



HAL
open science

Simulation numérique de la fragmentation des particules lors de la compaction des systèmes granulaires

Duc Hanh Nguyen, Emilien Azéma, Farhang Radjai, Philippe Sornay

► To cite this version:

Duc Hanh Nguyen, Emilien Azéma, Farhang Radjai, Philippe Sornay. Simulation numérique de la fragmentation des particules lors de la compaction des systèmes granulaires. CFM 2013 - 21ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2013, Bordeaux, France. hal-03440377

HAL Id: hal-03440377

<https://hal.science/hal-03440377>

Submitted on 22 Nov 2021

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.

Simulation numérique de la fragmentation des particules lors de la compaction des systèmes granulaires

DUC HANH NGUYEN^{a,b}, EMILIEN AZÉMA^a, FARHANG RADJAI^a, PHILIPPE SORNAY^b

a. LMGC, Université Montpellier 2-CNRS, LMGC 34095 Cedex 5 Montpellier, France

b. CEA, DEN, DEC, SPUA, LCU, F-13108 Saint Paul lez Durance, France

Résumé :

La compaction des poudres dans les procédés industriels dépend de divers processus physiques à l'échelle des particules. Nous proposons ici une modélisation numérique discrète qui prend en compte la fragmentation des particules de forme polygonale (2D) par la méthode de dynamique des contacts. Cette approche permet d'étudier le rôle des réarrangements des particules et de leur fragmentation progressive au cours d'une déformation quasi-statique. Nous nous intéressons aux propriétés de compressibilité, ainsi qu'à l'évolution de la granulométrie.

Abstract :

Compaction of powders in industrial processes depends on various physical processes at the particle scale. We propose here a discrete numerical model which takes into account the fragmentation of the polygonal particles in 2D by the contact dynamics methods. This approach allows to study the role of particle rearrangements and their progressive fragmentation during a quasi-static deformation. We will look at properties of compressibility, the evolution of granulometry and texture, and shear strength. We also consider the combined effect of particle shape and initial granulometry on the compaction and the assembly evolution.

Mots clefs : matériaux granulaires, compaction, fragmentation, granulométrie.

1 Introduction

La polydispersité de taille (distribution granulométrique) est une caractéristique majeure des matériaux granulaires. Elle influence les propriétés telles que la compacité, la microstructure et la résistance mécanique du matériau. Dans les procédés industriels tel que la métallurgie des poudres, la polydispersité évolue à la fragmentation des particules. Par exemple, le procédé industriel de fabrication du combustible nucléaire élaboré à base d'UO₂ est un procédé qui comprend une étape par mise en forme par compaction. Sous l'effet de la contrainte de mise en forme, l'augmentation de la compacité résulte du réarrangement et de la fragmentation des particules.

Pour étudier ces aspects, les mesures in-situ n'étant pas expérimentalement accessibles, il est possible de recourir à une approche numérique basée sur une méthode par éléments discrets (DEM). Cette approche constitue aujourd'hui un outil de recherche puissant pour quantifier les effets des caractéristiques locales sur la rhéologie d'un milieu granulaire. Une première simplification, proposée par de nombreux auteurs, consiste à considérer chaque grain comme un agrégat de plusieurs grains sphériques liés ensemble par un critère de cohésion [1, 4, 6, 7]. Ce genre d'approche permet de mettre en évidence, par exemple, l'effet de la variation de la granulométrie sur le comportement. Néanmoins, un agrégat de grains sphériques comporte des espaces vides (pores) qui, lors de la fragmentation, vont modifier la distribution de la porosité entre les agrégats.

Plus récemment, en utilisant la Dynamique Moléculaire, Addette et Galindo -Torres [2, 3] ont étendu la méthode précédente en considérant un agrégat de forme quelconque discrétisé en polygones liés

entre eux par des ressorts. Toutefois, les études actuelles ne considèrent que la fragmentation d'une seule particule. En effet, ces méthodes impliquent une régularisation des lois de contact avec une forte raideur pour rendre compte la rigidité des particules. Des pas de temps très petits doivent donc être employés rendant ces méthodes très coûteuses en temps de calcul.

Dans cet article, nous proposons une modélisation de la fragmentation des particules de forme polygonale à l'aide de la méthode de Dynamique des Contacts (CD). La méthode CD est particulièrement adaptée à la modélisation de grands systèmes granulaires car aucune régularisation n'est introduite à l'échelle des contacts autorisant des pas de temps plus élevés. Dans un premier temps, nous étudions la fragmentation d'une seule particule sous l'application d'une contrainte (essai brésilien). Puis, nous simulons des essais de compression uniaxiale (i.e oedométrique). Nous étudions l'évolution de la distribution granulométrique et de la compacité des empilements en fonction de la contrainte appliquée.

2 Méthode numérique

2.1 Méthode de dynamique des contacts

Nous nous basons sur la méthode CD avec des particules de forme polygonale. Cette méthode fait appel à une intégration implicite des équations du mouvement conjointement à une formulation non-régulière des lois de contact et de frottement entre les particules [5]. Les particules considérées sont des polygones rigides interagissant par des forces normale f_n et tangentielle f_t , comme illustré sur la Figure 1.

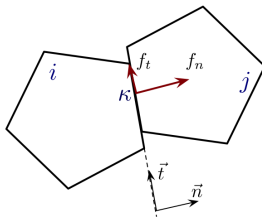


FIGURE 1 – Géométrie du contact

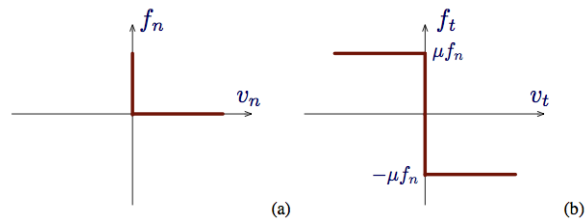


FIGURE 2 – Graphes de la Condition de Signorini (a) et de Coulomb (b) liant la vitesse normale, respectivement tangentielle, à la force normale, respectivement, tangentielle.

Par convention, un signe positif est attribué aux forces normales compressives. Ainsi, la condition géométrique de contact s'écrit :

$$\begin{cases} f_n > 0 & \text{if } v_n = 0 \\ f_n = 0 & \text{if } v_n > 0 \end{cases} \quad (1)$$

où v_n est la vitesse relative normale comptée positivement lorsque les particules s'éloignent l'une de l'autre, voir Figure 2(a). De la même manière, la loi de frottement sec de Coulomb, représentée sur la Figure 2(b), s'écrit par les inégalités suivantes :

$$\begin{cases} f_t = -\mu f_n & \text{if } v_t > 0 \\ |f_t| < \mu f_n & \text{if } v_t = 0 \\ f_t = \mu f_n & \text{if } v_t < 0 \end{cases} \quad (2)$$

où v_t est la vitesse relative tangente et μ le coefficient de frottement. Les inconnues du problème sont donc la vitesse des particules et les forces de contact. Ces deux dernières sont calculées à chaque pas de temps en considérant les équations de la dynamique de chaque particule intégrées pour un pas de temps, les contraintes cinématiques exprimées par les lois de contact et la dissipation de l'énergie cinétique (coefficient de restitution). Pour résoudre les systèmes d'équations avec les inégalités exprimant les contraintes cinématiques, une méthode itérative similaire au schéma de Gauss-Seidel est appliquée.

2.2 Modèle de fragmentation

Nous subdivisons aléatoirement chaque particule en un nombre n_v de cellules de Voronoï (Figure 3) qui représentent des fragments qui interagissent par une loi de cohésion irréversible. Au contact entre deux fragments, la force normale f_n doit satisfaire la condition de Signorini et la force tangentielle f_t doit satisfaire le critère de Coulomb pour une adhésion de seuil f_c (Figure 4).

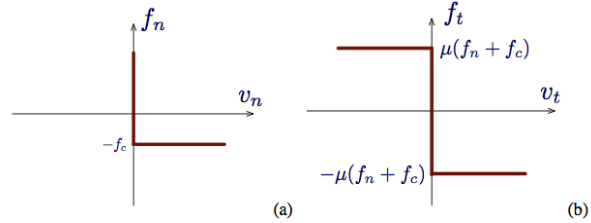
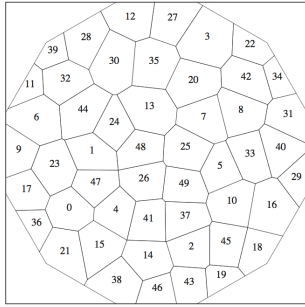


FIGURE 4 – Graphes de Signorini (a) et de Coulomb (b) pour un contact adhésif de seuil f_c .

FIGURE 3 – Division d'une particule en cellules de Voronoï

Le seuil de cohésion f_c , la surface de contact S et la contrainte cohésive σ_c sont liés par $f_c = S\sigma_c$. La liaison entre deux fragments se rompt si $f_n = -f_c$ ou $f_t = \mu|f_n + f_c|$.

3 Essai brésilien

3.1 Description générale

L'essai brésilien est une méthode indirecte pour déterminer la résistance à la traction des matériaux quasi-fragiles. L'essai consiste à rompre des éprouvettes cylindriques en appliquant une force suivant deux génératrices opposées. Dans nos simulations 2D, la particule est un polygone de 1024 côtés dont l'enveloppe est très proche de celle d'un disque. Il est soumis à une contrainte verticale engendrée par le déplacement lent de deux plateaux horizontaux opposés. Le coefficient de frottement entre les fragments constituant la particule et entre la particule et les plateaux est de 0,3. Nous réalisons cet essai pour différentes valeurs de cohésion et différents nombres de fragments. Chaque essai est réalisé 5 fois avec des discrétisations aléatoires indépendantes.



FIGURE 5 – (a) Particule fragmentée diamétralement à la fin de l'essai brésilien (force de compression en rouge, force de traction en vert), (b) Comprimé d' UO_2 fragmenté lors d'un essai brésilien.

Ces essais montrent que des particules se fragmentent diamétralement en mode 1 comme constaté pour des comprimés de poudre d' UO_2 ; voir Figure 5. La Figure 6 présente l'évolution de la contrainte verticale en fonction de la déformation verticale pour différentes valeurs de la cohésion pour $n_v = 50$. Nous observons que la résistance en traction ainsi que la déformation à la rupture augmentent avec la cohésion interne. Toutefois, les déformations à la rupture sont très petites (de l'ordre de 10^{-3}).

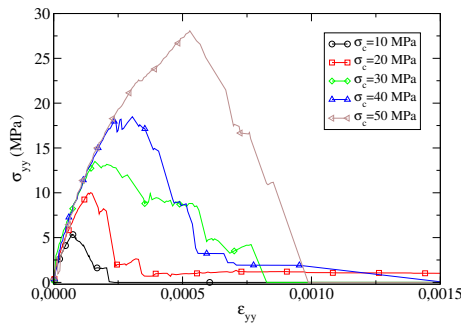


FIGURE 6 – Contrainte verticale en fonction de la déformation axiale pour différentes contraintes de cohésion.

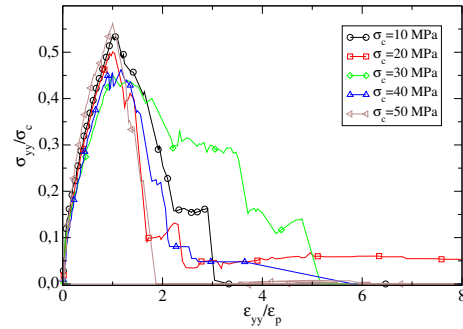


FIGURE 7 – Contrainte verticale normalisée en fonction de la déformation axiale normalisée pour différentes valeurs de la contrainte de cohésion.

La normalisation de la contrainte par la contrainte de cohésion, et de la déformation par la déformation à la rupture, montre que la rupture est entièrement gouvernée par la cohésion ; voir Figure 7. La Figure 8 montre l'évolution de la résistance moyenne à la traction en fonction de la cohésion. Les barres d'erreur correspondent à la dispersion des valeurs calculées pour les 5 simulations indépendantes réalisées pour chaque valeur de la cohésion. La résistance en traction est proportionnelle à la cohésion avec un coefficient de proportionnalité de 0,4. Nous avons également réalisé des essais brésiliens avec un nombre n_v croissant de fragments (7 simulations pour chaque valeur de n_v). La résistance en traction, normalisée par la cohésion en fonction de nombre de fragments, est tracée sur la Figure 9. On voit que la résistance diminue légèrement avec n_v , mais se stabilise à une valeur constante pour $n_v > 100$. Les valeurs plus élevées de la résistance pour les plus faibles valeurs de n_v sont liées à l'effet de taille finie. Par ailleurs, l'écart-type des données diminue rapidement lorsque n_v augmente et semble tendre vers zéro. Sur la base de ces résultats, nous pouvons conclure que pour la simulation de la fragmentation le nombre optimal de fragments est de l'ordre d'une centaine.

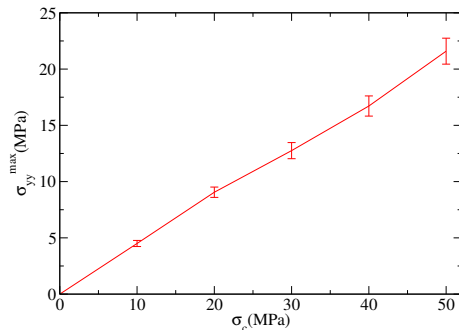


FIGURE 8 – Résistance en traction en fonction de la contrainte de cohésion ($n_v = 50$).

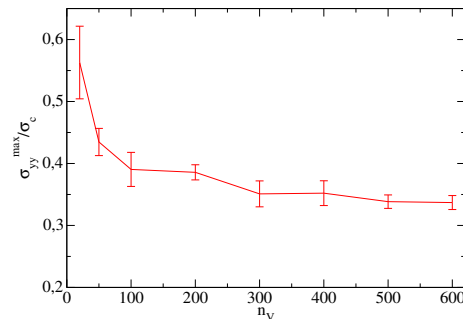


FIGURE 9 – Résistance à la rupture normalisée par la contrainte de cohésion en fonction de nombre de cellules de Voronoi.

3.2 Essai de compaction oedométrique

Nous commençons par déposer les particules par gravité, puis nous appliquons une contrainte constante de 1 MPa sur la paroi supérieure jusqu'à atteindre une compacité constante, les trois autres parois restant fixes. Le nombre initial de particules dans ces essais est de 500 et chaque particule est divisée en 20 cellules de Voronoi.

Le coefficient de frottement entre les fragments est pris égal à 0,3. Le déplacement de la paroi supérieure vers le bas conduit au déplacement des particules qui commencent par se réarranger mais, lorsque les particules ne peuvent plus se réarranger, elles se fragmentent avec une perte progressive de contacts



FIGURE 10 – Vue de l'échantillon au début et au cours de la compaction (particules non fragmentées en bleu, particules fragmentées en rouge et réseau des forces normales en vert)

entre les fragments constitutifs d'une particule. La Figure 10 montre une image de l'assemblage au début et au cours de la fragmentation.

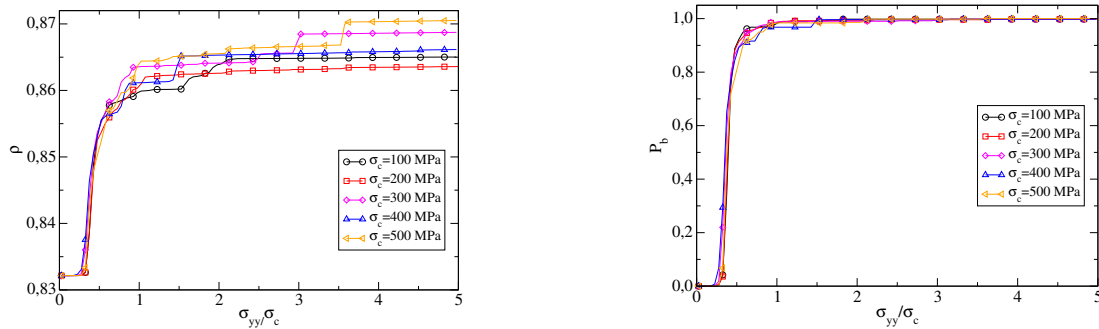


FIGURE 11 – Compacité en fonction de la contrainte verticale normalisée pour différentes contraintes de cohésion. FIGURE 12 – Proportion des particules fragmentées en fonction de la contrainte verticale normalisée pour différentes contraintes de cohésions.

La Figure 11 représente l'évolution de la compacité en fonction de la contrainte verticale normalisée par la contrainte de cohésion pour différentes valeurs de cohésion. Ces courbes suivent une même tendance, elles augmentent très vite dès que la contrainte atteint 0,3 fois la cohésion interne. ρ varie ainsi de 0,83 à 0,86 et continue ensuite à augmenter lentement avec la contrainte. Remarquons que, comme pour les essais brésiliens, la normalisation de la contrainte verticale avec σ_c permet de superposer toutes les données sur une même courbe sauf aux valeurs les plus élevées de la contrainte appliquée, où des petites différences sont observées. La Figure 12 montre l'évolution de la proportion P_b de particules endommagées en fonction de la contrainte normalisée. On peut voir que P_b augmente très vite, et aux faibles niveaux de contrainte appliquée, pratiquement toutes les particules sont fragmentées au moins en deux morceaux.

La Figure 13 montre la fraction volumique cumulée $h(d)$ des particules pour différentes contraintes appliquées. Initialement, pour une contrainte très faible, la distribution est presque monodisperse. Avec l'augmentation de la contrainte jusqu'à $\rho_{yy} = 0,5\sigma_c$, on observe la réduction de la classe des particules les plus grosses, qui en se fragmentant donnent lieu à des particules de différentes tailles avec une distribution pratiquement uniforme par fractions volumiques ($h(d)$ linéaire). Pour des contraintes plus élevées, les classes de particules les plus grosses comme les plus petites se brisent et leurs fragments continuent à peupler les classes de tailles inférieures. La taille des particules les plus petites étant limitée à celle d'un fragment, les distributions de tailles obtenues s'écartent progressivement de la distribution uniforme par fractions volumiques. Il est intéressant de remarquer que la classe des particules primaires (les plus grosses) est progressivement réduite, mais malgré l'augmentation de la contrainte, il reste toujours quelques particules primaires intactes dans l'assemblage, dont on peut voir un exemple sur la Figure 13. Cet effet s'explique par le fait que les plus grosses particules supportent en moyenne des

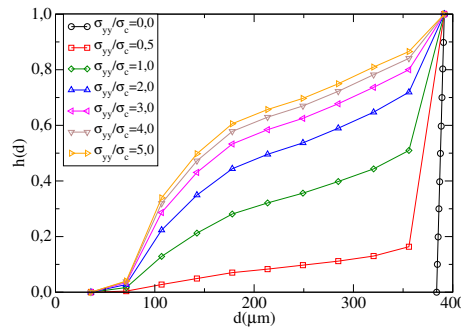


FIGURE 13 – Évolution de la distribution granulométrique au cours de la compaction oedométrique.

contraintes déviatoriques faibles lorsqu'elles sont entourées par une population de petites particules.

4 Conclusion

Dans ce travail, nous avons décrit une approche numérique pour simuler et analyser la compaction des assemblages de particules rigides de forme polygonale et sécables. Chaque particule est modélisée comme un agrégat de fragments collés les uns aux autres. Nous avons mis en oeuvre cette approche pour simuler des essais brésiliens. La contrainte à la rupture se met correctement à l'échelle avec la contrainte de cohésion introduite entre les fragments et est indépendante du nombre de fragments lorsque celui-ci est supérieur à 100. Nous avons ensuite appliquée notre méthodologie pour étudier la compaction oedométrique d'un assemblage de particules. Nous avons analysé l'évolution de la compacité et de la granulométrie en fonction de la contrainte appliquée. La compacité augmente rapidement dès que la contrainte appliquée est de l'ordre de 0,25 fois la contrainte de cohésion introduite entre fragments. Par ailleurs, après une première phase de fragmentation de la majorité des particules, donnant naissance à une distribution uniforme par fractions volumiques, nous avons observé une réduction progressive de toutes les classes de taille. Toutefois, même après application d'une contrainte égale à cinq fois la contrainte de cohésion, il reste toujours une fraction de particules primaires qui n'a subi aucun endommagement

Références

- [1] S. Antonyuk, M. Khanal, J. Tomas, S. Heinrich, and L. Morl. Impact breakage of spherical granules : experimental study and dem simulation. *Chemical engineering and processing*, 45(10) :838–856, 2006.
- [2] GA D'Addetta, F. Kun, and E. Ramm. On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials. *Granular Matter*, 4(2) :77–90, 2002.
- [3] S.A. Galindo-Torres, D.M. Pedroso, D.J. Williams, and L. Li. Breaking processes in three-dimensional bonded granular materials with general shapes. *Computer Physics Communications*, 183(2) :266 – 277, 2012.
- [4] K.D Kafui and C Thornton. Numerical simulations of impact breakage of a spherical crystalline agglomerate. *Powder Technology*, 109(1-3) :113 – 132, 2000.
- [5] J.J. Moreau. Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials. *European Journal of Mechanics A/Solids*, supp.(4) :93–114, 1994. Formulation mathématiques titre du livre Contacts mechanics.
- [6] C Thornton, M.T Ciomocos, and M.J Adams. Numerical simulations of agglomerate impact breakage. *Powder Technology*, 105(1-3) :74 – 82, 1999.
- [7] FK Wittel, HA Carmona, F. Kun, and HJ Herrmann. Mechanisms in impact fragmentation. *International journal of fracture*, 154(1) :105–117, 2008.