans un four rotatif pour la validation. Certaines données expérimentales énoncées dans la revue sont également disponibles pour valider l'impact de l'ajout du calcul du temps de collision dans le trasfert de chaleur entre particules en mouvement.

Une fois le modèle validé en dynamique, nous pourrions observer l'effet de la convection des particules jumelée à leur conduction dans le réacteur. Nous pourrions utiliser ce modèle pour émuler l'apparition spontanée de particules plus petites dans le réacteur à un certain temps précis. Cela représenterait la génération de particules fines lors d'une réaction chimique à un endroit précis dans le réacteur, comme c'est le cas lord d'une pyrolyse. La migration de ces petites particules à une certaine température par ségrégation pourrait ainsi être simulée. De plus, maintenant qu'on a démontré que la ségrégation causait des zones de particules plus froides et plus chaudes, il serait intéressant de voir en dynamique si ces zones correspondent aux zones actives et passives dont la délimitation s'effectue à l'aide des vitesses de particules. Cette étude pourrait représenter une première approche du développement d'un modèle compartemental pour prédire des coefficients de transfert de chaleur distincts et locaux dans le four rotatif selon le patron de ségrégation.

Une étude supplémentaire qui ne nécessiterait aucune modification au code pourrait s'intéresser à des mélanges polydisperses. En effet, un assemblage de particules avec une distribution égale de plusieurs tailles de particules présenterait des patrons de ségrégation différents et il serait intéressant de voir si les différences observées dans les profils de température seraient augmentées ou diminuées.

Comme nous l'avons vu principalement dans le premier article (Chapitre 5), les modèles particulaires de transfert thermique sont très sensibles aux propriétés des particules. Dans cet article, nous avons montré que la rugosité jouait un rôle très important dans le calcul de la conductivité effective thermique. Il est de l'avis de l'auteure qu'il serait approprié, dans tout travail futur, de porter une attention particulière et d'améliorer les techniques de caractérisation expérimentale pour mesurer les propriétés de surface des billes utilisées, mais aussi leur conductivité thermique, leur capacité thermique et leurs coefficients de friction. Le fait de réduire au maximum l'incertitude sur ces valeurs expérimentales aide énormément au développement de modèles en éliminant *a priori* une cause d'erreur lors de la comparaison

entre les données numériques et expérimentales.

Finalement, l'un des avantages de la simulation numérique est de pouvoir créer des géométries de différentes configurations facilement et rapidement. Nous avons montré dans l'Article 2 l'utilité des chicanes dans un cylindre rotatif pour réduire l'intensité de ségrégation. Nous pourrions également être un peu plus fous et tester des formes de tambours rotatifs plus originales comme des triangles, des étoiles ou des carrés et examiner si les zones de ségrégation et de températures plus basses se feraient aux mêmes endroits ou à des endroits différents. Même si ces configurations de tambour ne pourraient réalistement jamais voir le jour de par leur complexité de construction ou de manipulation, elles pourraient quand même aider à comprendre les phénomènes de transfert de chaleur jumelés à la ségrégation granulaire. Et puis, à quoi servirait la recherche si ce n'était pas pour s'amuser un peu ?

Mot de la fin Ainsi, c'est sous une canicule plutôt accablante, mais le coeur très léger que j'entame la toute dernière section de ce document. Le transfert de chaleur dans les matériaux granulaires se sera avéré un sujet de recherche très intéressant, tout en étant rempli d'embûches et de surprises. J'espère que la lecture de cette thèse aura jeté une lumière sur certaines de ces questions qui m'ont accompagnée depuis plusieurs années, tout en laissant ouverte la porte à tous les autres travaux possibles dans le domaine.

RÉFÉRENCES

[1] J. Duran, *Sables, poudres et grains*. Eyrolles, 1997.

[2] F. J. Muzzio, A. Alexander, C. Goodridge, E. Shen, T. Shinbrot, K. Manjunath, S. Dhodapkar et K. Jacob, "Solids mixing," dans *Handbook of industrial mixing : science and practice*, E. L. Paul, V. A. Atiemo-Obeng et S. M. Kresta, édit. John Wiley & Sons, Inc., 2004, p. 887–985.

[3] N. Vandewalle, "La physique des matériaux granulaires," *Bulletin de la Société Royale des Sciences de Liège*, vol. 72, n°. 5, p. 305–315, 2003.

[4] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz et R. H. Swendsen, "Why the brazil nuts are on top : Size segregation of particulate matter by shaking," *Physical Review Letters*, vol. 58, n°. 10, p. 1038, 1987.

[5] G. d. R. M. Divisés, "On dense granular flows," *The European Physical Journal E*, vol. 14, n°. 4, p. 341–365, 2004.

[6] O. Dubé, "Dynamique particulaire dans des lits fixes et rotatifs," Thèse de doctorat, École Polytechnique Montréal, 2013.

[7] J. M. Ottino et D. V. Khakhar, "Mixing and segregation of granular materials," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 32, p. 55–91, 2000.

[8] E. Alizadeh, O. Dube, F. Bertrand et J. Chaouki, "Characterization of mixing and size segregation in a rotating drum by a particle tracking method," *AIChE Journal*, vol. 59, n°. 6, p. 1894–1905, 2013.

[9] C. M. Dury, G. H. Ristow, J. L. Moss et M. Nakagawa, "Boundary effects on the angle of repose in rotating cylinders," *Physical Review E*, vol. 57, n°. 4, p. 4491–4497, 1998.

[10] E. Alizadeh, F. Bertrand et J. Chaouki, "Comparison of dem results and lagrangian experimental data for the flow and mixing of granules in a rotating drum," *AIChE Journal*, vol. 60, n°. 1, p. 60–75, 2014.

[11] F. Fantozzi, P. Bartocci, S. Colantoni et U. D. Univ, "Rotary kiln slow pyrolysis for syngas and char production from biomass and waste - part 1 working envelope of the reactor," dans *2006 ASME 51st Turbo Expo, May 6, 2006 - May 11, 2006*, ser. Proceedings of the ASME Turbo Expo, vol. 2. Barcelona, Spain : American Society of Mechanical Engineers, 2006, p. 409–416.

[12] H. Henein, J. K. Brimacombe et A. P. Watkinson, "Experimental study of transverse bed motion in rotary kilns," *Metallurgical Transactions B (Process Metallurgy)*, vol. 14 B, n°. 2, p. 191–205, 1983.

[13] J. Mellmann, "The transverse motion of solids in rotating cylinders-forms of motion and transition behavior," *Powder Technology*, vol. 118, n°. 3, p. 251–270, 2001.

[14] R. G. Sherritt, J. Chaouki, A. K. Mehrotra et L. A. Behie, "Axial dispersion in the three-dimensional mixing of particles in a rotating drum reactor," *Chemical Engineering Science*, vol. 58, n°. 2, p. 401–415, 2003.

[15] S. C. Dragomir, M. D. Sinnott, S. E. Semercigil et z. F. Turan, "A study of energy dissipation and critical speed of granular flow in a rotating cylinder," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 333, n°. 25, p. 6815–6827, 2014.

[16] D. Hohner, S. Wirtz et V. Scherer, "A study on the influence of particle shape and shape approximation on particle mechanics in a rotating drum using the discrete element method," *Powder Technology*, vol. 253, p. 256–265, 2014.

[17] A. A. Boateng et P. V. Barr, "Granular flow behaviour in the transverse plane of a partially filled rotating cylinder," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 330, p. 233–249, 1997.

[18] F. Bertrand, L. A. Leclaire et G. Levecque, "Dem-based models for the mixing of granular materials," *Chemical Engineering Science*, vol. 60, n°. 8-9, p. 2517–31, 2005.

[19] J. Mosby, S. R. de Silva et G. G. Enstad, "Segregation of particulate materials : Mechanisms and testers," *KONA Powder and Particle Journal*, vol. 14, n°. May, p. 31–43, 1996.

[20] M. Arntz, H. Beeftink, W. Otter, W. Briels et R. Boom, "Segregation of granular particles by mass, radius, and density in a horizontal rotating drum," *AIChE journal*, vol. 60, n°. 1, p. 50–59, 2014.

[21] N. Jain, J. M. Ottino et R. M. Lueptow, "Regimes of segregation and mixing in combined size and density granular systems : An experimental study," *Granular Matter*, vol. 7, n°. 2-3, p. 69–81, 2005.

[22] M. M. H. D. Arntz, W. K. den Otter, W. J. Briels, P. J. T. Bussmann, H. H. Beeftink et R. M. Boom, "Granular mixing and segregation in a horizontal rotating drum : A simulation study on the impact of rotational speed and fill level," *AIChE Journal*, vol. 54, n°. 12, p. 3133–3146, 2008.

[23] W. L. Vargas, S. K. Hajra, D. Shi et J. J. McCarthy, "Suppressing the segregation of granular mixtures in rotating tumblers," *AIChE Journal*, vol. 54, n°. 12, p. 3124–3132, 2008.

[24] J. Bridgwater et N. Ingram, "Rate of spontaneous inter-particle percolation," *TRANSACTIONS OF THE INSTITUTION OF CHEMICAL ENGINEERS AND THE CHEMICAL ENGINEER*, vol. 49, n°. 3, p. 163–+, 1971.

[25] B. Yari, C. Beaulieu, P. Sauriol, F. Bertrand et J. Chaouki, "Size segregation of bidisperse granular mixtures in rotating drum," *Powder Technology*, 2020.

[26] K. M. Hill, N. Jain et J. M. Ottino, "Modes of granular segregation in a noncircular rotating cylinder," *Physical Review E*, vol. 64, n°. 1, p. 011302, 2001.

[27] I. Figueroa, W. L. Vargas et J. J. McCarthy, "Mixing and heat conduction in rotating tumblers," *Chemical Engineering Science*, vol. 65, n°. 2, p. 1045–1054, 2010.

[28] S. W. Meir, "Mixing and segregation of granular materials : A dynamical systems approach," Thèse de doctorat, Northwestern University, 2007.

[29] T. Nguyen, A. J. Sederman, M. D. Mantle et L. F. Gladden, "Radial and axial segregation in horizontal rotating cylinders studied by magnetic resonance imaging (mri)," *arXiv preprint cond-mat/0612056*, 2006.

[30] D. Rapaport, "Radial and axial segregation of granular matter in a rotating cylinder : A simulation study," *Physical Review E*, vol. 75, n°. 3, p. 031301, 2007.

[31] S. González, C. R. K. Windows-Yule, S. Luding, D. J. Parker et A. R. Thornton, "Forced axial segregation in axially inhomogeneous rotating systems," *Physical Review E*, vol. 92, n°. 2, p. 022202, 2015.

[32] O. Dube, E. Alizadeh, J. Chaouki et F. Bertrand, "Dynamics of non-spherical particles in a rotating drum," *Chemical Engineering Science*, vol. 101, p. 486–502, 2013.

[33] D. V. Khakhar, A. V. Orpe et S. K. Hajra, "Segregation of granular materials in rotating cylinders," dans *STATPHYS - Kolkata IV, January 14, 2002 - January 19, 2002*, ser. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications, vol. 318. Kolkata, India : Elsevier, 2003, p. 129–136.

[34] A. D. Rakotonirina, J.-Y. Delenne, F. Radjai et A. Wachs, "Grains3d, a flexible dem approach for particles of arbitrary convex shape—part iii : extension to non-convex particles modelled as glued convex particles," *Computational Particle Mechanics*, vol. 6, n°. 1, p. 55–84, 2019.

[35] S. Y. He, J. Q. Gan, D. Pinson, A. B. Yu et Z. Y. Zhou, "Flow regimes of cohesionless ellipsoidal particles in a rotating drum," *Powder Technology*, 2019.

[36] H. R. Norouzi, R. Zarghami et N. Mostoufi, "Insights into the granular flow in rotating drums," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 102, p. 12–25, 2015.

[37] N. Gui, X. Yang, J. Tu et S. Jiang, "Numerical study of the motion behaviour of three-dimensional cubic particle in a thin drum," *Advanced Powder Technology*, vol. 29, n°. 2, p. 426–437, 2018.

[38] D. A. Santos, M. A. S. Barrozo, C. R. Duarte, F. Weigler et J. Mellmann, "Investigation of particle dynamics in a rotary drum by means of experiments and numerical simulations using dem," *Advanced Powder Technology*, vol. 27, n°. 2, p. 692–703, 2016.

[39] H. A. Makse, "Stratification instability in granular flows," *Physical Review E*, vol. 56, n°. 6, p. 7008–7016, 1997.

[40] G. G. Pereira et P. W. Cleary, "Segregation due to particle shape of a granular mixture in a slowly rotating tumbler," *Granular Matter*, vol. 19, n°. 2, 2017.

[41] S. Y. He, J. Q. Gan, D. Pinson et Z. Y. Zhou, "Particle shape-induced radial segregation of binary mixtures in a rotating drum," *Powder Technology*, 2018.

[42] E. Alizadeh, F. Bertrand et J. Chaouki, "Development of a granular normal contact force model based on a non-newtonian liquid filled dashpot," *Powder Technology*, vol. 237, p. 202–212, 2013.

[43] T. Kawaguchi, K. Tsutsumi et Y. Tsuji, "Mri measurement of granular motion in a rotating drum," *Particle and particle Systems Characterization*, vol. 23, n°. 3-4, p. 266–271, 2006.

[44] D. J. Parker et X. Fan, "Positron emission particle tracking—application and labelling techniques," *Particuology*, vol. 6, n°. 1, p. 16–23, 2008.

[45] J. Doucet, F. Bertrand et J. Chaouki, "An extended radioactive particle tracking method for systems with irregular moving boundaries," *Powder Technology*, vol. 181, n°. 2, p. 195–204, 2008.

[46] M. C. Marinack Jr, J. N. Mpagazehe et C. F. Higgs Iii, "An eulerian, lattice-based cellular automata approach for modeling multiphase flows," *Powder Technology*, vol. 221, p. 47–56, 2012.

[47] P. B. Warren, "Dissipative particle dynamics," *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, vol. 3, n°. 6, p. 620–624, 1998.

[48] W. Wagner, "A convergence proof for bird's direct simulation monte carlo method for the boltzmann equation," *Journal of Statistical Physics*, vol. 66, n°. 3-4, p. 1011–1044, 1992.

[49] E. Oran, C. Oh et B. Cybyk, "Direct simulation monte carlo : recent advances and applications 1," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 30, n°. 1, p. 403–441, 1998.

[50] T. Ihle et D. M. Kroll, "Stochastic rotation dynamics. i. formalism, galilean invariance, and green-kubo relations," *Physical Review E*, vol. 67, n°. 6, p. 066705, 2003.

[51] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang et A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments," *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n°. 13, p. 3378–3396, 2007.

[52] B. Blais, D. Vidal, F. Bertrand, G. S. Patience et J. Chaouki, "Experimental methods in chemical engineering : Discrete element method—dem," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 97, n°. 7, p. 1964–1973, 2019.

[53] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang et A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particulate systems : A review of major applications and findings," *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 23, p. 5728–5770, 2008.

[54] H. Chen, Y. L. Liu, X. Q. Zhao, Y. G. Xiao et Y. Liu, "Numerical investigation on angle of repose and force network from granular pile in variable gravitational environments," *Powder Technology*, vol. 283, p. 607–617, 2015.

[55] E. Hovad, P. Larsen, J. H. Walther, J. Thorborg, J. H. Hattel et Iop, "Flow dynamics of green sand in the disamatic moulding process using discrete element method (dem)," *Mcwasp Xiv : International Conference on Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, vol. 84, p. 8, 2015.

[56] J. Li et D. J. Mason, "A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles," *Powder Technology*, vol. 112, n°. 3, p. 273–282, 2000.

[57] B. K. Mishra et C. Thornton, "An improved contact model for ball mill simulation by the discrete element method," *Advanced Powder Technology*, vol. 13, n°. 1, p. 25–41, 2002.

[58] S. Naik et B. Chaudhuri, "Quantifying dry milling in pharmaceutical processing : A review on experimental and modeling approaches," *Journal of Pharmaceutical Sciences*, vol. 104, n°. 8, p. 2401–2413, 2015.

[59] O. O. Ayeni, C. L. Wu, J. B. Joshi et K. Nandakumar, "A discrete element method study of granular segregation in non-circular rotating drums," *Powder Technology*, vol. 283, p. 549–560, 2015.

[60] N. Gui, J. Fan, J. Gao et X. Yang, "Particle mixing study in rotating wavy wall tumblers by discrete element method simulation," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 53, n°. 33, p. 13 087–13 097, 2014.

[61] J. J. Sun, Z. G. Luo et Z. S. Zou, "Numerical simulation of raceway phenomena in a corex melter-gasifier," *Powder Technology*, vol. 281, p. 159–166, 2015.

[62] T. Weinhart, C. Labra, S. Luding et J. Y. Ooi, "Influence of coarse-graining parameters on the analysis of dem simulations of silo flow," *Powder Technology*, vol. 293, p. 138–148, 2016.

[63] C. Kloss et C. Goniva, "Granular simulations in lammps : New key features and perspectives," 2010.

[64] P. A. Cundall et O. D. L. Strack, “Discrete numerical model for granular assemblies,” *Geotechnique*, vol. 29, n°. 1, p. 47–65, 1979.

[65] M. Liu, Y. Wen, R. Liu, B. Liu et Y. Shao, “Investigation of fluidization behavior of high density particle in spouted bed using cfd–dem coupling method,” *Powder Technology*, vol. 280, n°. 0, p. 72–82, 2015.

[66] A. Castellanos, “The relationship between attractive interparticle forces and bulk behaviour in dry and uncharged fine powders,” *Advances in Physics*, vol. 54, n°. 4, p. 263–376, 2005.

[67] S. Luding, “Cohesive, frictional powders : contact models for tension,” *Granular matter*, vol. 10, n°. 4, p. 235–246, 2008.

[68] Z. Grof, C. J. Lawrence et F. Štěpánek, “Computer simulation of evolving capillary bridges in granular media,” *Granular Matter*, vol. 10, n°. 2, p. 93–103, 2008.

[69] G. Lian, C. Thornton et M. J. Adams, “A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 161, n°. 1, p. 138–147, 1993.

[70] M. M. Martin, *Introduction to Software for Chemical Engineers*. United States : CRC Press, 2014.

[71] Y. Li, Y. Xu et C. Thornton, “A comparison of discrete element simulations and experiments for sandpiles composed of spherical particles,” *Powder Technology*, vol. 160, n°. 3, p. 219–228, 2005.

[72] K. L. Johnson, *Contact mechanics*. United Kingdom : Cambridge University Press, 1987.

[73] O. Dubé, M. Ackley, C. Celik, J. Chaouki et F. Bertrand, “Discrete element simulation of the dynamics of adsorbents in a radial flow reactor used for gas prepurification,” *Adsorption*, vol. 20, n°. 1, p. 91–107, 2014.

[74] B. Blais, M. Lassaigne, C. Goniva, L. Fradette et F. Bertrand, “Development of an unresolved cfd–dem model for the flow of viscous suspensions and its application to solid–liquid mixing,” *Journal of Computational Physics*, vol. 318, p. 201–221, 2016.

[75] A. Wachs, L. Girolami, G. Vinay et G. Ferrer, “Grains3d, a flexible dem approach for particles of arbitrary convex shape — part i : Numerical model and validations,” *Powder Technology*, vol. 224, p. 374–389, 2012.

[76] J. Ai, J.-F. Chen, J. M. Rotter et J. Y. Ooi, “Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations,” *Powder Technology*, vol. 206, n°. 3, p. 269–282, 2011.

[77] C. M. Wensrich et A. Katterfeld, “Rolling friction as a technique for modelling particle shape in dem,” *Powder Technology*, vol. 217, p. 409–417, 2012.

[78] G. Lu, J. R. Third et C. R. Müller, “Discrete element models for non-spherical particle systems : From theoretical developments to applications,” *Chemical Engineering Science*, vol. 127, p. 425–465, 2015.

[79] A. Wachs, “Particle-scale computational approaches to model dry and saturated granular flows of non-brownian, non-cohesive, and non-spherical rigid bodies,” *Acta Mechanica*, vol. 230, n°. 6, p. 1919–1980, 2019.

[80] D. Shi, W. L. Vargas et J. J. McCarthy, “Heat transfer in rotary kilns with interstitial gases,” *Chemical Engineering Science*, vol. 63, n°. 18, p. 4506–4516, 2008.

[81] R. B. Bird, W. E. Stewart et E. N. Lghtfoot, *Transport phenomena*, 2e éd. Madison, États-Unis : John Wiley & Sons, Inc., 2007.

[82] T. L. Bergman, A. S. Lavine, F. P. Incropera et D. P. Dewitt, *Introduction to heat transfer*, 6e éd. Jefferson City, États-Unis : John Wiley & Sons, Inc., 2011.

[83] B. Chaudhuri, F. J. Muzzio et M. S. Tomassone, “Modeling of heat transfer in granular flow in rotating vessels,” *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n°. 19, p. 6348–6360, 2006.

[84] W. L. Vargas et J. McCarthy, “Heat conduction in granular materials,” *AIChE Journal*, vol. 47, n°. 5, p. 1052–1059, 2001.

[85] H. Komossa, S. Wirtz, V. Scherer, F. Herz et E. Specht, “Heat transfer in indirect heated rotary drums filled with monodisperse spheres : Comparison of experiments with dem simulations,” *Powder Technology*, vol. 286, p. 722–731, 2015.

[86] T. Oschmann, M. Schiemann et H. Kruggel-Emden, “Development and verification of a resolved 3d inner particle heat transfer model for the discrete element method (dem),” *Powder Technology*, vol. 291, p. 392–407, 2016.

[87] W. L. Vargas et J. J. McCarthy, “Conductivity of granular media with stagnant interstitial fluids via thermal particle dynamics simulation,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 45, n°. 24, p. 4847–4856, 2002.

[88] G. K. Batchelor et R. O’brien, “Thermal or electrical conduction through a granular material,” *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 355, n°. 1682, p. 313–333, 1977.

[89] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger et S. Pirker, “Models, algorithms and validation for opensource dem and cfd–dem,” *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, vol. 12, n°. 2-3, p. 140–152, 2012.

[90] H. Zhang, Q. Zhou, H. Xing et H. Muhlhaus, "A dem study on the effective thermal conductivity of granular assemblies," *Powder technology*, vol. 205, n°. 1, p. 172–183, 2011.

[91] S. Amberger, S. Pirker et C. Kloss, "Thermal radiation modeling using ray tracing in liggghts," dans *6th International Conference on Discrete Element Methods (DEM6)*, 2013.

[92] J. T. Van Lew, "On thermal characterization of breeder pebble beds with microscale numerical modeling of thermofluid and pebble-pebble interactions," Thèse de doctorat, UCLA, 2016.

[93] G. Buonanno, A. Carotenuto, G. Giovinco et N. Massarotti, "Experimental and theoretical modeling of the effective thermal conductivity of rough steel spheroid packed beds," *Journal of Heat Transfer*, vol. 125, n°. 4, p. 693–702, 2003.

[94] Z. Y. Zhou, A. B. Yu et P. Zulli, "A new computational method for studying heat transfer in fluid bed reactors," *Powder Technology*, vol. 197, n°. 1, p. 102–110, 2010.

[95] N. Gui, X. Yang, J. Tu et S. Jiang, "Tdem simulation and analysis of thermal conduction through packed granular beds," *Canadian Journal of Physics*, vol. 94, n°. 9, p. 826–833, 2016.

[96] G. J. Cheng, A. B. Yu et P. Zulli, "Evaluation of effective thermal conductivity from the structure of a packed bed," *Chemical Engineering Science*, vol. 54, n°. 19, p. 4199–4209, 1999.

[97] Y. Asakuma, Y. Kanazawa et T. Yamamoto, "Thermal radiation analysis of packed bed by a homogenization method," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 73, p. 97–102, 2014.

[98] W. J. Yang, Z. Y. Zhou et A. B. Yu, "Particle scale studies of heat transfer in a moving bed," *Powder Technology*, vol. 281, n°. 0, p. 99–111, 2015.

[99] Z. Y. Zhou, A. B. Yu et P. Zulli, "Particle scale study of heat transfer in packed and bubbling fluidized beds," *AIChE Journal*, vol. 55, n°. 4, p. 868–884, 2009.

[100] V. S. Arpaci et P. S. Larsen, *Convection Heat Transfer*. Prentice-Hall, 1984.

[101] D. L. Swift, "The thermal conductivity of spherical metal powders including the effect of an oxide coating," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 9, n°. 10, p. 1061–1074, 1966.

[102] M. Moscardini, Y. Gan, S. Pupeschi et M. Kamlah, "Discrete element method for effective thermal conductivity of packed pebbles accounting for the smoluchowski effect," *Fusion Engineering and Design*, vol. 127, p. 192–201, 2018.

[103] M. Shapiro, V. Dudko, V. Royzen, Y. Krichevets, S. Lekhtmakher, V. Grozubinsky, M. Shapira et M. Brill, "Characterization of powder beds by thermal conductivity : Effect of gas pressure on the thermal resistance of particle contact points," *Particle & Particle Systems Characterization*, vol. 21, n°. 4, p. 268–275, 2004.

[104] F. Qi et M. M. Wright, "Particle scale modeling of heat transfer in granular flows in a double screw reactor," *Powder Technology*, vol. 335, p. 18–34, 2018.

[105] C. Argento et D. Bouvard, "Modeling the effective thermal conductivity of random packing of spheres through densification," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 39, n°. 7, p. 1343–1350, 1996.

[106] Y. Liang, H. Niu et Y. Lou, "Expression for etc of the solid phase of randomly packed granular materials," *Applied Thermal Engineering*, vol. 109, p. 44–52, 2016.

[107] J. Gan, Z. Zhou et A. Yu, "Effect of particle shape and size on effective thermal conductivity of packed beds," *Powder Technology*, vol. 311, p. 157–166, 2017.

[108] I. Nozad, R. G. Carbonell et S. Whitaker, "Heat conduction in multiphase systems—ii : Experimental method and results for three-phase systems," *Chemical Engineering Science*, vol. 40, n°. 5, p. 857–863, 1985.

[109] H. T. Aichlmayr et F. A. Kulacki, "A transient technique for measuring the effective thermal conductivity of saturated porous media with a constant boundary heat flux," *Journal of Heat Transfer*, vol. 128, n°. 11, p. 1217–1220, 2006.

[110] K. Ofuchi et D. Kunii, "Heat-transfer characteristics of packed beds with stagnant fluids," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 8, n°. 5, p. 749–757, 1965.

[111] W. Van Antwerpen, C. G. du Toit et P. G. Rousseau, "A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 240, n°. 7, p. 1803–1818, 2010.

[112] W. Kannuluik et L. H. Martin, "Conduction of heat in powders," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 141, n°. 843, p. 144–158, 1933.

[113] V. Prasad, N. Kladias, A. Bandyopadhaya et Q. Tian, "Evaluation of correlations for stagnant thermal conductivity of liquid-saturated porous beds of spheres," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, n°. 9, p. 1793–1796, 1989.

[114] K. Nasr, R. Viskanta et S. Ramadhyani, "An experimental evaluation of the effective thermal conductivities of packed beds at high temperatures," *Previews of Heat and Mass Transfer*, vol. 2, n°. 21, p. 154, 1995.

[115] C. Sangrós, C. Schilde et A. Kwade, "Effect of microstructure on thermal conduction within lithium-ion battery electrodes using discrete element method simulations," *Energy Technology*, vol. 4, n°. 12, p. 1611–1619, 2016.

[116] G. Buonanno, A. Carotenuto, G. Giovinco et L. Vanoli, "Effective thermal conductivity of rough spheres packed bed," dans *ASME 2003 Heat Transfer Summer Conference*. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2003, p. 251–256.

[117] C. D. Luzi, S. D. Keegan, N. J. Mariani et G. F. Barreto, "Evaluation of the spreading thermal resistance for rough spheres," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 86, p. 826–831, 2015.

[118] M. Bahrami, M. M. Yovanovich et J. R. Culham, "Effective thermal conductivity of rough spherical packed beds," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, n°. 19–20, p. 3691–3701, 2006.

[119] M. Bahrami, J. Culham, M. Yovanovich et G. Schneider, "Thermal contact resistance of nonconforming rough surfaces, part 2 : thermal model," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 18, n°. 2, p. 218–227, 2004.

[120] B. Chaudhuri, F. J. Muzzio et M. S. Tomassone, "Experimentally validated computations of heat transfer in granular materials in rotary calciners," *Powder Technology*, vol. 198, n°. 1, p. 6–15, 2010.

[121] A. I. Nafsun, F. Herz, E. Specht, H. Komossa, S. Wirtz, V. Scherer et X. Liu, "Thermal bed mixing in rotary drums for different operational parameters," *Chemical Engineering Science*, vol. 160, p. 346–53, 2017.

[122] A. I. Nafsun, F. Herz et X. Liu, "Influence of material thermal properties and dispersity on thermal bed mixing in rotary drums," *Powder Technology*, vol. 331, p. 121–128, 2018.

[123] L. Chen, C. Wang, M. Moscardini, M. Kamlah et S. Liu, "A dem-based heat transfer model for the evaluation of effective thermal conductivity of packed beds filled with stagnant fluid : Thermal contact theory and numerical simulation," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 132, p. 331–346, 2019.

[124] Y. Demirel, R. Sharma et H. Al-Ali, "On the effective heat transfer parameters in a packed bed," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 43, n°. 2, p. 327–332, 2000.

[125] Y. Liang et X. Li, "A new model for heat transfer through the contact network of randomly packed granular material," *Applied Thermal Engineering*, vol. 73, n°. 1, p. 984–992, 2014.

[126] C. T. Hsu, P. Cheng et K. W. Wong, "A lumped-parameter model for stagnant thermal conductivity of spatially periodic porous media," *Journal of Heat Transfer*, vol. 117, n°. 2, p. 264–269, 1995.

[127] R. Bauer et E. Schlünder, "Part i : Effective radial thermal conductivity of packings in gas flow. part ii : Thermal conductivity of the packing fraction without gas flow." *Internation Chemical Engineering*, vol. 18, p. 189–204, 1978.

[128] A. B. Duncan, G. P. Peterson et L. S. Fletcher, "Effective thermal conductivity within packed beds of spherical particles," *Journal of Heat Transfer*, vol. 111, n°. 4, p. 830–836, 1989.

[129] T. Tsory, N. Ben-Jacob, T. Brosh et A. Levy, "Thermal dem–cfd modeling and simulation of heat transfer through packed bed," *Powder Technology*, vol. 244, p. 52–60, 2013.

[130] M. Yovanovich, G. Schneider et C. Tien, "Thermal resistance of hollow spheres subjected to arbitrary flux over their poles," 1978.

[131] M. M. Yovanovich, "Thermal contact resistance across elastically deformed spheres," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 4, n°. 1, p. 119–122, 1967.

[132] J. Sun et M. M. Chen, "A theoretical analysis of heat transfer due to particle impact," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 31, n°. 5, p. 969–975, 1988.

[133] W. O. Ho, "Measurement of thermal accommodation coefficients of steel surfaces," Thèse de doctorat, Missouri University of Science and Technology, 1970.

[134] J. Martis et R. K. Annabattula, "A semi-analytical model for the effective thermal conductivity of a multi-component polydisperse granular bed," *Granular Matter*, vol. 19, n°. 4, p. 84, 2017.

[135] L. H. Tanner et M. Fahoum, "A study of the surface parameters of ground and lapped metal surfaces, using specular and diffuse reflection of laser light," *Wear*, vol. 36, n°. 3, p. 299–316, 1976.

[136] V. W. Antonetti, T. D. Whittle et R. E. Simons, "An approximate thermal contact conductance correlation," *Journal of Electronic Packaging*, vol. 115, n°. 1, p. 131–134, 1993.

[137] M. A. Lambert et L. S. Fletcher, "Thermal contact conductance of spherical rough metals," *Journal of Heat Transfer*, vol. 119, n°. 4, p. 684–690, 1997.

[138] M. Bahrami, "Modeling of thermal joint resistance for sphere-flat contacts in a vacuum," Thèse de doctorat, University of Waterloo, 2004.

[139] G. Cheng et A. Yu, "Particle scale evaluation of the effective thermal conductivity from the structure of a packed bed : radiation heat transfer," *Industrial and engineering chemistry research*, vol. 52, n°. 34, p. 12 202–12 211, 2013.

[140] C.-D. Wen et I. Mudawar, "Experimental investigation of emissivity of aluminum alloys and temperature determination using multispectral radiation thermometry (mrt) algorithms," *Journal of Materials Engineering and Performance*, vol. 11, n°. 5, p. 551–562, 2002.

[141] E. Hütter et N. Kömle, "Determination of the radiative contribution to the effective thermal conductivity of a granular medium under vacuum conditions," dans *5th European Thermal-Sciences Conference*, 2008, p. 8.

[142] Optotherm, "Emissivity in the infrared (optotherm thermal imaging)," 2018.

[143] P. Kosky, R. Balmer, W. Keat et G. Wise, "Chapter 12 - mechanical engineering," dans *Exploring Engineering (Third Edition)*, P. Kosky, R. Balmer, W. Keat et G. Wise, édit. Boston : Academic Press, 2013, p. 259–281.

[144] M. Bahrami, J. R. Culham, M. M. Yovanovich et G. E. Schneider, "Review of thermal joint resistance models for non-conforming rough surfaces in a vacuum," dans *ASME 2003 Heat Transfer Summer Conference*, vol. Heat Transfer : Volume 3, 2003, p. 411–431.

[145] A. Gujrati, S. R. Khanal, L. Pastewka et T. D. B. Jacobs, "Combining tem, afm, and profilometry for quantitative topography characterization across all scales," *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 10, n°. 34, p. 29 169–29 178, 2018.

[146] A. I. Nafsun, F. Herz, E. Specht, V. Scherer et S. Wirtz, "Heat transfer experiments in a rotary drum for a variety of granular materials," *Experimental Heat Transfer*, p. 1–16, 2016.

[147] H. N. Emady, K. V. Anderson, W. G. Borghard, F. J. Muzzio, B. J. Glasser et A. Cuitino, "Prediction of conductive heating time scales of particles in a rotary drum," *Chemical Engineering Science*, vol. 152, p. 45–54, 2016.

[148] H. Liu, H. Yin, M. Zhang, M. Xie et X. Xi, "Numerical simulation of particle motion and heat transfer in a rotary kiln," *Powder Technology*, 2015.

[149] Q. Wang, B. Liu et Z. Wang, "Investigation of heat transfer mechanisms among particles in horizontal rotary retorts," *Powder Technology*, vol. 367, p. 82–96, 2020.

[150] D. A. Santos, C. R. Duarte et M. A. S. Barrozo, "Segregation phenomenon in a rotary drum : Experimental study and cfd simulation," *Powder Technology*, vol. 294, p. 1–10, 2016.

[151] C. Beaulieu, D. Vidal, C. Niyonkuru, A. Wachs, J. Chaouki et F. Bertrand, "Effect of particle angularity on flow regime transitions and segregation of bidisperse blends in a rotating drum," *Computational Particle Mechanics (submitted)*, 2020.

[152] D. Oliver et D. Clarke, "Some experiments on packed-bed drying," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, vol. 187, nº. 1, p. 515–521, 1973.

[153] C. Beaulieu, D. Vidal, B. Yari, J. Chaouki et F. Bertrand, "Effect of surface roughness on heat transfer through spherical particle beads," *Chemical Engineering Science (submitted)*, 2020.

[154] M. Yamamoto, S. Ishihara et J. Kano, "Evaluation of particle density effect for mixing behavior in a rotating drum mixer by dem simulation," *Advanced Powder Technology*, vol. 27, nº. 3, p. 864–870, 2016.

[155] M. Lemieux, F. Bertrand, J. Chaouki et P. Gosselin, "Comparative study of the mixing of free-flowing particles in a v-blender and a bin-blender," *Chemical Engineering Science*, vol. 62, nº. 6, p. 1783–1802, 2007.

[156] D. Vidal, X. Zou et T. Ijesaka, "Modeling coating structure development using a monte carlo deposition method. part 2 : validation of the model and case study," *Tappi journal (2002)*, vol. 2, nº. 5, p. 16–20, 2003.

[157] G. G. Pereira, M. D. Sinnott, P. W. Cleary, K. Liffman, G. Metcalfe et I. D. Šutalo, "Insights from simulations into mechanisms for density segregation of granular mixtures in rotating cylinders," *Granular Matter*, vol. 13, nº. 1, p. 53–74, 2011.

[158] Z. Deng, P. B. Umbanhowar, J. M. Ottino et R. M. Lueptow, "Continuum modelling of segregating tridisperse granular chute flow," *Proceedings. Mathematical, physical, and engineering sciences*, vol. 474, nº. 2211, p. 20 170 384–20 170 384, 2018.

[159] D. V. Khakhar, A. V. Orpe et J. M. Ottino, "Continuum model of mixing and size segregation in a rotating cylinder : concentration-flow coupling and streak formation," *Powder Technology*, vol. 116, nº. 2, p. 232–245, 2001.

[160] M. Combarros Garcia, H. J. Feise, S. Strege et A. Kwade, "Segregation in heaps and silos : Comparison between experiment, simulation and continuum model," *Powder Technology*, vol. 293, p. 26–36, 2016.

[161] Y. J. Li, A. Dove, J. S. Curtis et J. E. Colwell, "3d dem simulations and experiments exploring low-velocity projectile impacts into a granular bed," *Powder Technology*, vol. 288, p. 303–314, 2016.

[162] B. Alchikh-Sulaiman, M. Alian, F. Ein-Mozaffari, A. Lohi et S. R. Upreti, "Using the discrete element method to assess the mixing of polydisperse solid particles in a rotary drum," *Particuology*, vol. 25, p. 133–142, 2016.

[163] R. Chand, S. V. Muniandy, C. S. Wong et J. Singh, “Discrete element method study of shear-driven granular segregation in a slowly rotating horizontal drum,” *Particuology*, vol. 32, p. 89–94, 2017.

[164] T. Barczi, M. Kohout, M. Kozakovic, J. Havlica et C. Ratnayake, “Discrete element method simulation and experimental validation of pattern development in a rotating drum mixer,” *Chemical Engineering & Technology*, vol. 41, n°. 8, p. 1524–1530, 2018.

[165] G. G. Pereira, N. Tran et P. W. Cleary, “Segregation of combined size and density varying binary granular mixtures in a slowly rotating tumbler,” *Granular Matter*, vol. 16, n°. 5, p. 711–732, 2014.

[166] Z. Zhang, N. Gui, L. Ge et Z. Li, “Numerical study of mixing of binary-sized particles in rotating tumblers on the effects of end-walls and size ratios,” *Powder Technology*, 2016.

[167] U. D’Ortona, N. Thomas et R. M. Lueptow, “Influence of rough and smooth walls on macroscale granular segregation patterns,” *Physical Review E*, vol. 93, n°. 2, 2016.

[168] R. Maione, S. Kiesgen De Richter, G. Mauviel et G. Wild, “Dem investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler : Influence of particle shape and internal baffles,” *Powder Technology*, vol. 286, p. 732–739, 2015.

[169] A. D. Rakotonirina et A. Wachs, “Grains3d, a flexible dem approach for particles of arbitrary convex shape - part ii : Parallel implementation and scalable performance,” *Powder Technology*, vol. 324, p. 18–35, 2018.

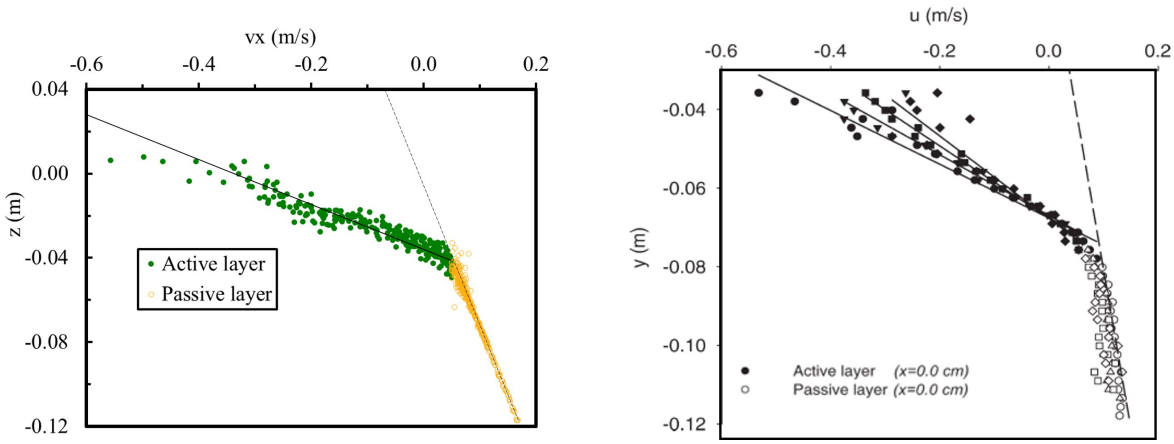
[170] A. Džiugys et B. Peters, “An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers,” *Granular Matter*, vol. 3, n°. 4, p. 231–266, 2001.

[171] N. Gui, X. Yang, J. Tu, S. Jiang et Z. Zhang, “Numerical simulation of tetrahedral particle mixing and motion in rotating drums,” *Particuology*, vol. 39, p. 1–11, 2018.

ANNEXE A VÉRIFICATION ET VALIDATION SUPPLÉMENTAIRES DU CODE LIGGGHTS

En dynamique Les équations de la DEM implémentées dans LIGGGHTS ont déjà été éprouvées et vérifiées par bon nombre d'utilisateurs. C'est l'un des avantages d'utiliser une plateforme libre d'accès. Lorsque des erreurs sont trouvées par des utilisateurs, le code est mis à jour et tout le monde peut en bénéficier.

Au début de ce projet néanmoins, nous avons validé les résultats de LIGGGHTS en dynamique en comparant les profils de vitesse de particules dans un cylindre rotatif avec les résultats expérimentaux obtenus par M. Ebrahim Alizadeh qui avait utilisé la méthode de suivi de particules radioactives (RPT - *Radioactive Particle Tracking*) lors de son doctorat à Polytechnique Montréal [8].



(a) (b)

Figure A.1 Validation du module de DEM de LIGGGHTS en dynamique en comparant les profils de vitesse obtenus dans un cylindre rotatif de 24 cm de diamètre obtenus par LIGGGHTS (a) avec les profils obtenus dans un cylindre de mêmes dimensions à l'aide de la méthode de suivi de particules radioactives (b). Le graphique en (b) est adapté de [8]

La très grande similarité des profils de vitesse obtenus entre les Figures A.1(a) et A.1(b) nous ont donné confiance au code LIGGGHTS dès le début du projet pour le volet dynamique.

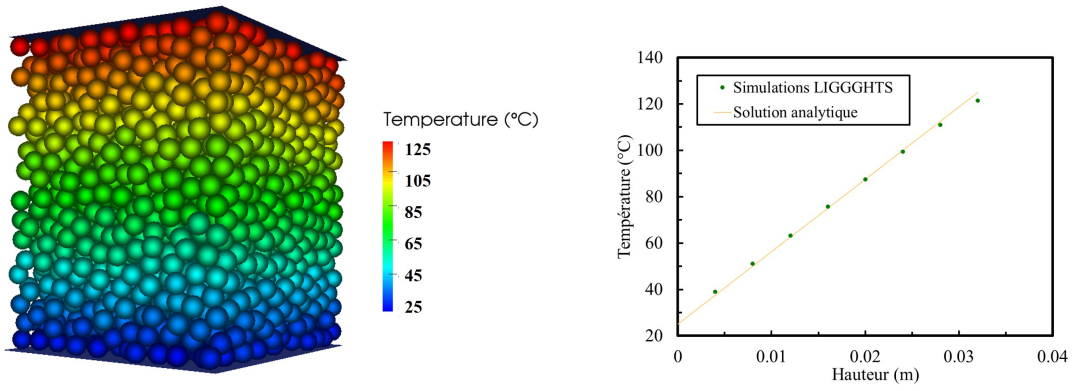
En thermique En régime permanent et dans l'absence de source de chaleur supplémentaire, la solution du bilan de chaleur en 1D dans un élément de volume est l'équation linéaire

suivante :

$$T = Az + B \tag{A.1}$$

où z est la direction dans laquelle s'applique le flux de chaleur, et A et B sont des constantes pouvant être déterminées grâce aux conditions frontières.

Afin de vérifier si notre code de TDEM implémenté dans LIGGGHTS répond bien au transfert de chaleur, nous pouvons comparer le profil de température obtenu dans un empilement de particules en régime permanent avec la solution analytique, comme illustré à la Figure A.2.



(a) (b)

Figure A.2 Vérification de notre modèle de TDEM en régime permanent implémenté dans LIGGGHTS.

L'accord entre les points numériques et la solution analytique calculée avec les conditions frontières de température (25°C pour la plaque du bas et 125°C pour la plaque du haut) nous confirme que le bilan de chaleur est bien implémenté.

ANNEXE B CALCUL DE LA CONDUCTIVÉ THERMIQUE EFFECTIVE EN TRANSITOIRE

Dans l'Article 1 (Chapitre 5), nous calculons la conductivité thermique effective (k_e) de différents lits de particules de deux manières différentes : en régime transitoire et en régime permanent. La méthode en régime permanent est détaillée dans l'article et est utilisée pour générer tous les résultats numériques de la Figure 5.14. Cependant, les valeurs de k_e présentées dans le Tableau 5.10 (pour nos données expérimentales et leurs penchants numériques) sont obtenues à l'aide d'une méthode transitoire. Nous avons sélectionné cette méthode étant donné que notre montage expérimental était trop grand et aurait nécessité des temps d'environ 40 heures pour atteindre le régime permanent. Sur ces échelles de temps, les faibles fuites de chaleur à travers les murs de styromousse viennent influencer les valeurs de température mesurées au centre de l'entassement granulaire. Toutefois, afin de ne pas alourdir le texte de l'Article 1, qui est déjà consistant, nous avons préféré renvoyer le lecteur intéressé au travail de Nozad et al. [108], d'où cette méthodologie est inspirée. Nous la présentons ici en détail.

Dans l'intervelle de temps que durent nos expériences (4000 s) et au milieu du lit de particules, nous considérons que le flux de chaleur est unidirectionnel dans la direction Z, étant donné l'isolation de styromousse appliquée sur les côtés (Figure 5.7(b)). Le bilan de chaleur par conduction en régime transitoire est donc :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_e \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{B.1}$$

Dans notre cas, nous voulons comparer notre solution à la solution analytique transitoire du chauffage d'une dalle semi-infinie qui est donnée dans [81]. Pour nous assurer que nous respectons les conditions de cette situation, nous avons mesuré pour ces expériences la température des billes près du fond de la boîte et la température à l'intérieur de la plaque d'aluminium au fond de la boîte. Aussi longtemps que ces deux thermocouples demeuraient à la même température, qui était la température initiale, nous estimons que la distance de pénétration thermique se limite à la moitié supérieure de la boîte expérimentale et qu'ainsi, la comparaison avec une dalle semi-infinie est valable. Cette solution analytique est donc :

$$\Theta = \frac{T - T_0}{T_b - T_0} = 1 - erf\left(\frac{z}{\sqrt{4\alpha_e t}}\right) \tag{B.2}$$

avec la condition initiale et les conditions frontières :

$$T|_z = T_0 \text{ when } t \leq 0 \tag{B.3}$$

$$T|_{z=0} = T_0 \text{ for } t > 0 \tag{B.4}$$

$$T|_{z=h} = T_b \text{ for } t > 0 \tag{B.5}$$

$$\tag{B.6}$$

où h est la hauteur de la boîte, ici égale à 0.20 m, et $\alpha_e = \frac{k_e}{C_p \rho_e}$.

Le fait d'appliquer une température constante comme condition frontière au haut de la boîte plutôt qu'un flux de chaleur constant permet en fait de linéariser la solution analytique et d'ainsi éviter des difficultés de convergence numériques [109]. Ces difficultés peuvent provenir du fait que les valeurs de α ($\approx 10^{-7}$), k et C sont toutess d'ordres de grandeur très différents. Ainsi, l'Équation B.2 peut être linéarisée afin d'obtenir :

$$erf^{-1}(1-\Theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{\alpha_e}}\right)\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right) \tag{B.7}$$

Finalement, en traçant $erf^{-1}(1-\Theta)$ en fonction de $\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right)$ pour différentes hauteurs z (notées h_1, h_2 et h_3 dans les graphiques de la Figure 5.12), la pente de chaque courbe donne $\left(\frac{1}{\sqrt{\alpha_e}}\right)$. À partir de cette pente, nous pouvons extraire la valeur de k_e, sachant que $\rho_e = \rho_p(1-\epsilon) + \rho_f \epsilon$. Un exemple de cette méthodologie est illustré à la Figure B.1. Les pentes pouvaient être légèrement différentes entre les trois thermocouples, et nous pensons que cela est dû au fait que nos mélanges granulaires n'étaient pas parfaitement homogènes dans la direction des Z. Chaque tranche entre chaque thermocouple pouvait contenir des différences au niveau du réseau de contacts entre les particules, ce qui, selon nous, engendre de légères variations dans la pente obtenue. Cela explique également pourquoi nous avons choisi de mesurer la température à trois hauteurs différentes et d'utiliser une pente moyenne pour calculer la conductivité thermique effective k_e du lit granulaire.

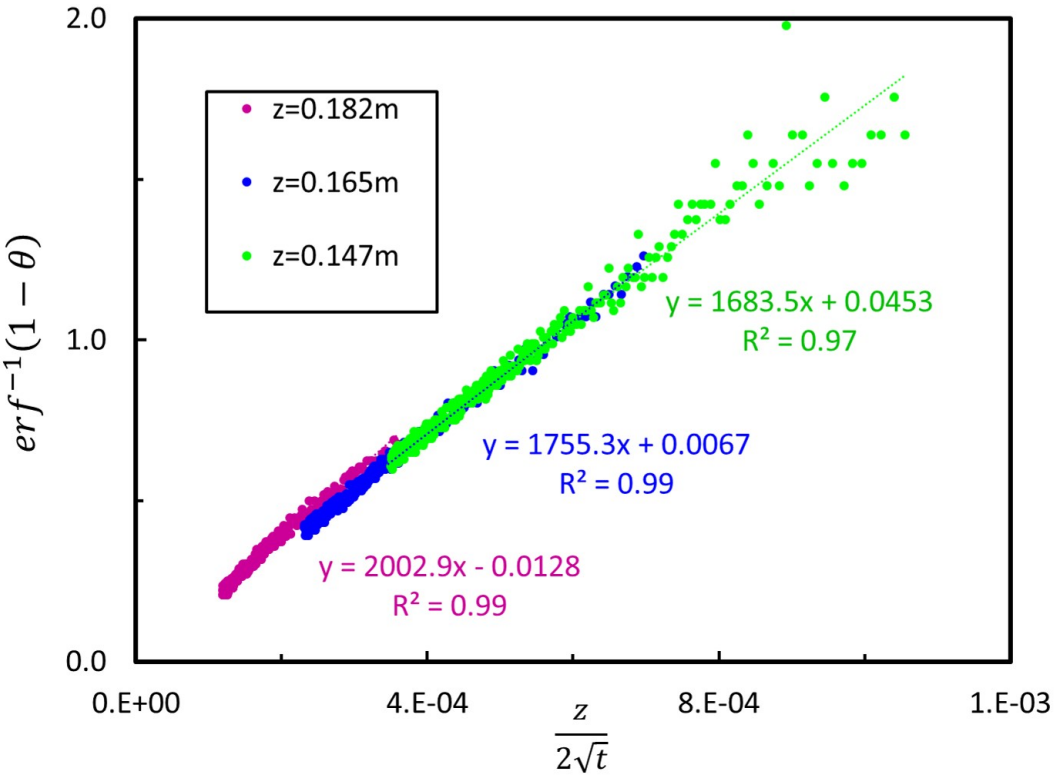


Figure B.1 Afin de calculer la conductivité thermique effective d'un lit de particules à partir de l'évolution des températures en temps à trois hauteurs différentes, nous avons linéarisé la solution analytique du chauffage d'une dalle semi-infinie et avons extrait la valeur de k_e des pentes de ce graphique.

ANNEXE C DEM AND TDEM MODELS (CHAPITRE 6)

In DEM, the position, velocity and angular velocity of all particles in the system are tracked over time using Newton's second law of motion. For a particle i, it gives, for the translation and rotation, respectively :

$$m_i \frac{d\mathbf{v_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{F_{c,ij}} + \sum_k \mathbf{F_{nc,ik}} + \mathbf{F_{g,i}} + \mathbf{F_{i,f}} \tag{C.1}$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega_i}}{dt} = \sum_j \mathbf{T_{ij}} \tag{C.2}$$

where j is a neighboring particle and m_i, $\mathbf{v_i}$, I_i and ω_i are the particle mass, velocity, moment of inertia and angular velocity, respectively. In this study, we only consider the contact forces $\mathbf{F_{c,ij}}$, the gravity force $\mathbf{F_{g,i}}$ and the torque $\mathbf{T_{ij}}$. The non-contact forces $\mathbf{F_{nc,ik}}$ and the forces of interaction with a surrounding fluid, $\mathbf{F_{i,f}}$, are neglected because the particles are large enough and in a stagnant gas. The angular velocity $\boldsymbol{\omega_i}$ is also slowed down by a rolling resistance [153]. The simplest rolling resistance torque model, which is used here, reads as :

$$\mathbf{T_{ij}} = -\mu_r \mid \mathbf{F^n_{c,ij}} \mid r^* \frac{\omega_{\mathbf{ij}}}{\mid \omega_{\mathbf{ij}} \mid} \tag{C.3}$$

where μ_r is the rolling friction coefficient of the material, $r^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j}$ is the reduced radius and $\omega_{\mathbf{ij}}$ is the relative angular velocity $\omega_{\mathbf{ij}} = \omega_{\mathbf{i}} - \omega_{\mathbf{j}}$.

Following Blais et al. [52] and our previous work where a more detailed definition of the model can be found [153], a general expression for the contact force between two particles i and j can be approximated by a spring and dashpot assembly and expressed as :

$$\mathbf{F_{c,ij}} = \underbrace{\left(k_{n,ij} \left|\left|\delta_{\mathbf{n,ij}}\right|\right|^a \delta_{\mathbf{n,ij}} - \gamma_{n,ij} \left|\left|\delta_{\mathbf{n,ij}}\right|\right|^b \mathbf{v_{n,ij}}\right)}_{\mathbf{F^n_{c,ij}}} + \underbrace{\left(k_{t,ij} \left|\left|\delta_{\mathbf{n,ij}}\right|\right|^c \delta_{\mathbf{t,ij}} - \gamma_{t,ij} \left|\left|\delta_{\mathbf{n,ij}}\right|\right|^d \mathbf{v_{t,ij}}\right)}_{\mathbf{F^t_{c,ij}}} \tag{C.4}$$

$$\mathbf{F^t_{c,ij}} \leq \mu_C \mid \mathbf{F^n_{c,ij}} \mid \tag{C.5}$$

where $\mathbf{F^n_{c,ij}}$ and $\mathbf{F^t_{c,ij}}$ are the normal and tangential components of the contact force, $k_{n,ij}$ and $\gamma_{n,ij}$ are the normal spring and dashpot coefficients, $k_{t,ij}$ and $\gamma_{t,ij}$ are the tangential spring and dashpot coefficients, $\delta_{\mathbf{n,ij}}$ and $\delta_{\mathbf{t,ij}}$ are the normal and tangential overlaps, $\mathbf{v_{n,ij}}$ and $\mathbf{v_{t,ij}}$ are the normal and tangential relative velocities (which are expressed as derivatives of the

overlaps with respect to time), and μ_C is the Coulomb friction coefficient. In this study, the exponents a, b, c, and d are set to 1/2, 1/4, 1/2 and 1/4, respectively, which corresponds to the Hertz model. The description of the coefficients used in the formulation of the contact force within the Hertz model are taken from our previous work [153] and presented in Table C.1.

Our TDEM model considers rough spherical particles and includes several heat transfer mechanisms between every pair of touching particles. In each of these pathways, conduction in the solid and gas phases is considered, resulting in various thermal resistances along the way that are summarized in Table 6.1. In these definitions, two important parameters are the thermal overlap $\delta_{n,th}$ and the thermal contact radius a. The thermal overlap is obtained using the dynamical overlap $\delta_{n,d}$, which is calculated by LIGGGHTS, and a correction factor c to account for the real Young's modulus of the particles ($\delta_{n,th} = \delta_{n,d} \cdot c$) [85,86,94,104,132]. This correction factor is defined as :

$$c = \left(\frac{Y^*}{Y_0^*} \right)^{2/3} \tag{C.6}$$

$$\tag{C.7}$$

and the complete approach to calculate the contact radius a is given in [89, 153]. All other parameters used to calculate each resistance are presented in Table C.2.

With all the resistance values (Table 6.1) and the thermal contact network illustrated in Figure 6.1(b), we can calculate the total heat conductance H_{ij} as the inverse of the total contact resistance R_{ij}, as follows :

$$H_{ij} = \frac{1}{R_{ij}} \tag{C.8}$$

with

$$R_{ij} = \left[\frac{1}{R_{L,i} + \left(\frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_g} \right)^{-1} + R_{L,j}} + \frac{1}{R_{c,i} + R_G + R_{c,j}} \right]^{-1} \tag{C.9}$$

At the wall, the same definitions apply, except that $R_{G,w} = R_G/2$ and the total global heat resistance becomes :

$$R_{ij,w} = \left[\frac{1}{R_{L,i} + \left(\frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_g} \right)^{-1}} + \frac{1}{R_{c,i} + R_{G,w}} \right]^{-1} \tag{C.10}$$

Tableau C.1 DEM parameters.

Parameter	**Symbol**	**Units**	**Definition**
Normal elastic stiffness	k_n	Pa.m	$\frac{4}{3}Y^*\sqrt{r^*}$
Normal viscoelastic damping	γ_n	$(\mathrm{Pa}^{1/2}\mathrm{kg}^{3/4})$	$-\sqrt{5}\frac{ln(e)}{\sqrt{ln^2(e)+\pi^2}}\sqrt{k_n m^*} \geq 0$
Tangential elastic stiffness	k_t	Pa.m	$8G^*\sqrt{r^*}$
Tangential viscoelastic damping	γ_t	$(\mathrm{Pa}^{1/2}\,\mathrm{kg}^{3/4})$	$-2\sqrt{\frac{5}{6}}\frac{ln(e)}{\sqrt{ln^2(e)+\pi^2}}\sqrt{k_t m^*} \geq 0$
Equivalent Young's modulus	$\frac{1}{Y^*}$	Pa^{-1}	$\frac{\left(1-\nu_i^2\right)}{Y_i} + \frac{\left(1-\nu_j^2\right)}{Y_j}$
Equivalent original Young's modulus	$\frac{1}{Y_0^*}$	Pa^{-1}	$\frac{\left(1-\nu_i^2\right)}{Y_{0,i}} + \frac{\left(1-\nu_j^2\right)}{Y_{0,j}}$
Equivalent shear modulus	$\frac{1}{G^*}$	Pa^{-1}	$\frac{2(2-\nu_i)(1+\nu_i)}{Y_i} + \frac{2(2-\nu_j)(1+\nu_j)}{Y_j}$
Equivalent radius	$\frac{1}{r^*}$	m^{-1}	$\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j}$
Equivalent mass	$\frac{1}{m^*}$	kg^{-1}	$\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$

Tableau C.2 Thermal resistance model parameters.

Parameter	**Symbol**	**Units**	**Definition**
Characteristic length parallel to the heat flux	L_s	m	$\frac{r_i \arcsin(1)}{2}$
Characteristic area perpendicular to the heat flux	A_s	m^2	$\pi(r_i^2 - a^2)$
Equivalent microhardness	W^*	Pa^{-1}	$min(W_i, W_j)$
Equivalent surface roughness	σ	m	$\sqrt{\sigma_i^2 + \sigma_j^2}$
Equivalent surface slope	τ	(-)	$\sqrt{\tau_i^2 + \tau_j^2}$
Equivalent particle conductivity	k_s	$Wm^{-1}K^{-1}$	$\frac{2k_i k_j}{k_i + k_j}$
Gas parameter	M	m	$\left(\frac{2-\alpha_{T_i}}{\alpha_{T_i}} + \frac{2-\alpha_{T_j}}{\alpha_{T_j}}\right)\left(\frac{2\gamma_g}{1+\gamma_g}\right)\left(\frac{\Lambda}{Pr}\right)$
Inverse error function 1	a_1	(-)	$erfc^{-1}\left(\frac{2P_0}{W^*}\right)$
Inverse error function 2	a_2	(-)	$erfc^{-1}\left(\frac{0.03P_0}{W^*}\right) - a_1$
Maximum pressure	P_0	Pa	$\frac{2Y_0^* \delta_n}{\pi a}$
Molecular mean free path	Λ	m	68×10^{-9} (assumed constant here)
Gas Prandtl number	Pr	(-)	$\frac{\mu_f C_f}{k_f}$
Gas specific heat ratio	γ_g	(-)	1 (hypothesis that there is only one gas)
Thermal accommodation coefficients	$\alpha_{T_i} = \alpha_{T_j}$	(-)	0.7 (from [133])
Gas parameter	N	m	$2\left(r_{hm} - \zeta\right) + M$
Radius ratio	ζ	(-)	$\frac{a^2}{2r_{hm}}$
Geometrical parameter	A	m	$2\sqrt{r_{hm}^2 - a^2}$
Geometrical parameter	B	m	0 for SC packing (hypothesis here)