HAL
open science

Modélisation des matériaux à particules hautement déformables

Saeid Nezamabadi, Farhang Radjai, Julien Averseng, Jean-Yves Delenne

To cite this version:

Saeid Nezamabadi, Farhang Radjai, Julien Averseng, Jean-Yves Delenne. Modélisation des matériaux à particules hautement déformables. 12e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2015, Giens, France. hal-01516449

HAL Id: hal-01516449

https://hal.science/hal-01516449v1

Submitted on 1 May 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CSMA 2015
12e Colloque National en Calcul des Structures
18-22 Mai 2015, Presqu'île de Giens (Var)

Modélisation des matériaux à particules hautement déformables

S. Nezamabadi[1], F. Radjaï[1], J. Averseng[1],
J.Y. Delenne[2]

[1] *LMGC, Université Montpellier, {saeid.nezamabadi, franck.radjai, julien.averseng}@univ-montp2.fr*
[2] *IATE, INRA, Université Montpellier, jean-yves.delenne@univ-montp2.fr*

Résumé — Dans le but de modéliser les matériaux à particules molles comme les microgels et les suspensions, nous présentons une approche numérique basée sur une formulation implicite de la Méthode des Points Matériel couplée avec la méthode de Dynamique des Contacts pour le traitement des contacts frottants entre les particules. Nous utilisons ce modèle pour analyser la compaction d'un assemblages 2D de particules déformables.
Mots clés — Méthode des points matériels, Dynamique des contacts, Matériaux granulaires, Systèmes à particules molles.

1 Introduction

Les matériaux à particules hautement déformables intéressent de nombreux domaines tels que les cosmétiques, la chimie, la pharmacie, l'agroalimentaire... Il peut s'agir par exemple de pâtes colloïdales, de vésicules, de microgels ou de suspensions. Ces matériaux sont composés de particules élémentaires individuelles qui peuvent subir de grandes déformations sans rupture. À cet égard, ils diffèrent des matériaux à particules rigides dont le comportement plastique est essentiellement dicté par leur réarrangement. Dans le cas de particules molles l'adaptation de leur forme sous chargement favorise un meilleur remplissage de l'espace et modifie leurs propriétés d'assemblage (voir par exemple [1]). La compaction, le comportement en cisaillement et les propriétés de textures complexes des assemblages de particules molles au-delà de l'état "jamming" restent peu explorés à ce jour en raison de l'absence d'outils numériques et expérimentaux appropriés.

La méthode aux éléments discrets (DEM) est largement utilisée pour la modélisation des assemblages de particules en raison de sa capacité à prendre en compte leur distribution de taille, les propriétés physiques de contact et de frottement ainsi que des conditions complexes de chargement (voir par exemple [2, 3]). Cependant, la DEM n'est pas adaptée à la simulation d'un comportement réaliste à l'échelle sub-particulaire, notamment en grandes déformations. Pour modéliser les propriétés mécaniques de particules molles ainsi que leurs interactions mutuelles, une nouvelle méthodologie est proposée. Celle-ci est basée sur une formulation implicite de la Méthode des Points Matériels (MPM) couplée avec la méthode de Dynamique des Contacts (DC) [4]. Dans cette approche, chaque particule est discrétisée en un ensemble de points matériels. A chaque pas de temps, l'information portée par ces points est projetée sur un maillage sous-jacent, dans lequel sont résolues les équations du mouvement. Cette solution est ensuite utilisée pour mettre à jour les informations associées aux points matériels. Le schéma implicite mis en œuvre permet une stabilité numérique inconditionnelle ainsi qu'un couplage efficace avec la résolution des contacts et du frottement. Un point important consiste à déterminer les variables entrant en jeu dans le calcul des contacts en même temps que celles associées au comportement volumique.

2 Approche numérique

2.1 Méthode des points matériels

Considérons un domaine Ω dans $\mathbb{R}^D$, D étant la dimension de domaine, avec un bord extérieur $\partial\Omega$, décrivant un corps continu. La conservation de sa masse et de sa quantité de mouvement peuvent être

définies par les équations suivantes :

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x},t)\,\mathbf{v}(\mathbf{x},t)) = 0 \quad \text{dans } \Omega \,, \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \sigma(\mathbf{x},t) + \mathbf{b}(\mathbf{x},t) = \rho(\mathbf{x},t)\,\mathbf{a}(\mathbf{x},t) \quad \text{dans } \Omega \,, \tag{2}$$

où $\rho(\mathbf{x},t)$ est la densité du matériau, $\mathbf{v}(\mathbf{x},t)$ est la vitesse, $\sigma(\mathbf{x},t)$ est le tenseur des contraintes de Cauchy, $\mathbf{b}(\mathbf{x},t)$ représente la force volumique et $\mathbf{a}(\mathbf{x},t)$ est l'accélération à la position $\mathbf{x}$ et au temps t. Notons que la méthode MPM permet d'implémenter n'importe quel type de loi de comportement (élastique ou inélastique).

Dans le cadre de la MPM, le corps est divisé en N_p points matériels représentant une quantité de matière fixe, permettant de satisfaire la relation de conservation de la masse (1). En outre, de manière similaire à la méthode des éléments finis, ces points servent de points d'intégration sur le volume dans une formulation faible utilisant une fonction de Dirac. De ce fait, la densité est discrétisée pour un élément sous la forme suivante :

$$\rho(\mathbf{x},t) = \sum_{p=1}^{N_p} \rho_p\, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p(t)) \,, \tag{3}$$

où ρ_p et $\mathbf{X}_p(t)$ représentent la densité et la position d'un point matériel, respectivement, et δ est la fonction de Dirac. Notons que la densité des points matériels est égale à $\rho_p = m_p/V_p$, rapport de la masse m_p sur le volume V_p associé au point matériel. Ainsi, en présence de contacts entre les corps, la forme faible de l'équation du mouvement (2) sous la forme discrétisée peut s'écrire :

$$\mathbf{M}\,\mathbf{a}_{\text{nodal}}(t) = \mathbf{F}^{\text{int}}(t) + \mathbf{F}^{\text{ext}}(t) + \mathbf{F}^{\text{C}}(t) \,, \tag{4}$$

où $\mathbf{a}_{\text{nodal}}$ est l'accélération nodale, $\mathbf{F}^{\text{C}}$ est la force de contact (voir ci-dessous), $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ représente la force extérieure appliquée, et :

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} m_p\, \mathbf{N}_p \qquad \text{matrice de masse nodale} \,, \tag{5}$$

$$\mathbf{F}^{\text{int}} = -\sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{G}_p\, \sigma_p\, V_p \quad \text{vecteur de la force intérieure} \,. \tag{6}$$

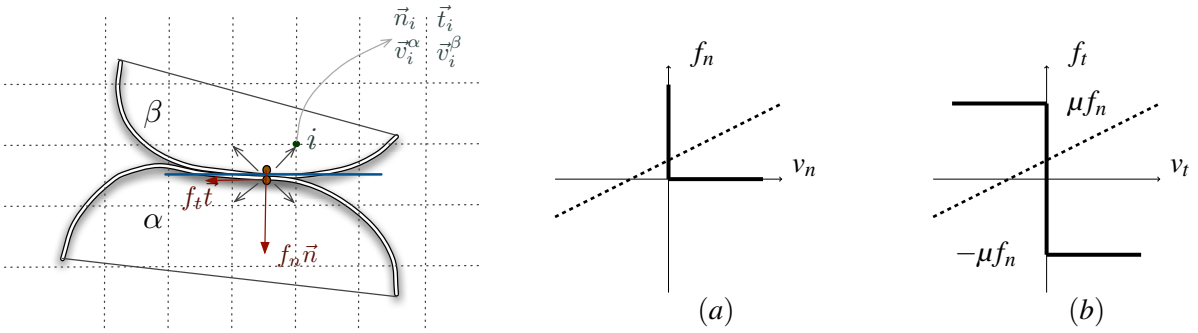
Dans les équations (5) et (6), $\mathbf{N}_p$ et $\mathbf{G}_p$ représentent respectivement la matrice et le gradient de la fonction de forme. Afin de résoudre le problème (4), nous considérons une approche implicite dans le cadre de la MPM proposée par Gilkey et al. [5]. Les solutions nodales ensuite sont projetées sur les points matériels, ce qui permet de mettre à jour l'information portée par ces points.

2.2 Dynamique des contacts

Pour étudier un assemblage de grains déformables, les forces de contact $\mathbf{F}^{\text{C}}$ entre les grains nécessitent d'être calculées à l'aide d'un algorithme de contact prenant en compte la condition de non-interpénétration de la matière ainsi que la loi de frottement de Coulomb. Dans le cas des grains rigides, la méthode de Dynamique des Contacts (DC) est une approche implicite pour le traitement des contacts frottants sans régularisation. Les descriptions détaillées des fondements et des aspects algorithmiques de cette méthode peuvent être trouvées dans la littérature (voir par exemple [2]). Comme nous utilisons un schéma implicite pour l'implémentation de la MPM, la méthode DC est un choix naturel pour le traitement des points de contact. Cependant, contrairement à des particules parfaitement rigides, la méthode de résolution doit être adaptée aux grains discrétisées en points matériels. De ce fait, dans la MPM, un algorithme de contact multi-maillage est développé pour implémenter des lois de contact tels que la loi de frottement de Coulomb ou des lois d'adhésion au niveau des points de contact [6]. Dans ce modèle, les variables de contact sont calculées en même temps que celles associées au comportement volumique.

Considérons deux grains déformables (α et β) ; voir la figure 1A. Dans le cadre de l'algorithme multi-maillage, un maillage de fond approprié à chaque grain est défini. Un point de contact à l'interface entre les deux grains peut être traité par l'introduction d'un maillage de fond commun avec le même

type de grille pour le transfert de quantités nodales de maillages appropriés au maillage commun. Les points de contact entre les grains α et β sont traités au niveau des noeuds voisins appartenant au maillage de fond commun. Leurs valeurs nodales impliquent des contributions des deux grains. À un noeud de contact potentiel i, un vecteur normal unité $\mathbf{n}_i$, orienté du grain β vers le grain α, et un vecteur tangentiel unité $\mathbf{t}_i$ sont définis [6] . Tant que la vitesse relative normale $v_n = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{n}_i$ reste positive, rien ne se passe. Mais quand $v_n = 0$, une force normale répulsive f_n est mobilisée au niveau du noeud de contact. Ces conditions définissent la condition de Signorini en vitesse comme le montre la figure 1B(a) [2]. D'autre part, en combinant les équations du mouvement $\mathbf{P}^\alpha_{\text{nodal}} = \mathbf{M}^\alpha \mathbf{v}^\alpha_{\text{nodal}}$ et $\mathbf{P}^\beta_{\text{nodal}} = \mathbf{M}^\beta \mathbf{v}^\beta_{\text{nodal}}$ au noeud commun, on obtient une relation linéaire $f_n = M_n v_n + k_n$, où M_n est la masse réduite et k_n représente une force compensée dépendant d'autres forces de contact à ce noeud. Les forces normales à tous les noeuds de contact sont obtenues par une procédure itérative en intersectant cette relation linéaire avec le graphe de Signorini, comme le montre la figure 1B(a).



(A) (B)

FIGURE 1 – (A) Schéma de l'algorithme de contact multi-maillage dans la MPM ; (B) Conditions de contact : (a) Condition de Signorini reliant la vitesse normale relative v_n et la force normale f_n ; (b) Loi de frottement de Coulomb reliant la vitesse de glissement v_t et la force de frottement f_t ; μ est le coefficient de frottement. Les lignes pointillées représentent des relations linéaires extraites des équations de la dynamique.

Dans la même veine, la loi de frottement sec de Coulomb est une relation complémentaire entre la force de frottement f_t et la vitesse tangentielle $v_t = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{t}_i$ au noeud de contact ; voir la figure 1B(b). Les équations de mouvement au noeud commun donnent une relation linéaire $f_t = M_t v_t + k_t$. En intersectant cette dernière avec le graphe de Coulomb, la force de frottement f_t peut être calculée à tous les noeuds de contact simultanément dans la même procédure itérative utilisée pour calculer les forces normales. La convergence vers la solution à la fois pour les forces de contact et les contraintes internes est lisse, et une précision élevée peut être obtenue.

3 Compaction d'un assemblages des grains élastiques

A titre d'exemple, considérons un assemblage de disques de faible poly-dispersité confinés dans une boîte rectangulaire de largeur L dans laquelle seule la paroi supérieure est mobile. Les parois de la boîte sont modélisées en utilisant la MPM. Les disques sont légèrement compactés en exerçant une contrainte de référence σ_0 sur la paroi supérieure. La hauteur de la boîte et la compacité de l'assemblage à l'équilibre sont h_0 et ϕ_0, respectivement. A partir de cette configuration initiale, on modélise la procédure de compaction en déplaçant la paroi supérieure vers le bas à une vitesse constante de 5 m/s et un pas de temps de $\delta t = 0,1$ μs. Deux cas seront étudiés ci-dessous avec 30 particules : 1) sans frottement et 2) avec un coefficient de frottement $\mu = 0,5$ entre les grains et entre les grains et les parois. L'effet de la gravité est négligé afin d'éviter d'éliminer les gradients de contrainte supplémentaires. Le module de Young et le coefficient de Poisson des particules sont $E = 10$ MPa et $\nu = 0,4$, respectivement.

La figure 2 montre quatre états de l'échantillon au cours de l'essai de compaction sans frottement. Dans la figure 3A, la compacité ϕ en fonction de la contrainte appliquée σ est présentée. Deux régimes peuvent être clairement distingués. Dans le premier régime, jusqu'à $\sigma \simeq 30\sigma_0$, ϕ augmente de façon logarithmique avec σ et les résultats pour les particules sans et avec frottement coïncident pratiquement. La configuration des particules évolue à la suite de la formation de nouveaux contacts entre les particules et des réarrangements des particules. En revanche, la connectivité des particules n'évolue pas dans le deuxième régime ($\sigma > 30\ \sigma_0$). L'évolution de ϕ est à nouveau linéaire en fonction du logarithme de σ,

mais avec un taux plus important. Dans tous les deux cas, avec et sans frottement, le rapport ϕ/ϕ_0 tend vers $1/\phi_0 \simeq 1.42$, ce qui est sa valeur la plus élevée possible lorsque le volume de vide v_v disparaît.

Il est également remarquable que, dans le deuxième régime, la compacité des particules frottantes est supérieure à celle des particules non-frottantes. Ceci suggère que le changement de la forme des particules est plus important avec le frottement. C'est ce que nous observons dans la figure 3B où deux configurations sont comparées au même niveau de déformation en faisant apparaître les contraintes de Von Mises à l'intérieur des particules. Le frottement induit des chaînes des contraintes linéaires et plus fortes en comparaison du cas non-frottant, où les particules ont besoin d'être maintenues par d'autres particules et des forces latérales. A l'échelle de l'assemblage, cela signifie que le rapport de la contrainte verticale par rapport à la contrainte horizontale dans le cas de particules frottantes est plus élevées que dans le cas des particules non-frottantes, où les contraintes sont presque isotropes. Par conséquent, dans le cas avec frottement, le taux de contrainte plus élevé conduit à des particules plus allongées et donc une plus grande compacité. Les vidéos de ces simulations sont disponibles à l'adresse suivante : www.cgp-gateway.org/ref028.

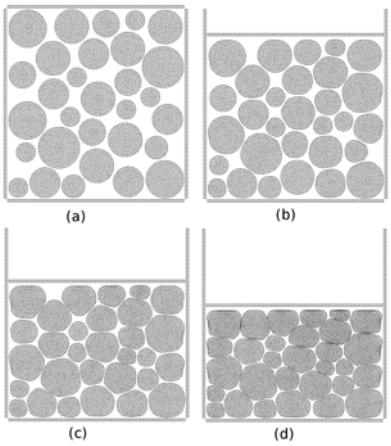
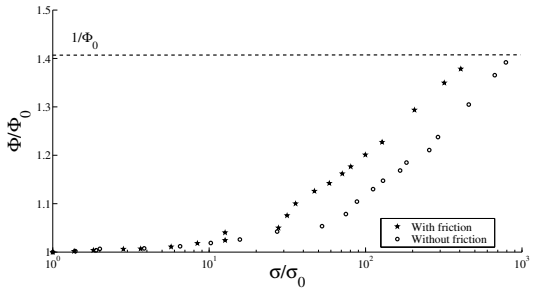
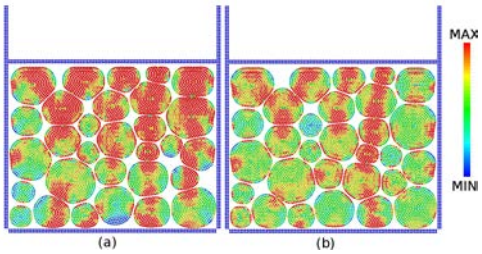


FIGURE 2 – Quatre états au cours de la compaction d'un assemblage des grains élastiques.



(A) Compacité normalisée de l'assemblage en fonction de la contrainte axiale pour les cas frottant et non-frottant.



(B) Les états déformés de l'assemblage au même niveau de déformation avec (a) et sans (b) frottement. Les champs de contraintes de Von Mises sont représentés avec la même échelle de couleurs.

FIGURE 3 – Compaction d'un assemblage des grains élastiques

4 Conclusions

Dans cet article, une nouvelle méthodologie pour la modélisation mécanique des matériaux à particules molles a été développée, combinant une formulation implicite de la Méthode des Points Matériels avec la méthode de Dynamique des contacts. Ainsi, des assemblages de particules sous grandes déformations, au-delà de l'état du "jamming", peuvent être simulés avec différentes loi de comportement des matériaux. La gestion couplée des contacts permet de mettre en évidence et d'étudier l'impact du frottement sur la répartition des contraintes.

Références

[1] M. van Hecke. *Jamming of soft particles : geometry, mechanics, scaling and isostaticity*, J. Phys., 22 : 033101, 2010.

[2] F. Radjai, V. Richefeu. *Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method*, Mech. Mater., 41 : 715, 2009.

[3] F. Radjai, F. Dubois. *Discrete numerical modelling of granular materials*, Wiley, Berlin, 2011.

[4] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, J.-Y. Delenne. *Implicit frictional-contact model for soft particle systems*, J. Mech. Phys. Solids, accepté.

[5] J. Gilkey, J. Weiss. *Implicit time integration for the material point method : quantitative and algorithmic com parisons with the finite element method*. Int. J. Num. Meth. Eng., 57 : 1323-1338, 2003.

[6] P. Huang, X. Zhang, S. Ma, X. Huang. *Contact algorithms for the material point method in impact and penetration simulation*, Int. J. Num. Meth. Eng., 85 : 498-517, 2011.