

### Simulation numérique de la fragmentation des granulats Aurélien Neveu

### ▶ To cite this version:

Aurélien Neveu. Simulation numérique de la fragmentation des granulats. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Ecole Centrale de Nantes (ECN), 2016. Français. NNT: . tel-01514411v1

### HAL Id: tel-01514411 https://hal.science/tel-01514411v1

Submitted on 28 Apr 2017 (v1), last revised 16 Jul 2019 (v2)

**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.





# Thèse de Doctorat

## **Aurélien NEVEU**

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade de Docteur de l'École Centrale de Nantes sous le sceau de l'Université Bretagne Loire

École doctorale : Sciences Pour l'Ingénieur, Géosciences, Architecture

Discipline : Mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces Unité de recherche : Institut Français des Sciences et Technologies des Transports, de l'Aménagement et des Réseaux

Soutenue le 9 Décembre 2016

# Simulation numérique de la fragmentation des granulats

			1
. I		ĸ	Y
•	$\mathbf{\nabla}$		

Président :	François NICOT, Directeur de Rech	herche, IRSTEA, St Martin d'Hères
Rapporteurs :	Mathieu RENOUF, Chargé de Rech Cyrille CHAZALLON, Professeur de	nerche, Université de Montpellier es Universités, INSA de Strasbourg
Examinateurs :	Nicolas MOËS, Professeur des Uni Franck LOMINE, Maitre de Confére	versités, Ecole Centrale de Nantes nces, INSA de Rennes
Invité :	Jean-Noël ROUX, ICPEF, IFSTTAF	R, Champs sur Marne
Directeur de thèse :	Patrick RICHARD, Directeur de Re	cherche, IFSTTAR, Centre de Nantes
Co-directeur de thèse : Co-encadrant de thèse :	Yannick DESCANTES, IDTPE, HD Riccardo ARTONI, Chargé de Recl	R, IFSTTAR, Centre de Nantes herche, IFSTTAR, Centre de Nantes

## Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Mathieu RENOUF et Cyrille CHAZALLON d'avoir accepté de rapporter ce travail de thèse. Mes remerciements vont également à Nicolas MOËS et Franck LOMINE pour avoir accepté de l'examiner, ainsi que François NICOT pour m'avoir fait l'honneur d'être président de ce jury. Je remercie également Jean-Noël ROUX pour sa présence, mais également pour ses remarques tout au long de ce travail qui m'ont permis d'en améliorer la qualité.

Ce travail de thèse n'aurait pu se faire dans des conditions idéales sans un excellent encadrement. Je tiens donc à remercier chaleureusement mes encadrants : Patrick RI-CHARD, Yannick DESCANTES et Riccardo ARTONI pour m'avoir soutenu tout au long de cette thèse, même si cela leur a certainement fait prendre plus d'années que les trois ans de cette thèse...

Je remercie également l'ensemble de l'équipe du GPEM pour leur soutien, pour l'aide qu'ils m'ont apportée, et pour le cadre agréable dans lequel j'ai pu effectuer cette thèse. Mes remerciements vont tout particulièrement à Annick et Jean-Marc pour les pauses clopes bien méritées, à Nicole pour son efficacité à régler n'importe quel problème administratif et à David pour son assistance dans la réalisation du dispositif expérimental. Je remercie également Maxime, Jaime, Weslei, Eliane et Andy pour les bons moments de rigolade et les pintes de bière, éléments essentiels pour une thèse réussie.

Enfin je remercie mes amis : Tof, Gamin, Lapin, Jeannette, Pauline et les autres pour m'avoir soutenu durant toutes ces années, toujours prêt pour aller boire un coup et parler de concassage de granulats! Je remercie également mes camarades de raclette : Jerem, Hugo, Nolwenn, Maud, Katell et Patricia la petite nouvelle, pour nos raclettes enflammées, à un niveau encore jamais égalé! Je remercie enfin ma bonne vieille Ford Fiesta, toujours fidèle, qui a eu la délicatesse d'attendre la fin de cette thèse avant de tirer sa révérence.

## Résumé

La fragmentation des matériaux est un phénomène qui entre en jeu dans de nombreux systèmes naturels et industriels, et à différentes échelles. Elle intervient notamment pour les systèmes géologiques tels que les massifs rocheux ou les failles sismiques. D'un point de vue industriel, la fragmentation est d'une grande importance dans la production de granulats de carrière, qui sont soumis à des critères stricts en terme de tailles et de formes. Néanmoins, bien qu'étudiés depuis longtemps, les phénomènes à l'origine de la fracture des matériaux restent encore aujourd'hui mal maîtrisés.

L'étude de la fracture des matériaux à partir de méthodes numériques à été initiée dans la deuxième moitié du 20ème siècle, et est intensivement utilisée de nos jours. Les méthodes aux éléments discrets permettent une modélisation des interactions à l'échelle de la microstructure du matériau. Un des avantages de ces méthodes est que la fissure apparaît et se propage dans l'empilement de manière naturelle, sans qu'il soit nécessaire de la décrire par modèles de fissuration.

Un modèle aux éléments discrets permettant de représenter la cohésion au sein d'un matériau composé de particules de formes quelconques a été développé durant cette thèse. Il combine une approche de type dynamique des contacts non régulière pour la résolution des contacts entre grains, et une modélisation - indépendante de la forme des particules - de la cohésion via des interactions à distance. Des simulations numériques ont été effectuées pour deux types d'empilements représentant soit des matériaux cimentés, soit des matériaux « pleins ». Les résultats obtenus ont permis de confirmer que ce modèle est capable de reproduire le comportement macroscopique de la rupture de matériau fragile.

Le modèle a été ensuite appliqué à l'étude de l'influence du positionnement de points de contact externes sur la résistance d'une particule cylindrique. Les résultats obtenus ont montrés une forte influence de ce positionnement sur la force nécessaire pour fragmenter l'échantillon. Une étude expérimentale d'impact a été menée et a permis de confirmer ces résultats. Enfin, nous avons appliqué notre approche à quelques cas pratiques : le concassage d'un grain de forme réelle dont la reconstruction est issue de données tomographiques.

### Abstract

The fragmentation of materials is a phenomenon which arises in several natural and industrial systems, and for a wide range of scales. From an industrial point of view, the crushing process is very important in the production of aggregates, which are often required to meet high criteria in terms of size and shape. However, although studied for decades, the phenomena behind fracture of materials are still not completely understood.

The study of the fracture of materials by means of numerical methods originated during the second part of the 20th century, and such methods are still extensively used nowadays. The discrete element methods allow to model interactions at the scale of the material micro-structure, by means of simple models. One of the advantages of this kind of methods is the natural way the crack initiates and propagates in the sample, without any need of a crack model.

A discrete element model allowing to describe cohesion inside the material composed of particles of arbitrary shapes has been developed in this work. A mixed approach combining non smooth contacts dynamics to solve contacts between particles, and a modeling of cohesive forces via an interaction range is proposed. Numerical simulations have been conducted for two kinds of samples describing both cemented and plain materials. The results obtained have shown the ability of the numerical model to reproduce the macroscopic behavior of the fracture of a brittle material.

The developed model has been applied to study the influence of the positioning of external contact points on the effective strength of a cylindrical shaped grain. The results have demonstrated an increase of the required force to break the grain depending on the position of the contacts. An experimental study has confirmed the numerical results. Finally, the model has been applied to the study of some practical cases : the crushing of a real shape grain which was built from tomographic data.

## Table des matières

	$\mathbf{R}$ és	umé		iii
	Abs	stract		$\mathbf{v}$
	Tab	le des	matières	vii
	Tab	le des	figures	xi
	Intr	oducti	ion générale	1
1	Mé	thodes	aux éléments discrets pour la modélisation de matériaux	٢
	frag	iles		7
	1.1	Métho	de sur réseau : « Lattice Element Method »	8
	1.2	La mé	thode aux éléments discrets (DEM)	10
		1.2.1	Le Modèle « Contact Bond »	11
		1.2.2	Le modèle « Bonded Particle »	13
		1.2.3	Modèles à éléments polygonaux/polyédriques	18
	1.3	La dy:	namique des contacts non régulière (NSCD)	22
		1.3.1	Equation de la dynamique	23
		1.3.2	Description du contact	24
		1.3.3	Résolution du problème	24
	1.4	Le coo	le LMGC90	26
	1.5	Conclu	usion sur les méthodes numériques	26
2	Dév	veloppe	ement d'un modèle cohésif discret pour particules de formes	3
	arbi	itraire	5	<b>27</b>
	2.1	Introd	luction	27
	2.2	Modél	isation des interactions entre particules	28
		2.2.1	Contact entre particules	28

		2.2.2	Modèle de points de cohésion $2d/3d$	29
		2.2.3	Implémentation de l'interaction cohésive $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	35
	2.3	Test d	u modèle : compression uniaxiale 2d	35
		2.3.1	$Empilement initial \dots \dots$	36
		2.3.2	Compression uniaxiale	39
	2.4	Modél	isation d'un matériau "plein"	49
		2.4.1	Construction de l'échantillon	50
		2.4.2	Adaptation du modèle	51
		2.4.3	Résultats	54
	2.5	Conclu	usion	60
3	Étu	de du	chargement multi-point	63
	3.1	Introd	uction	63
	3.2	Étude	numérique 3d	66
		3.2.1	Introduction	66
		3.2.2	Construction de l'échantillon et paramètres de simulation	67
		3.2.3	Résultats	70
	3.3	Étude	expérimentale	75
		3.3.1	Introduction	75
		3.3.2	Dispositif expérimental	76
		3.3.3	Préparation des échantillons	77
		3.3.4	Résultats obtenus	81
	3.4	Conclu	usion	86
4	$\mathbf{Sim}$	ulation	n de la rupture d'un grain réel	89
	4.1	Introd	luction	89
	4.2	Tomog	graphie de grains de sable	91
	4.3	Recon	struction du grain à $3d$	92
	4.4	Tests o	de compression simple	96
		4.4.1	Configuration de simulation	96
		4.4.2	Caractéristiques des empilements	97
		4.4.3	Comportement macroscopique et résistance des grains	99
		4.4.4	Motifs de rupture et fragments	100
	4.5	Conclu	usion	103

Annexe	109
Bibliographie	111

# Table des figures

1	(a) Schéma des grains au niveau d'une faille sismique, dont la rupture	
	influence la résistance au cisaillement de celle-ci. (b) Exemple de concas-	
	seur à impact utilisé pour la production de granulats	2
2	Différents modes de fragmentation d'une particule et influence sur la	
	distribution de fragments obtenus, tiré de (Salman et al., 2007)	3
3	Différence de microstructure entre un grès Ronsard (a) et un granite (b).	4
1.1	Déformation des liens reliant les nœuds du réseau (Herrmann et al., 1989).	8
1.2	Propagation de la fissure dans un réseau régulier (à gauche) et irrégulier	
	(à droite) soumis à un test en traction (Topin et al., 2007).	10
1.3	Réseau construit à partir d'une tessellation de Voronoï (Bolander and	
	Sukumar, 2005)	11
1.4	Modèle de type « contact bond » (Cho et al., 2007)	12
1.5	Modèle de contact incluant la rotation relative des particules, d'après	
	Jiang et al. (2005)	13
1.6	Modèle « bonded particle » couplant la description du contact et la pâte	
	cimentaire (Potyondy and Cundall, 2004).	15
1.7	« Clumped particle model » développé par Cho et al. (2007)	16
1.8	Définition de la longueur d'interaction introduite par Scholtès and Donzé	
	(2013)	17
1.9	Influence du degré d'imbrication sur le comportement macroscopique du	
	matériau (Scholtès and Donzé, 2013).	18
1.10	Modèle à éléments polygonaux proposé par D'Addetta et al. (2002)	19
1.12	Rupture en compression (a) et en traction (b) obtenus par D'Addetta	
	et al. (2002)	21
1.11	(a) Réseau obtenu par la méthode « Vectorizable Random Lattice » per-	
	mettant de contrôler l'irrégularité des cellules (b) Réseau de poutres su-	
	perposé à l'empilement de polygones (D'Addetta et al., 2002). $\ldots$ .	21

1.13	Modèle proposé par Nguyen et al. (2015)	22
1.14	Lois de contact généralisées, d'après Moreau (1988) et Jean (1999)	25
2.1	Définition des interactions cohésives entre deux particules en $2d$ (a) et $3d$ (b). Chaque interaction cohésive est composée d'un ressort et d'un amortisseur en compression/traction et en cisaillement	30
2.2	Définition du repère local des interactions cohésives et détermination des déplacements relatifs. Avec $\vec{n}$ et $\vec{t}$ les vecteurs normal et tangent du repère local permettant le calcul des déplacements relatifs $\Delta_n$ et $\Delta_t$	31
2.3	<ul> <li>(a) Découpage des pentagones pour lisser la surface de contact avec les parois.</li> <li>(b) Exemple d'empilement de 5000 pentagones utilisé dans les simulations de compression uniaxiale.</li> </ul>	37
2.4	Distributions d'orientations du vecteur normal $n$ pour les interactions cohésives (a) et les contacts (b) obtenues pour deux empilement initiaux différents (ligne pleine, pointillés)	38
2.5	Profil de compacité verticale obtenus pour deux empilements initiaux différents.	39
2.6	Courbe contrainte axiale $\sigma$ / déformation axiale $\epsilon$ (ligne continue bleu) et fraction cumulée d'interactions cohésives rompues (pointillés vert).	41
2.7	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues à différentes étapes de la compression. La localisation des ruptures des interactions cohésives et le comportement progressif de la rupture est clairement vis- ible.	42
2.8	Module d'Young macroscopique $E_M$ mesuré pour des compacités $\phi$ allant de 0.6 à 0.84.	43
2.9	Courbes de contrainte axiale $\sigma$ / déformation axiale $\epsilon$ obtenues pour des valeurs de nombre de coordination des interactions cohésives $z$ de 3 à 6. Encart : Module d'Young macroscopique $E_M$ en fonction de $z$ . Les barres d'erreur sont comprises dans l'épaisseur du trait.	44
2.10	Interactions cohésives rompues à $\epsilon = 0.009$ pour différents nombre de coordination : (a) $z = 5$ , (b) $z = 4$ , (c) $z = 3$ . Une perte de localisation est observée pour des petites valeurs de z	45
	os osserves pour des poures rerours de Arrivier en entre ent	10

2.11	(a) Influence du coefficient de frottement entre pentagones $\mu_{pp}$ sur le	
	module d'Young macroscopique $E_M$ pour différentes compacités. Le mo-	
	dule d'Young pour chaque compacité a été normalisé par sa valeur à	
	$\mu_{m} = 0$ pour mettre en avant son influence. Cet effet est petit bien qu'il	
	augmente avec la compacité. Encart : Le module d'Young augmente en	
	fonction de la compacité (voir section 2.3.2.3). (b) Coefficient de Poisson	
	macroscopique $\nu_M$ pour les mêmes valeurs de $\phi$ et $\mu_m$ que (a). Encart :	
	$\nu_M$ normalisé par sa valeur à $\mu_{nn} = 0.$	46
2.12	Courbes de contrainte axiale $\sigma$ / déformation axiale $\epsilon$ pour des coefficients	
	de frottement $\mu_{nn} = 0$ (ligne continue rouge) et $\mu_{nn} = 0.3$ (pointillés	
	bleu), à une compacite $\phi = 0.84$ . Les comportements après rupture sont	
	clairement différentes.	47
2.13	Module d'Young macroscopique $E_M$ pour des valeurs du rapport $R/r$	
	allant de 0 à 2, pour des empilement de compacité $\phi = 0.84$	48
2.14	(a) Influence du seuil de rupture des interactions cohésives sur la ré-	
	sistance de l'empilement. (b) Identique à (a) mais avec la contrainte $\sigma$	
	et la déformation relative axiale $\epsilon$ normalisées par leurs valeurs au pic	
	$(\sigma_{neak}, \epsilon_{neak})$ pour voir les effets du seuil de contrainte sur le comportement	
	après rupture.	50
2.15	À gauche : exemple d'empilement de compacité $\phi = 1$ obtenu avec une	
	partition de Voronoï. Au centre et à droite : différence de microstructure	
	entre les échantillons "plein" et cimentés	51
2.16	Densité de probabilité de (a) longueur initiale $l_0$ des interactions cohé-	
	sives, (b) diamètre équivalent moyen $d$ des polygones (c) surface $S$ des	
	interactions cohésives et (c) masse $m$ des interactions cohésives	52
2.17	Distribution d'orientation des normales des interactions cohésives	52
2.18	(a) Représentation de l'interaction cohésive mise en place entre deux	
	particules. (b) Définition de la surface $S$ et de la longueur initiale de	
	l'interaction cohésive $l_0$ pour le modèle de matériau "plein"	53
2.19	Courbe contrainte/déformation (ligne bleu) et fraction cumulée d'inter-	
	actions cohésives rompues (pointillés vert) pour une compression uni-	
	axiale avec $\mu_{pp} = 0.3$ .	55
2.20	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues à différentes	
	étapes de la compression. On remarque bien de nombreuses fractures	
	secondaires à un état avancé de la compression.	56

2.21	Courbe contrainte/déformation pour le même empilement mais des va-	
	leurs de $\mu_{pp} = 0., 0.3$ et 0.5. Encart : fraction d'interactions cohésives	
	rompues en fonction de la déformation	57
2.22	Influence du coefficient de frottement $\mu_{pp}$ sur la contrainte de rupture	
	(a), la déformation à la rupture (b) et le module d'Young macroscopique	
	(c) moyenné sur 6 échantillons. $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	58
2.23	Images de l'empilement obtenues au point $(IV)$ pour à gauche $\mu_{pp} = 0$ ,	
	au centre $\mu_{pp} = 0.3$ et à droite $\mu_{pp} = 0.5$ .	58
2.24	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues au point $(IV)$	
	pour (a) $\mu_{pp} = 0$ , (b) $\mu_{pp} = 0.3$ et (c) $\mu_{pp} = 0.5$	59
2.25	Surface totale créée en fonction de la déformation pour les trois valeurs	
	de $\mu_{pp}$ étudiées. Encart : Surface totale crée normalisée par la valeur à	
	$\mu_{pp} = 0.  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  $	59
3.1	Pour le modèle en traction, le réseau de forces aléatoires est remplacé	
	par deux forces principales disposées en forme de croix (selon Tsoungui	
	et al. (1999a)).	65
3.2	Pour le modèle de rupture en cisaillement, le réseau de forces aléatoires	
	est remplacé par des forces normales disposées symétriquement (selon	
	Ben-Nun and Einav (2010))	65
3.3	Exemple de deux configurations dont la moyenne des forces normales $\bar{F_N}$	
	est identique, ce qui implique donc une résistance équivalente selon le $% f(x)$	
	modèle de Ben-Nun and Einav (2010). $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	66
3.4	À gauche : Rayon $R$ de la particule avant la coupe et distance $R^*$ entre	
	le plan de coupe et le centre de la particule. Le rapport $R^*/R$ est fixé	
	à 0.9975. À droite : Empilement après découpage. Ici le rapport a	
	été délibérément exagéré pour l'exemple, le rapport réellement utilisé ne	
	permettant pas de distinguer la découpe	67
3.5	Fonctions densités de probabilités des distributions des longueurs initiales	
	$l_0$ (à gauche) et surfaces S (à droite) des interactions cohésives pour deux	
	empilements différents.	68
3.6	Fonctions densités de probabilités des distribution des masses $m$ (à gauche)	
	et du rapport $S/l_0$ (à droite) des interactions cohésives pour deux em-	
	pilements différents	68
3.7	(a) Schéma de positionnement des parois et définition de l'angle $\alpha$ . (b)	
	Configuration diamétrale. (c) Configuration pour un angle $\alpha = \pi/3$	69

3.8	Images de la rupture de l'échantillon pour les angles $0,\pi/6$ , et $\pi/3$ (de	
	gauche à droite). L'échelle de couleur correspond au déplacement suivant	
	la direction horizontale, positif en rouge et négatif en bleu	71
3.9	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues pour la config-	
	uration (a) diamétrale (b) $\alpha = \pi/3$ dans le plan (x,y)	71
3.10	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues dans le plan $(yz)$	
	de l'échantillon pour la configuration diamétrale ( $\alpha = 0$ ) et à différentes	
	étapes de la fracturation	72
3.11	Distribution spatiale des interactions cohésives rompues dans le plan $(yz)$	
	de l'échantillon pour la configuration $\alpha=\pi/3$ et à différentes étapes de	
	la fracturation.	72
3.12	(a) Courbe force/déformation pour des angles $\alpha = 0, \pi/6, \pi/3$ . (b)	
	Fraction d'interactions cohésives rompues en fonction du déplacement	
	$\Delta_y$ (correspondant également à la déformation car $d=1)$ pour les mêmes	
	valeurs d'angle que (a)	73
3.13	Evolution des paramètres de la rupture en fonction de $\alpha$ : (a) Rapport	
	$F_y^{crit}/F_{y,\alpha=0}^{crit}$ , (b) déformation au pic de force $\Delta_y^{crit}$ et (c) rapport $F_y/\Delta_y$ .	
	Les barres d'erreur correspondent à 2 fois l'écart type sur la distribution	
	de valeurs	74
3.14	(a) Surface totale crée par la rupture des interactions cohésives pour deux	
	déformations $\Delta_y^{crit}$ et $1.5\Delta_y^{crit}$ . (b) Surface de rupture théorique calculée	
	avec la relation 3.2	75
3.15	Dispositif expérimental d'étude de la fragmentation dynamique par impact.	76
3.16	Dispositif multi-point permettant d'appliquer deux points de contact sur	
	la partie inférieure de l'échantillon.	76
3.17	Moules d'acier utilisés pour la préparation des échantillons, avec les ban-	
	delettes en plastique	79
3.18	A gauche : échantillon obtenu avec bandelettes en papier,. A droite :	
	échantillon obtenu avec bandelettes en plastique. La différence de surface $\hfill$	
	est clairement visible	79
3.19	Malaxeur de laboratoire Eirich R02 utilisé pour le mélange des différents $% \mathcal{O}(\mathcal{O})$	
	constituants du mortier.	80
3.20	Série d'échantillons pendant la phase de cure	81
3.21	Surface de l'échantillon après un impact. On remarque que la zone	
	d'impact est bien homogène	82

3.22	À gauche : échantillon avant essai. À droite : échantillons fracturés dans	
	la configuration diamétrale.	83
3.23	Images de l'impact tirées d'une séquence filmée à $25000$ i/s avec la	
	caméra rapide pour la configuration diamétrale.	84
3.24	Nombre d'impacts nécessaires à la fragmentation en fonction de l'énergie	
	fournie à chaque impact pour la configuration diamétrale. Les bar-	
	res d'erreur correspondent à l'écart type de la distribution de valeurs	
	obtenues.	84
3.25	Images de l'impact tirées d'une séquence filmée à $25000$ i/s avec la	
	caméra rapide pour la configuration multi-points.	86
3.26	Probabilité de rupture de l'échantillon en fonction de l'énergie d'impact	
	pour $\alpha = 0$ (configuration diamétrale), $alpha = \pi/6$ et $alpha = \pi/3$ .	
	Encart : énergie pour une probabilité de rupture de 0.5 pour les trois	
	angles, divisée par sa valeur pour $\alpha = 0.$	87
4.1	Reconstruction d'un grain de ballast à partir de sphères interpénétrées	
	(Ferellec and McDowell, 2010)	90
4.2	Compression expérimentale (à gauche) et numérique (à droite) d'un em-	
	pilement de trois grains, tiré de (Cil and Alshibli, 2012, 2014)	91
4.3	Reconstruction 3d de grains par $\mu CT$ obtenus par Zhao et al. (2015a) :	
	LBS-1 à gauche et LBS-3 à droite.	92
4.4	A gauche : surface reconstruite à partir des données tomographiques par	
	la méthode "Marching Cubes" du grain LBS-1. A droite : zoom de la	
	surface, on remarque clairement les marches générées par l'algorithme	93
4.5	Maillage de la surface reconstruite et simplifiée du grain LBS-1	94
4.6	Construction de la tessellation de Voronoï avec la méthode "Vectorizable	
	Random Lattice" (Moukarzel and Herrmann, 1992). (a) Grille pour la	
	distribution des germes et triangulation de Delaunay correspondante. (b)	
	Effet du paramètre $a$ sur la régularité de la tessellation obtenue, tiré de	
	D'Addetta (2004). $\ldots$	94
4.7	Méthode proposée par Mollon (2015) permettant d'obtenir des polyèdres	
	de forme convenable au niveau de la surface du grain.	95
4.8	Empilement final reconstruit pour les grains : LBS-1 à gauche et LBS-3	
	à droite	96
4.9	Configuration de l'essai en compression simple pour le grain (a) LBS-1	
	et (b) LBS-3	97

4.10	Fonctions densités de probabilités des distributions des longueurs initiales	
	$l_0$ (à gauche) et surfaces S (à droite) des interactions cohésives pour les	
	grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).	98
4.11	Fonctions densités de probabilités des distribution des masses $m$ (à gauche)	
	et du rapport $S/l_0$ (à droite) des interactions cohésives pour les grains	
	LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein)	98
4.12	Courbes force/déplacement et évolutions de la rupture des interactions	
	cohésives pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).	99
4.13	Courbes force/déplacement mesurées expérimentalement par Zhao et al.	
	(2015a) pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).	100
4.14	(a) Courbes de force à la rupture $F_{max}$ en fonction du seuil de rupture	
	en traction $\sigma_n$ pour LBS-1 ( $\mu = 0$ et $\mu = 0.3$ ) et LBS-3 ( $\mu = 0$ ). (a)	
	Rapport force sur déplacement $F/\Delta$ en fonction du seuil de rupture en	
	traction $\sigma_n$ pour les mêmes paramètres que (a)	101
4.15	Motifs de rupture du grain LBS-1 : (a) vue de côté, (b) vue du dessus,	
	(c) vue du dessous, (d) vue du dessus des fragments obtenus par Zhao	
	et al. (2015a).	102
4.16	Motifs de rupture du grain LBS-3 : (a) vue de côté, (b) vue du dessus,	
	(c) vue du dessous, (d) vue du dessus des fragments obtenus par Zhao	
	et al. (2015a)	102
4.17	Fonctions de densité de probabilité du diamètre des fragments $d_{frag}$	
	obtenus pour LBS-1 (rond bleu) et LBS-3 (carré vert). (a) Distribution	
	en nombre, (b) distribution en masse. $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	103
4.18	Courbes de contrainte/déformation en compression uniaxiale pour le	
	modèle de matériaux (a) cimentés (b) « pleins »	107
4.19	Exemple d'application envisagée pour le modèle développé : simulation	
	d'un concasseur à impact.	108

## Introduction générale

La fragmentation des matériaux est un phénomène qui intervient dans de nombreux systèmes naturels et industriels. Basiquement, elle décrit la séparation d'un bloc ou d'un grain en plusieurs fragments de taille inférieure, sous l'effet d'efforts externes. C'est un phénomène qui intervient à différentes échelles. En mécanique des sols, la fragmentation de grains composant le sol va affecter la stabilité de celui-ci, et entraîner un changement de comportement mécanique qui peut, par exemple, entraîner le déclenchement de glissements de terrain. Elle intervient également à l'échelle de systèmes géologiques, par exemple la fissuration de massifs rocheux, qui influence leur stabilité et entraîne le décrochage de blocs. La stabilité des failles sismiques peut également être influencée par la rupture des grains situés sur le plan de faille, comme schématisé sur la figure 1a. Ces ruptures vont influencer la résistance au cisaillement de la faille, ce qui peut amener au déclenchement du séisme (Abe and Mair, 2005, 2009; Kawamura et al., 2012).

De nombreux procédés industriels mettent en jeu la fragmentation de particules. Un exemple typique est la production de granulats en carrières. En effet, dans le domaine du génie civil, les granulats sont un des constituants essentiels de la construction. On peut par exemple citer la fabrication des bétons, des enrobés pour la voirie, mais également du ballast permettant de garantir la tenue et la stabilité des rails de chemins de fer. Les granulats sont produits à partir de blocs de roches massives, par des opérations de concassage. Le concassage est un procédé dont le but est de réduire la taille d'un granulat en le cassant sous l'action de contraintes mécaniques. Ce procédé est effectué avec des concasseurs (Fig. 1b), qui sont des systèmes permettant la fragmentation de blocs de roche de manière très dynamique. Cependant, les granulats ainsi produits doivent satisfaire aux exigences des différentes normes de construction en terme de taille, forme ... La fabrication du ballast est particulièrement exigeante en terme de propriétés géométriques des granulats. Pour qu'une voie ferrée soit suffisamment stable et drainante, le ballast qui la compose doit être, d'une part, de taille adéquate et, d'autre



FIGURE 1: (a) Schéma des grains au niveau d'une faille sismique, dont la rupture influence la résistance au cisaillement de celle-ci. (b) Exemple de concasseur à impact utilisé pour la production de granulats.

part, suffisamment anguleux. Il s'en suit donc une sélection drastique des granulats issus des concasseurs industriels et, par conséquent, une mise à l'écart très importante de granulats non-conformes (c'est-à-dire de taille ou de forme inadaptée) à la sortie du concasseur. Une meilleure compréhension des phénomènes mis en jeu au sein d'un concasseur amenant à la fragmentation du matériau permettrait donc d'en optimiser le fonctionnement et ainsi de faire des économies en ressources naturelles et en coût énergétique de la production de granulats.

La fragmentation intervient également dans l'extraction de minerais, la construction de tunnel par fragmentation de la roche à l'avant du tunnelier, l'extraction d'hydrocarbures fossiles par fracturation hydraulique ... La multiplicité de ses applications en font un phénomène dont l'étude revêt une grande importance, à la fois en terme de sécurité des populations et en terme de productions industrielles.

Néanmoins, bien que ce phénomène soit étudié depuis de nombreuses années, il reste encore mal maîtrisé. La difficulté pour décrire et prédire la rupture d'un grain provient du nombre important de paramètres entrant en jeu dans ce phénomène. Ces derniers peuvent être classés en quatre grandes familles :

- la taille et la forme du grain,
- la microstructure (roches, métaux, céramiques,...),
- le mode de chargement (compression/traction, cisaillement, quasi-statique/dynamique),
- le confinement lié à l'entourage du grain.

L'effet de la taille d'un grain sur sa contrainte de rupture est bien compris notamment dans le cas d'un grain circulaire (Tsoungui et al., 1999a,b; Thornton et al., 2004).



FIGURE 2: Différents modes de fragmentation d'une particule et influence sur la distribution de fragments obtenus, tiré de (Salman et al., 2007).

Cependant, l'ajout dans les modèles de l'effet d'une forme quelconque de grain, comme on peut l'observer dans la nature, rend extrêmement compliquée sa modélisation. Cet effet de forme, couplé avec le type d'effort, son intensité et sa zone d'application va conduire à différents motifs de rupture. Par conséquent, ceci va directement influencer la distribution de taille des fragments obtenus, comme nous pouvons le voir sur la figure 2.

Le mode de chargement (compression/traction, cisaillement) a bien évidemment une influence sur la fragmentation du grain, à la fois en terme de résistance et de motif de rupture. Le confinement subi, par exemple la pression au sein des sols mais également les forces externes liées à la présence de voisins entourant le grain, va également influencer la contrainte nécessaire pour le fracturer. Enfin, le type de matériau et notamment sa microstructure va avoir une influence très importante sur sa fragmentation. En effet, en fonction du type de matériau (roches sédimentaires, métamorphiques, volcaniques, métaux, céramiques . . .) différents comportements seront observés (rupture fragile/ductile, résistance en compression/traction/cisaillement . . .). L'étude de l'influence de la microstructure du grain sur son comportement à la rupture est d'autant plus difficile qu'il faut à la fois déterminer cette microstructure (microscopie, tomographie RX . . .) mais également la relier au comportement macroscopique du matériau. C'est pourquoi la plupart des modèles n'en tiennent que peu compte et se contentent d'une description à une échelle plus grande.



FIGURE 3: Différence de microstructure entre un grès Ronsard (a) et un granite (b).

La fragmentation a tout d'abord été étudiée expérimentalement, et de manière intensive à partir des années 30, entraînant le développement de modèles statistiques permettant de caractériser l'effet de la microstructure et de la présence de défauts internes sur la variabilité des résistances obtenues (Weibull, 1939; Griffith, 1921; Irwin, 1957). Ensuite, des modèles décrivant plus finement la réponse macroscopique non linéaire du matériau, ainsi que les différentes phases menant à sa rupture ont été développés (Wawersik and Brate, 1971; Cook, 1965; Fell and Newton, 1970; Franklin, 1971; Hardin and Asce, 1986; Hoek and Bieniawski, 1965; Hoek, 1968; Holman and Leuenberger, 1988; Janach, 1976, 1977; Kendall, 1978; Peng and Johnson, 1972). Cependant, pour comprendre plus en détail l'origine de l'apparition et la propagation de fissures il devient nécessaire de caractériser les phénomènes opérant à l'échelle microscopique du matériau, dont l'observation est bien souvent difficile voir inaccessible expérimentalement (réseau de forces, réarrangements, déformations ...). Pour palier ces difficultés, la modélisation numérique de la fracture des matériaux est apparue comme l'outil le plus adapté. En effet, ces méthodes permettent d'accéder à des paramètres non mesurables expérimentalement, et ainsi de comprendre plus finement l'origine de l'apparition de fissures responsables de la fracturation. Cependant, la capacité d'une modélisation numérique à décrire le phénomène dépend directement du modèle employé qui, dans tous les cas, fourni une description incomplète du système réel. Toute la difficulté réside donc dans l'élaboration de ces modèles, dont la qualité de description de l'influence des phénomènes microscopiques sur la réponse macroscopique du matériau est en constante évolution.

Comme nous l'avons dit précédemment, un des paramètres importants conditionnant la fragmentation du matériau est la microstructure de celui-ci. A l'échelle des sous-particules (grains, cristaux,...) composant le matériau, on trouve bien souvent des arrangements qui peuvent être ordonnés ou désordonnés, avec ou sans vide, multiphasiques, hétérogènes, et incluant des défauts (pré-fissures), comme on peut le voir sur la figure 3 qui présente les microstructures d'un grès et d'un granite. Bien que la prise en compte de toutes ces caractéristiques microscopiques soit difficile voir impossible, il est néanmoins essentiel de pouvoir en quantifier l'influence sur le comportement macroscopique du matériau, et notamment sa fracturation qui va mener à sa fragmentation.

Ce travail de thèse a pour objectif de développer un modèle numérique basé sur une description aux éléments discrets, permettant une meilleure prise en compte de la microstructure réelle des roches. Le modèle développé doit être applicable à deux grands types de roches : les roches sédimentaires composées de grains souvent entourés par une matrice qui les cimente et les matériaux que nous appellerons dans la suite « pleins » dans lesquels les particules sont imbriquées et constituent un empilement de compacité 1. De plus, la forme des grains composant ces matériaux étant rarement régulière, ce modèle doit permettre l'utilisation de polygones (2d) ou de polyèdres (3d), plus rarement utilisés dans les méthodes aux éléments discrets du fait d'une complexité de résolution des équations de la mécanique plus grande en comparaison des particules circulaires/sphériques habituellement utilisées.

Un modèle mixte combinant (a) une approche de type dynamique des contacts pour la résolution des contacts géométriques entre les particules, et (b) une modélisation séparée de l'effet d'une pâte cohésive permettant d'introduire la cohésion dans le matériau a été développé. Ce modèle a ensuite été appliqué à l'étude de matériaux cimentaires, et notamment leur comportement à la rupture dans le cas de sollicitations en compression uniaxiale. L'influence des différents paramètres microscopiques sur la réponse macroscopique du modèle est également étudiée. Ce modèle ainsi que les résultats obtenus ont fait l'objet d'une publication dans le journal « Journal of the Mechanics and Physics of Solids ». Des modifications ont ensuite été apportées pour que le modèle soit applicable aux matériaux pleins. Les différences de comportement à la rupture entre ces deux types de matériaux ont été étudiées. Enfin, le modèle développé a été appliqué à l'étude de l'influence du positionnement de points de contact externes sur la rupture d'une particule cylindrique. Les résultats ont été comparés à ceux obtenus lors d'une expérience de fragmentation dynamique par impact. Dans la suite de ce manuscrit, le premier chapitre va présenter différentes méthodes aux éléments discrets appliquées à la rupture de matériaux fragiles. Nous détaillerons les différentes approches éxistantes, ainsi que leurs limitations respectives. La méthode de la dynamique des contacts non régulière, qui est utilisée dans ce travail sera également présentée plus en détail.

Le chapitre 2 va présenter en détail le modèle qui a été développé, ainsi que la méthode de préparation des échantillons. Sa capacité à reproduire une rupture fragile sera démontrée. Une étude de l'influence des paramètres du modèle ainsi que des caractéristiques de l'empilement sur le comportement obtenu sera également présentée. Enfin, le modèle sera appliqué à la simulation de matériaux « pleins » représentés par des empilements obtenus à partir de tessellations de Voronoï, et leurs différences avec les matériaux cimentés seront commentées.

Le chapitre 3 se concentrera sur l'étude de l'influence du positionnement des points de contact représentant la présence de voisins disposés autour du grain, sur sa résistance à la fragmentation. En effet, bien que certains modèles existants prennent déjà en compte cet effet de confinement lié au voisinage (Tsoungui et al., 1999a; Ben-Nun and Einav, 2010), les études numériques effectuées durant cette thèse ont montré que, même dans le cas idéal d'une particule cylindrique soumise à trois points de contact, leurs positions influencent fortement la résistance de la particule. Ce chapitre est composé de deux parties : une première partie qui présente l'étude numérique effectuée, et une deuxième partie qui détaille le dispositif expérimental qui a été développé et les résultats obtenus.

Le chapitre 4 présentera une méthode permettant la reconstruction de grains de formes réelles à partir d'images tomographiques. En effet, la forme irrégulière des grains réels influence fortement leur résistance à la fragmentation et ainsi les distributions de tailles et de formes des fragments obtenus. Néanmoins, la prise en compte de la forme des grains nécessite à la fois la mise en oeuvre de méthodes permettant sa mesure, principalement par tomographie, mais également sa reconstruction en 3d et le développement de modèles numériques qui permettent de représenter la nature cohésive du matériau ainsi que sa fracturation. La méthode de reconstruction qui a été utilisée sera détaillée, et des résultats de compression simple seront présentés.

Enfin, une conclusion résumera les différents éléments présentés dans ce travail, ainsi que les perspectives envisagées pour le suite de ce travail.

## Chapitre 1

## Méthodes aux éléments discrets pour la modélisation de matériaux fragiles

De nombreuses méthodes numériques pour la modélisation de matériaux fragiles ont été développées (Jing and Hudson, 2002; Jing, 2003). De manière générale, ces méthodes sont classées dans deux grandes catégories dépendant de la représentation qui est faite du matériau : continues et discrètes. Parmis les méthode continues, la méthode aux éléments finis (FEM) est probablement la plus utilisées pour la modélisation de la fissuration des matériaux. Elle consiste en la resolution d'équations aux dérivées partielles décrivant le comportement du matériau. Cependant, son application à la modélisation de la fissuration pose plusieurs difficultés. En effet, la présence de singularités dégrade fortement la convergence de la méthode, problème qui ne peut être uniquement résolu que par un raffinement du maillage au niveau de cette singularité, au prix de temps de calcul croissant. Néanmoins, un enrichissement de la FEM avec des fonctions décrivants ces singularités à donné naissance aux éléments finis étendus (X-FEM), permettant de contourner les problèmes de convergences de la FEM en cas de présence de fissure (Moës et al., 1999). On peut citer également les méthodes de zone cohésives (CZM) qui modélisent la propagation d'une fissure comme un phénomène graduel correspondant à l'endommagement au sein du matériau, basées sur les modèles de Dugdale (1960) et Barenblatt and Cherepanov (1960). Ces modèles décrivent la présence d'une zone à l'intérieur de la propagation de la fissure va se faire de manière progressive. La fissure est considérée comme une interface entre les éléments régie par une loi de comportement, souvent formulée sous forme de critères énergétiques, permettant de relier la contrainte appliquée aux lèvres de la fissure à la séparation des interfaces (Renouf et al., 2013; Rivière et al., 2015; Roth et al., 2014; Feng et al., 2012).



FIGURE 1.1: Déformation des liens reliant les nœuds du réseau (Herrmann et al., 1989).

Les méthodes discrètes considèrent le matériau comme un ensemble d'éléments identifiables qui interagissent via des lois de comportement. Ces méthodes sont utilisés intensivement dans la modélisation de milieux granulaires, et également été appliquées avec succès à la modélisation de la fracturation de matériaux fragiles. C'est ce type de méthode qui est utilisé dans ce travail de thèse, nous allons donc présenter dans la suite une liste non exhaustive des différents modèles éxistants dans la littérature pour la modélisation de matériaux fragiles.

### 1.1 Méthode sur réseau : « Lattice Element Method »

L'utilisation de réseaux d'éléments pour représenter un milieu continu et résoudre les problèmes d'élasticité a été proposée initialement par Hrennikoff dans les années 40 (Hrennikoff, 1941). Ce concept a ensuite évolué pour arriver au développement de modèles composés d'éléments 1*d* disposés sur un réseau permettant l'analyse de la rupture des matériaux (Herrmann et al., 1989; Herrmann and Roux, 1990; Schlangen and van Mier, 1992; Schlangen and Garboczi, 1996; Yip et al., 2006; Topin et al., 2007; Affes et al., 2012; Qian and Schlangen, 2012). Cette méthode consiste à représenter les différentes phases du matériau (grain, pâte cimentaire) par des nœuds disposés sur un réseau (régulier ou irrégulier) (Fig. 1.1) reliés entre eux par des éléments mécaniques qui vont contenir les propriétés microscopiques (raideurs, seuil de rupture, ...). Un premier avantage de ces méthodes est que la connectivité des nœuds est connue à l'avance avec un nombre fixe de voisins. Il n'est donc pas nécessaire d'effectuer les étapes de recherche de voisinage coûteuses en temps de calcul comme c'est le cas pour la DEM présentée dans la suite.

Chaque élément du réseau, reliant deux nœuds de celui-ci, va permettre de décrire le comportement élastique et fragile de chaque phase qu'il représente (Schlangen and van Mier, 1992). Classiquement, deux types d'éléments sont utilisés : le ressort et la poutre. Le ressort est un élément simple qui ne peut transmettre que des efforts en traction/compression suivant la direction de l'élément. La force de réaction F due à l'élongation ou la contraction de l'élément est donnée par :

$$F = k\Delta l,$$

avec k une raideur et  $\Delta l$  une élongation. La réponse élastique macroscopique du matériau ainsi modélisé va être assurée par la réaction de chacun de ces éléments, ajoutée à la connectivité des nœuds. Dans le cas d'un réseau régulier triangulaire, Schwartz et al. (1985) donnent les expressions du module d'élasticité isostatique K et du module de cisaillement G macroscopique :

$$K = \frac{\sqrt{3}}{2}k \qquad G = \frac{\sqrt{3}}{4}k.$$

On remarque que dans le cas de réseau régulier et d'un modèle d'éléments simple, les relations micro/macro obtenues sont triviales, tout comme leur résolution numérique.

Le modèle de poutres constitue une amélioration de la description du comportement microscopique par rapport au modèle à ressorts, et donc une meilleure représentation du comportement macroscopique attendu. Ces poutres peuvent transmettre non plus seulement des efforts en traction/compression, mais également en cisaillement et flexion (et torsion en 3d). La réaction de traction/compression F, de cisaillement Q et le couple en flexion M sont alors donnés par Schlangen and Garboczi (1996) :

$$F = \frac{EA}{l}(U_i - U_j),$$
$$Q = \frac{12EI}{l^3}(V_i - V_j) - \frac{6EI}{l^2}(\theta_i - \theta_j),$$
$$M = \frac{6EI}{l^2}(V_i - V_j) - \frac{4EI}{l}(\theta_i - \frac{\theta_j}{2}),$$

avec E, A, I, l, le module d'Young, la surface de section, le moment d'inertie et la longueur de la poutre respectivement, U et V étant les déplacements et vitesses des nœuds, et  $\theta$  leur rotations. Schlangen and Garboczi (1996) donnent les modules



FIGURE 1.2: Propagation de la fissure dans un réseau régulier (à gauche) et irrégulier (à droite) soumis à un test en traction (Topin et al., 2007).

élastiques et le coefficient de Poisson pour le cas d'un réseau triangulaire :

$$\begin{split} K &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{EA}{l} \qquad G = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{EA}{l} (1 + \frac{12I}{Al^2}), \\ \nu &= \frac{K - G}{K + G} = (\frac{1 - \frac{12I}{Al^2}}{3 + \frac{12I}{Al^2}}) - 1 \leq \frac{1}{3}. \end{split}$$

L'apparition de fractures dans le matériau se fait à l'échelle des éléments du réseau, par l'utilisation d'un seuil en force au delà duquel l'élément sera rompu et ne transmettra plus d'efforts entre les deux nœuds qu'il relie. L'initiation et la propagation de fracture sera donc la conséquence de ruptures successives d'éléments du réseau.

Le choix d'un réseau régulier a l'inconvénient de créer des chemins de fracture de faible énergie, et de ce fait d'introduire un biais sur la direction de fissure (Fig. 1.2). Pour introduire du désordre à l'échelle microscopique Bolander and Sukumar (2005) ont proposé un modèle basé sur l'utilisation de réseaux irréguliers construits à partir d'une tessellation de Voronoï tel que le réseau présenté sur la figure 1.3. Ce modèle a ensuite été utilisé pour l'étude de la rupture de poutres de béton en flexion trois points (Bolander and Sukumar, 2005; Berton and Bolander, 2006; Yip et al., 2006) et en traction uniaxiale (Asahina and Bolander, 2011).

### 1.2 La méthode aux éléments discrets (DEM)

La méthode aux éléments discrets (DEM) fut initialement développée par Cundall (1988) pour l'étude des matériaux granulaires. Le matériau est modélisé par une assem-



FIGURE 1.3: Réseau construit à partir d'une tessellation de Voronoï (Bolander and Sukumar, 2005).

blée de disques (sphères à 3d) dont les déplacements sont calculés à partir des lois de Newton, auxquelles sont ajoutées des lois de contact rendant compte des interactions entre particules. Bien qu'initialement développée pour l'étude de milieu non-cohésifs, elle a ensuite été adaptée pour l'étude de la rupture des roches (Donzé et al., 1997; Cleary, 2001; Cheng et al., 2003; Bolton et al., 2004; D'Addetta, 2004; Carmona et al., 2008; Bolton et al., 2008; Ferellec and McDowell, 2010; Bagherzadeh Kh. et al., 2011; Brosh et al., 2011; Bruchmüller et al., 2011; Cil and Alshibli, 2012; Alaei and Mahboubi, 2012; André et al., 2012; Alonso et al., 2013; André et al., 2013; Elghezal et al., 2013; de Bono and McDowell, 2013; Jiang et al., 2014; Carmona et al., 2014; Bono et al., 2014; Brown et al., 2014; de Bono and McDowell, 2014; Cantor et al., 2015; Cantor and Estrada, 2015). Dans la suite nous allons présenter quelques unes des approches se basant sur la DEM pour la modélisation de la rupture de matériaux fragiles.

#### 1.2.1 Le Modèle « Contact Bond »

Le modèle « Contact Bond » (CB) permet de représenter la cohésion du matériau en introduisant des points de colle entre les particules. Ces points de colle sont modélisés par un couple de ressorts dans les directions normales et tangentielles permettant l'introduction de forces de rappel résultant des déplacements relatifs entre deux particules (Fig. 1.4). Ce type de modèle pose plusieurs inconvénients. Tout d'abord lors de la rupture du lien cohésif, la raideur du contact est toujours active si les particules restent en contact. Ceci implique que lors de la rupture du lien et si le contact est maintenu, cette dernière n'aura que peu d'impact sur la réponse macroscopique du matériau, contrairement à ce que l'on attendrait pour un matériau fragile comme une roche. De plus, aucune résistance n'est opposée au moment généré par les rotations relatives des particules. Les rotations des particules sont généralement soit totalement libres, et donc



FIGURE 1.4: Modèle de type « contact bond » (Cho et al., 2007).

contrôlées uniquement par les moments dus aux forces de contact tangentielles s'exerçant sur la particule, soit strictement bloquées, c'est à dire fixées à zéro. Cependant, des études ont montré que la rotation relative des particules au niveau microscopique est d'une grande importance car elle influe sur la contrainte de rupture du matériau (Oda et al., 1982; Jiang et al., 2005, 2006), ainsi que sur sa dilatance (Oda and Kazama, 1998).

Pour combler ce manque, Jiang et al. (2005, 2006) ont développé un modèle de contact incluant la résistance à la rotation des particules. Dans ce modèle, le point de colle entre deux particules est représenté par plusieurs éléments basiques (BE) répartis régulièrement sur sa longueur. Chaque élément basique est constitué d'un couple ressort/amortisseur dans la direction normale et dans la direction tangentielle. Un séparateur est ajouté en série pour le BE normal, modélisant le fait que la force de traction n'est pas transmise à travers le BE normal si les particules ne sont plus en contact à cet endroit. De manière similaire, un patin glisseur est ajouté en série au BE tangentiel, pour modéliser la résistance due au frottement introduit par le déplacement tangentiel. La zone de contact entre deux particules est décomposée en une succession de BE (Fig. (1.5a), de sorte qu'une rotation relative des particules va introduire un couple s'opposant à cette rotation, comme schématisé sur la figure 1.5b. Des raideurs moyennes pour la réaction normale, tangentielle et de rotation sont ainsi déterminées pour le point de contact. Les résultats obtenus avec ce modèle ont montré que l'introduction de résistance à la rotation des particules via une distribution d'éléments basiques sur la zone de contact a pour conséquence une augmentation du seuil de rupture de l'échantillon, mais également de l'angle de frottement interne.



FIGURE 1.5: Modèle de contact incluant la rotation relative des particules, d'après Jiang et al. (2005).

### 1.2.2 Le modèle « Bonded Particle »

En se basant sur la description d'une roche comme étant un ensemble de particules cimentées par une pâte disposée entre elles, Potyondy and Cundall (2004) ont proposé le « Bonded-Particle Model », devenu une référence dans la modélisation de matériaux fragiles par DEM. Ce modèle sépare le comportement de contact entre deux particules de celui de la pâte qui les cimente.

#### Comportement de contact entre particules

Lorsque deux particules s'interpénètrent, un contact est défini et deux ressorts sont mis en place dans les directions normale et tangentielle au contact. Un patin glisseur est également ajouté au ressort tangentiel pour modéliser le frottement entre les particules. La force de réaction F au contact est donnée par :

$$F = F^n \boldsymbol{n} + F^s \boldsymbol{t},$$

avec n, t les vecteurs unitaires normal et tangentiel définissant le plan de contact. La composante normale de la force de réaction  $F^n$  est donnée par :

$$F^n = K^n U^n,$$

 $U^n$  étant l'interpénétration entre les particules et  $K^n$  la raideur normal au contact. La composante tangentielle  $F^s$  est calculée de manière incrémentale comme (Hart et al., 1988) :

$$F^s = -k^s \Delta U^s,$$

avec  $k^s$  la raideur tangentielle et  $\Delta U^s$  l'incrément de déplacement tangent.

Si un interstice est présent entre les particules  $(U^n \leq 0.)$ , le contact n'existe plus et les forces normales et tangentielles sont mises à zéro. Le frottement induit par le glissement relatif des deux particules est introduit en bornant la force tangentielle avec  $F^s = \mu F^n$  si  $F^s > \mu F^n$ ,  $\mu$  étant le coefficient de frottement au contact.

#### Comportement de la pâte cimentaire

La cohésion du matériau est introduite par la présence d'une pâte cimentaire se trouvant entre les particules. Cette pâte est modélisée par un lien superposé au contact. Ce lien parallèle va permettre d'introduire une résistance à la traction mais également de transmettre le couple lié à la rotation relative des particules. Les forces et moments portés par le lien cohésif sont donnés par :

$$\bar{F} = \bar{F}^n \boldsymbol{n} + \bar{F}^s \boldsymbol{t},$$
$$\bar{M} = \bar{M}^n \boldsymbol{n} + \bar{M}^s \boldsymbol{t},$$

avec  $\bar{F}^n, \bar{F}^s, \bar{M}^n$  et  $\bar{M}^s$  les forces et moments dans les directions normale et tangentielle respectivement. Les réactions dues au lien cohésif sont calculées de manière incrémentale, et donc initialisées à zéro lors de la formation du lien cohésif. Leurs expressions sont données par :

$$\Delta \bar{F}^n = \bar{k}^n A \Delta U^n,$$
  

$$\Delta \bar{F}^s = -\bar{k}^s A \Delta U^s,$$
  

$$\Delta \bar{M}^n = -\bar{k}^s J \Delta \theta^n,$$
  

$$\Delta \bar{M}^s = -\bar{k}^n I \Delta \theta^s,$$

avec A la section du lien, I son moment d'inertie et J son moment d'inertie polaire. Les composantes normale et tangentielle de l'incrément de rotation relative sont données respectivement par  $\Delta \theta^n$  et  $\Delta \theta^s$ .

Avec ce type de modélisation, l'initiation et la propagation de fissures dans le matériau se fait par la rupture de liens cohésif. Les contraintes en traction (négative par convention) et en cisaillement maximales agissant sur le lien cohésif sont données par :

$$\bar{\sigma}^{max} = \frac{-\bar{F}^n}{A} + \frac{|\bar{M}^s|\bar{R}}{I},$$
$$\bar{\tau}^{max} = \frac{|\bar{F}^s|}{A} + \frac{|\bar{M}^n|\bar{R}}{J},$$



FIGURE 1.6: Modèle « bonded particle » couplant la description du contact et la pâte cimentaire (Potyondy and Cundall, 2004).

avec  $\bar{R}$  le rayon de la section du lien cohésif. Le lien va rompre si la contrainte en traction  $\bar{\sigma}^{max}$  dépasse sa résistance en traction  $\bar{\sigma}_c$ , ou si la contrainte en cisaillement  $\bar{\tau}^{max}$  dépasse la résistance en cisaillement  $\bar{\tau}_c$ . On remarque que le critère de rupture tient compte des translations relatives des particules mais également des efforts dus au couple généré par leurs rotations relatives. De plus, comme la raideur globale de l'interaction entre les particules est due à la raideur du contact à laquelle s'ajoute celle de la pâte cohésive, une rupture du lien cohésif va provoquer une diminution de la raideur du matériau, ce qui n'est pas le cas pour le modèle « Contact Bond » présenté précédemment. Les comportements de contact et de lien cohésif du modèle de Potyondy and Cundall (2004) sont résumés sur la figure 1.6.

Bien que cette approche ait été largement utilisée pour l'étude de la fracture de matériaux fragiles (Obermayr et al., 2013; Galindo-Torres et al., 2012; Utili and Nova, 2008; Hanley et al., 2011), certains auteurs ont mis en évidence que le rapport entre la résistance en compression et en traction obtenu est trop faible pour décrire comportement réel de roches (Cho et al., 2007; Potyondy and Cundall, 2004). En effet, l'utilisation d'empilements composés de particules circulaires ne permet pas de tenir compte du degré d'imbrication des grains dans un matériau réel, ce qui a pour conséquence de produire des angles de frottement interne bien inférieurs à ceux attendus. Potyondy and Cundall (2004) ont proposé d'améliorer leur modèle en utilisant des clusters de particules. Le matériau est ainsi modélisé comme un assemblage de grains eux



FIGURE 1.7: « Clumped particle model » développé par Cho et al. (2007).

mêmes constitués d'un groupe de disques, avec la possibilité d'utiliser des résistances à la rupture différentes pour les liens entre les particules du cluster, et ceux entre les différents clusters. Ceci permet d'introduire un effet d'irrégularité de la forme des grains composant un matériau réel et ainsi d'obtenir des valeurs de frottement interne plus réalistes. En utilisant la même logique de cluster, Cho et al. (2007) ont montré que cela permettait d'améliorer les valeurs de dilatance et de rapport de résistances en compression/traction obtenus. Cependant, ils ont également pointé le fait que les rotations des particules à l'intérieur du cluster ne pouvant être totalement supprimées, celles-ci influencent la résistance macroscopique de l'empilement (Fig. 1.7a). Cho et al. (2007) ont proposé d'utiliser des « mottes (clump) » de particules (Fig. 1.7b) qui se comportent comme un corps rigide. Dans ce modèle, les rotations relatives des particules composant la motte sont supprimées, mais la transmission de moment est toujours possible par la rotation de celle-ci comme un corps rigide. Cette modélisation sous forme de mottes permet d'obtenir des rapports de résistance en compression/traction et de dilatance conformes à ceux mesurés pour des matériaux fragiles. Ces travaux mettent donc en évidence la nécessité d'inclure la forme irrégulière des « grains » et le degré d'imbrication de ceux ci pour modéliser convenablement le comportement d'un matériau fragile avec ce type de modèle.

Cependant, des auteurs (Scholtès and Donzé, 2013, 2012; Hentz et al., 2004a,b) ont proposé un modèle faisant intervenir une longueur d'interaction, permettant de contrôler le degré d'imbrication dans un empilement de particules sphériques. Dans les modèles DEM habituellement utilisés, les liens cohésifs ne sont mis en place qu'entre les particules initialement en contact. Dans le modèle présenté maintenant, l'effet de


FIGURE 1.8: Définition de la longueur d'interaction introduite par Scholtès and Donzé (2013).

la forme irrégulière des grains au sein d'un matériau sur le degré d'imbrication va être modélisé en augmentant le nombre de liens cohésifs supporté par les particules. Pour ce faire, une longueur d'interaction entre les particules est introduite, en deçà de laquelle une interaction cohésive sera mise en place même si les particules ne sont pas directement en contact. Le degré d'imbrication des particules de l'empilement peut ainsi être contrôlé précisément en ajustant cette longueur d'interaction (Fig. 1.8).

Les auteurs ont testé ce modèle avec des simulations de compressions et de tractions uniaxiales, dans le but d'étudier l'effet de cette longueur d'interaction sur le rapport  $\sigma_c/\sigma_t$  obtenu. Certains de leurs résultats sont présentés sur la figure 1.9. La figure 1.9a montre les courbes de contrainte déformation qu'ils ont obtenu pour des simulations calibrées sur une traction identique. Il apparaît très clairement que l'augmentation du nombre de coordination de liens cohésifs accroît la résistance en compression, et donc le rapport  $\sigma_c/\sigma_t$ . La figure 1.9b présente plus précisément les valeurs de ce rapport en fonction du nombre de coordination. Ce modèle démontre ainsi qu'il est possible d'améliorer la prise en compte de la microstructure des grains et de leur rôle sur le comportement macroscopique du matériau, bien que les particules utilisées soient circulaires (disques/sphères). Cependant, ce modèle introduit un paramètre supplémentaire difficile à relier directement à la microstructure du matériau.



FIGURE 1.9: Influence du degré d'imbrication sur le comportement macroscopique du matériau (Scholtès and Donzé, 2013).

#### 1.2.3 Modèles à éléments polygonaux/polyédriques

Les modèles DEM classiquement utilisés pour la modélisation de la fracture de matériaux ont été présentés, ainsi que les améliorations apportées pour modéliser des grains non sphériques dans un matériau malgré l'utilisation de particules circulaires. Cependant, il apparaît naturel de chercher à représenter les formes des grains directement en utilisant des particules de forme irrégulière, et donc de développer des modèles applicables par exemple pour des polygones à 2d et des polyèdres à 3d. En effet, ceci a plusieurs avantages : tout d'abord l'imbrication des particules n'a plus besoin d'être incluse dans la modélisation des liens cohésifs, c'est une caractéristique intrinsèque de l'empilement utilisé, tout comme la forme des particules. Ensuite, ces formes de particules permettent de construire des empilements « pleins », c'est à dire de compacité 1, ce qui n'est pas possible avec des disques/sphères sans recouvrement. De nombreuses études ont montrés l'intérêt d'utiliser des particules de forme polygonale/polyédrique pour améliorer la capacité des modèles à reproduire le comportement de matériaux réels (Zhao et al., 2015b; Zhang et al., 2014; Zhou et al., 2014; Jing, 2003).

#### La difficulté majeure de la détection de contact

L'inconvénient majeur de l'utilisation de polygones/polyèdres est la détection et la résolution du problème de contact entre particules. En effet, dans le cas de disques/sphères la connaissance de leurs rayons respectifs et de la distance entre leurs centres est suffisante pour déterminer la présence de contact et calculer l'interpénétration des particules. Dans le cas de polygones/polyèdres, des algorithmes de détection de contact plus



FIGURE 1.10: Modèle à éléments polygonaux proposé par D'Addetta et al. (2002).

élaborés sont nécessaires, induisant une complexité et un temps de calcul plus important. Cundall (1988) a proposé une méthode basée sur l'utilisation d'un plan commun qui l'espace (ou le volume d'interpénétration) séparant les polyèdres en contact potentiel. La détection consiste ensuite à tester le contact de chacune des deux particules avec ce plan séparément, et se réduit donc au test de positions de sommets avec un plan.

D'Addetta et al. (2002), en se basant sur les travaux de Tillemans and Herrmann (1995), ont utilisé une méthode simplifiée pour la résolution du contact entre polygones. Lorsque deux polygones s'interpénètrent, les deux points d'intersection de leurs arêtes sont déterminés (P1 et P2 sur la figure 1.10a), permettant la définition du repère de contact. Les composantes normales et tangentielles de la force de réaction sont ensuite données par :

$$F^{N} = -\frac{E_{p}A_{p}}{l_{c}} - m_{eff}\gamma^{N}v_{rel}^{N},$$
  
$$F^{T} = -min(m_{eff}\gamma^{T}|v_{rel}^{T}|, \mu|F^{N}|)$$

avec  $E_p$  le module élastique des particules,  $A_p$  l'aire de recouvrement des pentagones,  $l_c$  une longueur caractéristique du contact,  $m_{eff}$  sa masse,  $v_{rel}^N$ ,  $v_{rel}^T$ ,  $\gamma^N$ ,  $\gamma^T$ , les vitesses relatives et les coefficients d'amortissement visqueux normal et tangent, et  $\mu$  le coefficient de frottement. Bien que se basant sur une déformation imaginaire des particules, ce type de résolution du contact permet de relier de manière simple une force de réaction élastique à la surface de recouvrement des pentagones, et ainsi d'utiliser un schéma numérique simple et peu coûteux en temps de calcul.

#### Modélisation du lien cohésif

Tout comme pour la modélisation avec des particules circulaires, plusieurs approches sont disponibles pour la description du lien cohésif en 2d. D'Addetta et al. (2002) introduisent le comportement cohésif via des poutres reliant les centres de masse des polygones. Ces poutres constituent un réseau cohésif superposé au réseau de contacts entre les particules, et en sens ce modèle peut être vu comme un modèle hybride entre les méthodes LEM et DEM. Ces poutres agissent en traction/compression, cisaillement et flexion (fig. 1.10b), et l'inverse des raideurs liées à ces trois types de déformation sont données pour deux particules i et j par :

$$a^{ij} = \frac{l^{ij}}{E_b A^{ij}}$$
  $b^{ij} = \frac{l^{ij}}{G_b A^{ij}}$   $c^{ij} = \frac{l^{ij^3}}{E_b I^{ij}},$ 

avec  $l^{ij}$  la distance séparant les centres de masse des particules i et j,  $E_b$  et  $G_b$  les modules d'Young et de cisaillement de la poutre,  $A^{ij}$  la surface de section, et  $I^{ij}$  le moment d'inertie. Les auteurs posent  $b^{ij} = 2a^{ij}$ , correspondant à un coefficient de Poisson  $\nu_b = 0$  pour toutes les poutres. Les expressions des forces normale et de cisaillement exercées par la poutre sur le centre de masse i de la particule sont données par :

$$F_i^x = \alpha^{ij} (u_x^j - u_x^i),$$

$$F_i^y = \beta^{ij}(u_y^j - u_y^i) - \frac{\beta^{ij}l^{ij}}{2}(\theta^i + \theta^j),$$

le couple de flexion est quant à lui exprimé comme :

$$M_{z}^{i} = \frac{\beta^{ij}l^{ij}}{2}(u_{y}^{j} - u_{y}^{i} + l^{ij}\theta^{j}) + \delta^{ij}l^{ij^{2}}(\theta^{j} - \theta^{i}),$$

avec  $\alpha^{ij} = 1/a^{ij}$ ,  $\beta^{ij} = 1/(b^{ij} + 1/12c^{ij})$ ,  $\delta^{ij} = \beta^{ij}(b^{ij}/c^{ij} + 1/3)$ ,  $(u_x^i, u_y^i)$  les composantes du vecteur déplacement du centre de masse i, et  $\theta^i$  sa rotation.

Un critère de rupture des poutres intégrant la traction et la flexion est ajouté :

$$\left(\frac{\epsilon^{ij}}{\epsilon_{max}}\right)^2 + \frac{max(|\theta^i|, |\theta^j|)}{\theta_{max}} \ge 1,$$

avec  $\epsilon^{ij} = \Delta l^{ij}/l^{ij}$  la déformation longitudinale, et  $\epsilon_{max}$ ,  $\theta_{max}$  les seuils de rupture.

Les auteurs ont testé ce modèle sur un empilement construit à partir d'une tessellation de Voronoï. Cette méthode de construction permet de générer un empilement remplissant totalement l'espace, contrairement aux empilements de disques. Les poly-



FIGURE 1.12: Rupture en compression (a) et en traction (b) obtenus par D'Addetta et al. (2002).

gones obtenus sont de forme irrégulière, cependant Moukarzel and Herrmann (1992) ont proposé une méthode appelée « Vectorizable Random Lattice » permettant de contrôler l'irrégularité des cellules obtenues. D'Addetta et al. (2002) ont utilisé cette méthode pour générer leurs empilements (Fig. 1.11a). Le réseau de poutres superposé aux polygones issus de la tessellation de Voronoï est présenté sur la figure 1.11b.



FIGURE 1.11: (a) Réseau obtenu par la méthode « Vectorizable Random Lattice » permettant de contrôler l'irrégularité des cellules (b) Réseau de poutres superposé à l'empilement de polygones (D'Addetta et al., 2002).

La figure 1.12 présente deux exemples de résultats obtenus par les auteurs en compression et traction uniaxiale. On peut remarquer que le modèle reproduit bien le motif de rupture que l'on peut observer dans le cas de matériaux réels.



FIGURE 1.13: Modèle proposé par Nguyen et al. (2015).

Plus récemment, Nguyen et al. (2015) ont proposé un modèle 2d pour particules polygonales issues d'une tessellation de Voronoï, avec une cohésion agissant sur le côté que partagent les particules. Ce modèle décrit le contact entre particules par la méthode de la dynamique des contacts qui sera présentée plus tard, faisant intervenir une condition de non interpénétration des particules. Lorsque deux polygones partagent une arête, cette interaction est définie par deux points de contact. La cohésion entre les deux éléments se trouve donc à l'interface des deux particules. Les contacts étant traités dans le cadre de la dynamique des contacts, la cohésion n'est pas représentée sous la forme d'une élasticité, mais uniquement d'un seuil critique au delà duquel la cohésion sera perdue. La figure 1.13a schématise les deux points de contact existants à l'interface de deux polygones. Les auteurs ont appliqué ce modèle à la fracturation de grains circulaires en 2d (Fig. 1.13b) soumis à un essai de traction indirecte.

## 1.3 La dynamique des contacts non régulière (NSCD)

La dynamique des contacts non régulière, a initialement été proposée par Moreau (1988) et ensuite développée par Jean (1999). Cette méthode permet de résoudre les contacts entre particules en se plaçant à une échelle plus grande que celle utilisée en DEM. L'utilisation de percussions, c'est à dire d'intégrer les forces de contact sur le pas de temps, permet de travailler avec des temps caractéristiques de contact plus grand, et donc d'autoriser des pas temps également plus grands.

### 1.3.1 Equation de la dynamique

Les interactions entre particules se faisant sous la forme de chocs ou de contacts maintenus, des discontinuités de vitesses sont donc attendues. Pour les méthodes dites « smooth », ces discontinuités sont traitées en régularisant la loi de contact. Néanmoins, dans le cadre de la NSCD, elles sont traitées, imposant la mise en place d'un formalisme basé sur la représentation des réactions sous forme de mesures (Moreau, 1988). La notion d'accélération n'étant plus définie, l'équation de la dynamique est écrite sous la forme d'une équation de mesures différentielles :

$$Md\dot{q} = F(q, \dot{q}, t)dt + Rdv, \tag{1.1}$$

avec M la masse,  $d\dot{q}$  une mesure différentielle d'accélération, dt une mesure de Lebesgue,  $F(q, \dot{q})$  les efforts internes et externes, dv une mesure réelle non négative pour laquelle  $d\dot{q}$ possède une fonction de densité et R représente la densité locale d'impulsion de contact. La forme intégrée sur un intervalle de temps  $]t^i, t^{i+1}]$  de longueur h de l'équation (1.1) s'écrit sous :

$$\begin{cases} M(\dot{q}(t_{i+1}) - \dot{q}(t_i)) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} F(s, q, \dot{q}) ds + \int_{]t_i, t_{i+1}]} R dv, \\ q(t_{i+1}) = q(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \dot{q}(s) ds, \end{cases}$$
(1.2)

avec ds une mesure de Lebesgue. L'impulsion moyenne R(i+1) durant l'événement de contact est donnée comme :

$$R(i+1) = \frac{1}{h} \int_{]t_i, t_{i+1}]} Rdv.$$

Le calcul des intégrales du système (1.2) par une  $\theta$ -méthode fournit le système suivant :

$$\begin{cases} \dot{q}(i+1) = v_{free} + whR(i+1), \\ q(i+1) = q(i) + \theta h\dot{q}(i+1) + (1-\theta)h\dot{q}(i), \end{cases}$$
(1.3)

avec  $\theta$  un paramètre réel compris entre 0.5 et 1, w l'inverse d'une matrice de masse et  $v_{free}$  la valeur de  $\dot{q}(i+1)$  quand le contact n'est pas pris en compte ( $hR(i+1) \rightarrow 0$ ). Le détail des opérations permettant d'arriver au système est fournie par Jean (1999).

#### **1.3.2** Description du contact

#### Condition de Signorini

Les corps étant considérés parfaitement rigides, les contacts sont considérés unilatéraux, et doivent donc satisfaire à la condition d'inpénétrabilité, appelée condition de Signorini. Elle s'exprime comme :

$$g \ge 0, \qquad r_N \ge 0, \qquad gr_N = 0,$$

avec g l'interstice entre les particules et  $r_N$  l'impulsion normale au contact. Cette condition est représentée de manière schématique sur la figure 1.14a. Cette relation peut être réécrite en fonction de la vitesse normale au contact  $U_N$  pour donner la condition de complémentarité en vitesse (Moreau, 1988) :

$$U_N(t) \ge 0, \qquad r_N(t) \ge 0, \qquad U_N(t)r_N(t) = 0$$

#### Frottement de Coulomb

Le frottement au contact est décrit par la loi de Coulomb, qui stipule que l'impulsion tangentielle de contact  $r_T$  se trouve dans le cône de Coulomb, c'est à dire :

$$|r_T| \le \mu r_N,$$

avec  $\mu$  le coefficient de frottement. Si la vitesse tangentielle  $U_T$  est non nulle, alors l'impulsion vaut  $\pm \mu r_N$ . Cette loi de frottement est représentée sur la figure 1.14b. On remarque bien que les lois de contact ne sont pas exprimées en terme de force comme c'est le cas en smooth-DEM, mais sous forme de condition à respecter.

#### 1.3.3 Résolution du problème

Les équations de la dynamique et les lois de contacts étant établies, une méthode de résolution du système va être présentée (Jean, 1999). Il est tout d'abord nécessaire d'établir les relations permettant le passage du repère du corps au repère du contact. La vitesse relative  $U^{\alpha}$  du contact  $\alpha$  est donnée par :

$$U^{\alpha} = H^{*\alpha}(q)\dot{q},$$



FIGURE 1.14: Lois de contact généralisées, d'après Moreau (1988) et Jean (1999).

avec  $H^{*\alpha}$  la transposée de la matrice linéaire  $H^{\alpha}$  (voir Renouf et al. (2004)). De manière équivalente, la relation entre l'impulsion de contact  $r^{\alpha}$  et la réaction R sur le corps :

$$hR = H^{\alpha}(q)r^{\alpha}.$$

En se basant sur l'équation (1.3), le système à résoudre s'écrit, sous forme condensée :

$$U^{\alpha}(i+1) = U^{\alpha}_{free} + \sum_{\beta} W^{\alpha\beta} r^{\beta}(i+1),$$

avec  $W^{\alpha\beta} = H^{*\alpha} w H^{\beta}$  et  $U^{\alpha}_{free} = H^{*\alpha} v_{free}$ .

Ce système doit être résolu sous la contrainte des lois de contact  $(SignCoul(i, U^{\alpha}, r^{\alpha}))$ dans les équations suivantes) définies précédemment. Il peut être réécrit sous la forme :

$$\begin{cases} U^{\alpha}(i+1) = U^{\alpha}_{locfree} + W^{\alpha\alpha}r^{\alpha}, \\ SignCoul(i, U^{\alpha}, r^{\alpha}), \end{cases},$$
(1.4)

avec :

$$U^{\alpha}_{locfree} = U^{\alpha}_{free} + \sum_{\beta \neq \alpha} W^{\alpha\beta} r^{\beta},$$

Les inconnues du système sont donc la vitesse relative du contact  $U^{\alpha}$  et l'impulsion  $r^{\alpha}$ , qui sont reliés par une équation linéaire.

## 1.4 Le code LMGC90

La méthode NSCD est implémentée dans le code de calcul par éléments discrets LMGC90 développé au laboratoire LMGC (UMR5508, CNRS, Univ. de Montpellier) (Renouf et al., 2004; Dubois et al., 2011), qui est le code utilisé pour l'ensemble des simulations effectuées dans cette thèse. Ce code a été utilisé pour la simulation de nombreux systèmes, allant de l'écoulement de particules, la compaction, le tassement de voies ballastées, la maçonnerie, ou encore à l'étude de la stabilité de massifs rocheux.

Le code LMGC90 dispose d'un solveur permettant la résolution du système (1.4) pour particules de formes polygonales/polyédriques, appelé solveur NLGS (Non-Linear Gauss-Seidel) pour sa similitude avec la méthode de Gauss-Seidel.

## 1.5 Conclusion sur les méthodes numériques

Les méthodes numériques sont des outils qui ont prouvé leur efficacité dans la modélisation de la rupture des matériaux. Les méthodes aux éléments discrets ont fait l'objet de nombreux développements les deux dernières décennies car elles permettent de simuler le comportement macroscopique à la rupture d'un matériau par une modélisation relativement simple des interactions entre les particules qui le composent.

Ce chapitre a présenté de manière non exhaustive les différentes modèles numériquesaux éléments discrèts couramment utilisés pour étudier la fracturation. Bien qu'étant les plus utilisées en DEM, les particules circulaires/sphériques ne permettent pas directement de tenir compte de la forme réelle des particules composant la microstructure d'un matériau, et donc de son effet sur son comportement à la rupture. Les modèles basés sur l'utilisation de particules de forme irrégulière apparaissent donc comme une étape supplémentaire vers une description plus complète des phénomènes intervenant à l'échelle microscopique. Cependant, ces formes de particules génèrent une difficulté croissante en terme de détection et résolution des contacts, et constituent de ce fait leur principale limitation.

Un modèle cohésif applicable à toute forme de particule et permettant de modéliser la cohésion dans des matériaux cimentés ou « pleins » a été développé. Ce modèle est présenté en détail dans le chapitre suivant, ainsi que sa validation.

## Chapitre 2

# Développement d'un modèle cohésif discret pour particules de formes arbitraires

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter un modèle de cohésion 2d/3d applicable quelle que soit la forme des particules. Les modèles de cohésion couramment utilisés en DEM sont bien souvent développés spécifiquement pour des empilements de disques en 2d ou de sphères en 3d. L'utilisation de cette forme de particule permet de simplifier grandement la détection et la résolution du problème de contact au détriment de la prise en compte de l'effet de la forme des grains composant un matériau réel. Pourtant, la microstructure des roches joue un rôle fondamental sur le comportement macroscopique du matériau, et notamment sa fragmentation. Il est donc intéressant de pouvoir utiliser des particules de formes plus complexes, et plus proches de la forme réelle des grains, pour la modélisation de la fragmentation des roches. De plus, il devient envisageable de générer un empilement numérique à partir de la reconstruction d'un matériau réel obtenu par tomographie X, et donc de simuler numériquement la fragmentation d'un échantillon construit à partir de la microstructure réelle du matériau. La réalisation d'empilements de grande compacité allant jusqu'à 1 pour décrire les matériaux "pleins" devient également possible.

Nous avons développé un modèle de cohésion valable pour toute forme de particules en 2d et 3d. Ce modèle doit permettre de modéliser la cohésion quelle que soit la compacité de l'empilement, et donc de gérer la cohésion à distance lorsque les particules ne sont pas directement en contact pour le cas de matériaux cimentés. La complexité de développer un tel modèle permettant de gérer le contact et la cohésion pour des particules de formes arbitraires nous a donc amené à découpler la gestion du contact de celle de la cohésion. Le modèle, ainsi que les résultats présentés pour les matériaux cimentaires ont fait l'objet d'une publication dans le "Journal of the Mechanics and Physics of Solids".

## 2.2 Modélisation des interactions entre particules

Dans ce modèle, une interaction entre deux particules sera différenciée entre une interaction de contact, lorsque les particules se touchent, et une interaction cohésive représentant une pâte cimentaire disposée entre les grains et assurant la cohésion du matériau. Le fait de découpler l'interaction de contact de l'interaction cohésive permet la modélisation de deux comportements différents : le contact entre particules rigides et l'effet d'un matériau élastique déformable assurant une cohésion entre les particules. Nous avons fait le choix dans ce modèle de considérer les particules composant le matériau comme parfaitement rigides et incassables. De ce fait, seule la pâte cimentaire peut se déformer et rompre. Bien que développé au départ pour traiter des matériaux cimentaires, le cadre conceptuel peut être utilisé pour décrire des matériaux "pleins". Pour plus de clarté, le modèle est présenté dans la suite pour un matériau cimentaire. Les adaptations apportées pour la modélisation d'un matériau "plein" seront présentées dans la section 2.4.

#### 2.2.1 Contact entre particules

Le contact entre particules est résolu par la méthode de la dynamique des contacts non régulière (NSCD), qui a été présentée dans la section 1.3 et est modélisée avec une condition de non interpénétration (condition de Signorini) et du frottement de Coulomb. Ce modèle est donc le problème de Signorini-Coulomb, qui décrit la dynamique d'un contact frottant avec une condition de non interpénétration, et est donc défini par l'équation dynamique exprimée au contact :

$$\left(\begin{array}{c} U_N\\ U_T \end{array}\right) = U_{free} + W \left(\begin{array}{c} I_N\\ I_T \end{array}\right),$$

et par la condition de Signorini :

$$g(t) \ge 0, I_N(t) \ge 0, g(t)I_N(t) = 0.$$

et la loi de Coulomb :

$$||I_T|| \le \mu I_N, ||U_T|| \ne 0 \Rightarrow I_T = -\mu I_N \frac{I_T}{||I_T||},$$

avec  $U_N$ ,  $U_T$  les vitesses au contact qui sont les inconnues à déterminer, W la matrice de Delassus,  $I_N$ ,  $I_T$  les impulsions normales et tangentielles au contact. La vitesse  $U_{free}$ est la vitesse libre, c'est à dire la vitesse relative qu'aurait les particules s'il n'y avait pas d'interaction de contact.

La méthode NSCD est implémentée dans le code de calcul par éléments discrets LMGC90, qui est le code utilisé pour l'ensemble des simulations effectuées dans cette thèse. Le code LMGC90 dispose d'un solveur permettant la résolution du problème de Signorini-Coulomb, appelé solveur NLGS pour ses similitudes avec la méthode de Gauss-Siedel.

#### 2.2.2 Modèle de points de cohésion 2d/3d

Un modèle de cohésion à distance applicable à des particules non isotropes (polygones à 2d / polyèdres à 3d) a été développé. La pâte cimentaire entre deux particules est modélisée par un ou plusieurs couples de ressort/amortisseur attachés à des points de cohésion situés de part et d'autre du centre des particules. L'utilisation de ces points de cohésion ne nécessite pas de contact « géométrique » entre les deux particules, et permet donc de gérer des interactions cohésives à distance, ce qui correspond à une extension du modèle de longueur de cohésion de Hentz et al. (2004a) pour des particules non isotropes. Tout déplacement relatif des deux particules entraîne l'établissement de forces s'opposant à ce déplacement, modélisant ainsi la présence d'une pâte cimentaire se trouvant entre les grains.

#### 2.2.2.1 Notion d'interaction cohésive et placement des points de cohésions

Deux particules cimentées partagent une ou plusieurs interactions cohésives. Chaque interaction cohésive se compose de deux points de cohésion placés sur les particules (fig. 2.1a). La déformation du pont cohésif est calculée à partir du déplacement relatif de ces deux points de cohésion. L'utilisation de deux (à 2d) ou trois (à 3d) interactions cohésives par paire de particules permet d'introduire une résistance à la rotation (2d/3d),



FIGURE 2.1: Définition des interactions cohésives entre deux particules en 2d (a) et 3d (b). Chaque interaction cohésive est composée d'un ressort et d'un amortisseur en compression/traction et en cisaillement.

la flexion et la torsion (3d) (fig. 2.1b).

Pour chaque particule, les points de cohésion sont placés de part et d'autre du centre à une distance R de celui-ci, sur un plan orthogonal au vecteur reliant le centre des deux particules. Dans le cas 3d, un premier point est placé aléatoirement sur une des deux particules à une distance R au centre. Les deux autres points sont ensuite placés de sorte qu'ils soient régulièrement espacés sur la particule. Le paramètre R est une variable d'entrée du modèle, choisie, sauf indication contraire, comme le plus petit rayon équivalent des deux particules. Ce rayon équivalent est déterminé comme le rayon de la sphère ayant le même volume que le polyèdre. Il est évident que ce paramètre influence directement la valeur de réaction du pont cohésif à la rotation des particules, comme nous le verrons dans la section 2.3.2.6. On peut noter que modéliser la cohésion de cette manière permet de traiter de manière simple toute forme de particule, le placement des interactions cohésives pouvant être déterminé de manière indépendante de la forme des particules.

#### 2.2.2.2 Calcul des forces de cohésion

Lors de la déformation du pont cohésif, des forces de cohésion vont être appliquées pour modéliser la présence d'une pâte cimentaire s'opposant à tout déplacement relatif des particules. Pour chaque interaction cohésive, la force de cohésion est décomposée



FIGURE 2.2: Définition du repère local des interactions cohésives et détermination des déplacements relatifs. Avec  $\vec{n}$  et  $\vec{t}$  les vecteurs normal et tangent du repère local permettant le calcul des déplacements relatifs  $\Delta_n$  et  $\Delta_t$ .

dans un repère local formé par un vecteur normal  $\vec{n}$  colinéaire au vecteur reliant les deux points de cohésion, et deux vecteurs tangents  $\vec{t}$  et  $\vec{v}$  orthogonaux entre eux choisis arbitrairement dans le plan orthogonal à  $\vec{n}$ . Dans le cas d'un contact, l'algorithme de détection de contact implémenté dans LMGC90 recalcule ce repère local à chaque nouvelle détection de contact, ce qui implique de devoir reprojeter les composantes normales et tangentielles du déplacement relatif  $\Delta_n$ ,  $\Delta_t$  et  $\Delta_s$  dans le nouveau repère. Or, dans le cas d'une interaction cohésive la rotation rigide de deux particules engendre des vitesses radiales différentes entre les deux points de cohésion. Ceci va donc engendrer des forces de cohésion indésirables car ne correspondant pas à une déformation relative de l'interaction cohésive. Pour palier à ces deux problèmes, une méthode de calcul du repère local dédiée aux interactions cohésives a donc été implémentée. Pour chaque interaction cohésive, le repère local est fixé sur une des deux particules de l'interaction et déterminé uniquement au premier pas. Durant la simulation, seules les rotations de la particule portant le repère sont appliquées à celui-ci. De cette manière, la déformation de l'interaction cohésive est pleinement déterminée par la projection du vecteur reliant les deux points de cohésion sur ce repère local (Fig. 2.2) et la rotation rigide du système n'entraîne plus l'apparition de forces non désirées.

Pour deux particules en interaction cohésive, la force de cohésion s'exprime comme :

$$\boldsymbol{F} = F_n \cdot \boldsymbol{n} + F_t \cdot \boldsymbol{t} + F_s \cdot \boldsymbol{s}. \tag{2.1}$$

La composante normale  $F_n$  correspondant à de la traction/compression et les composantes tangentielles  $F_t$  et  $F_s$  correspondant à du cisaillement pur sont données par :

$$F_n = -k_n^s \Delta_n, \tag{2.2}$$

$$F_t = -k_t^s \Delta_t, \tag{2.3}$$

$$F_s = -k_s^s \Delta_s, \tag{2.4}$$

avec  $\Delta_n$ ,  $\Delta_t$  et  $\Delta_s$  les composantes normales et tangentielles du déplacement relatif des deux points de cohésion exprimés dans le repère local, et  $k_n^s$ ,  $k_t^s$  et  $k_s^s$  les raideurs normales et tangentielles respectivement. Ce modèle de ressort linéaire n'inclut pas de dissipation d'énergie, or dans un matériau réel de l'énergie cinétique est dissipée sous forme de chaleur lors de la déformation. Pour modéliser cette dissipation le plus simplement possible, nous ajoutons un terme d'amortissement visqueux :

$$F_n = -k_n^s \Delta_n - k_n^v U_n,$$
  
$$F_t = -k_t^s \Delta_t - k_t^v U_t,$$

$$F_s = -k_s^s \Delta_s - k_s^v U_s$$

avec  $U_n$ ,  $U_t$  et  $U_s$  les composantes normales et tangentielles de la vitesse relative, et  $k_n^v$ ,  $k_t^v$  et  $k_s^v$  coefficients d'amortissement correspondant.

On peut noter que dans ce modèle la résistance en traction en deux particules ne sera assurée que par la ou les interaction(s) cohésive(s). Dans le cas de la compression les forces de contact entre particules vont s'ajouter aux interactions cohésives s'il y a contact géométrique. Ceci assure la transition entre un comportement élastique et un comportement parfaitement rigide.

#### 2.2.2.3 Paramètres du modèle

Pour déterminer les valeurs des raideurs  $k_n^s$  et  $k_s^s$  une analogie est faite avec la modélisation continue d'une pâte élastique. Ainsi, la raideur normale  $k_n^s$  de l'interaction cohésive est obtenue à partir du module d'Young  $E_{\mu}$  de la pâte cohésive déformable à

modéliser :

$$k_n^s = \frac{E_\mu S}{l_0},\tag{2.5}$$

avec S la surface de l'interaction cohésive, qui peut être choisie comme la surface de la section de la pâte cimentaire entre les grains divisée par le nombre d'interactions cohésives utilisées pour modéliser cette pâte (2 en 2d et 3 en 3d). La longueur  $l_0$  est la distance initiale entre les deux points de cohésion quand l'interaction cohésive est créée. Comme les surfaces S et les longueurs  $l_0$  sont différentes pour chaque paire de particules, une hétérogénéité des raideurs des interactions cohésives est donc introduite. La raideur tangentielle est déterminée à partir de l'expression du module de cisaillement, qui correspond au rapport entre la contrainte et la déformation de cisaillement. Par analogie, la composante tangentielle suivant  $\vec{t}$  de la force exercée par l'interaction cohésive correspond à la force nécessaire pour cisailler la pâte cohésive d'un déplacement tangentiel  $\Delta_t$ . Le module de cisaillement peut donc être exprimé comme :

$$G = \frac{|F_t|l_0}{S.\Delta_t}.\tag{2.6}$$

En remplaçant  $F_t$  par son expression donnée par l'équation (2.3) on obtient :

$$k_t^s = \frac{GS}{l_0}.\tag{2.7}$$

En faisant l'hypothèse d'une pâte cohésive parfaitement isotrope, le module de cisaillement peut être relié au module d'Young  $E_{\mu}$  par le coefficient de poisson de la pâte  $\nu_{\mu}$ :

$$G = \frac{E_{\mu}}{2(1+\nu_{\mu})}.$$
 (2.8)

Les équations (2.5), (2.7) et (2.8) permettent donc d'exprimer le rapport des raideurs normales et tangentielles comme :

$$\frac{k_n^s}{k_t^s} = 2(1+\nu_\mu)$$

On fait l'hypothèse d'une pâte isotrope dans le plan tangent, on a donc la même relation pour  $k_s^s$ , ce qui impose  $k_t^s = k_s^s$ . Les coefficients d'amortissement  $k_n^v$ ,  $k_t^v$  et  $k_s^v$  sont calculés pour obtenir un amortissement critique et ainsi prévenir les oscillations au niveau des interactions cohésives. Il est à noter également que les raideurs sont calculées une seule fois lors de la création des interactions cohésives. De ce fait, nous n'introduisons pas d'endommagement au niveau des interactions cohésives dans le modèle. L'endommagement du matériau ne pourra donc se faire que par la rupture successive d'interactions cohésives contrairement à d'autres modèles qui prennent en compte l'endommagement progressif des contacts cohésifs.

#### 2.2.2.4 Rupture des interactions cohésives

On suppose que dans un matériau cimenté, la fracture intervient du fait de la rupture de la pâte cohésive entre les grains, ce qui correspond pour notre modèle à la rupture des interactions cohésives. Bien que plusieurs critères de rupture de liens applicables à la modélisation par éléments discrets de matériaux cohésifs existent dans la littérature, nous avons fait le choix d'utiliser un modèle simple en déplacement critique. Une interaction cohésive ne peut rompre qu'en traction et/ou cisaillement. Après rupture, l'interaction cohésive ne s'oppose plus au déplacement relatif des points de cohésion, ce qui est équivalent à utiliser des raideurs  $(k_n^s, k_t^s, k_s^s)$  nulles. Cependant, les deux (trois en 3d) interactions cohésives utilisées pour modéliser la pâte cimentaire entre deux particules sont traitées indépendamment : si une rompt, les autres restent intactes tant qu'elles n'ont pas dépassé leur seuil de rupture. Si toutes les interactions cohésives entre les deux particules sont rompues, il peut néanmoins subsister une interaction de contact. De plus, la rupture est irréversible : une interaction cohésive rompue ne peut pas être restaurée.

Le seuil de rupture est défini par les contraintes critiques en traction et en cisaillement au delà desquelles l'interaction va rompre. En traction, à partir des équations (2.2) et (2.5) on obtient le déplacement relatif maximal des points de cohésion à la rupture :

$$\Delta_n^{max} = \frac{l_0}{E_\mu} . \sigma_r^n, \tag{2.9}$$

et pour le cisaillement, les équations (2.3), (2.7) et (2.8) donnent :

$$\Delta_t^{max} = \frac{2(1+\nu_\mu)l_0}{E_\mu} .\sigma_r^t, \tag{2.10}$$

$$\Delta_s^{max} = \frac{2(1+\nu_{\mu})l_0}{E_{\mu}}.\sigma_r^s, \tag{2.11}$$

avec  $\sigma_r^n, \sigma_r^t$  et  $\sigma_r^s$  les contraintes de rupture en traction et cisaillement qui sont des paramètres du modèle, avec en raison de l'isotropie de la pâte dans le plan tangent  $\sigma_r^t = \sigma_r^s$ . Leurs valeurs sont identiques pour toutes les interactions cohésives du matériau.

L'hétérogénéité sur les déplacements critiques est donc introduite par la géométrie des interactions via  $l_0$ . Les seuils en déplacement ont été choisis identiques en traction et cisaillement, ce qui implique à partir des équations (2.9) et (2.10) :

$$\sigma_r^t = \frac{\sigma_r^n}{2(1+\nu_\mu)}.\tag{2.12}$$

Dans la suite, pour plus de clarté nous ferons référence au seuil de rupture par  $\sigma_r$ , avec  $\sigma_r^n = \sigma_r$  et  $\sigma_r^t$  donné par l'équation (2.12).

#### 2.2.3 Implémentation de l'interaction cohésive

Afin de pouvoir utiliser le solveur NLGS de LMGC90, le modèle d'interaction cohésive est intégré dans le code via un changement de variable qui transforme les équations de l'interaction cohésive en problème de Signorini-Coulomb. Le changement de variable est le suivant :

$$\widetilde{I_N} = I_N + (k_n^s(l-l_0) + k_n^v U_N)dt,$$
$$\widetilde{I_T} = I_T + (k_t^s \Delta_t + k_t^v U_t)dt.$$

et le système à résoudre est :

$$\left(\begin{array}{c} U_N \\ U_T \end{array}\right) = \widetilde{U}_{free} + \widetilde{W} \left(\begin{array}{c} \widetilde{I_N} \\ \widetilde{I_T} \end{array}\right).$$

 $\tilde{U}_{free}$  et  $\tilde{W}$  sont la vitesse libre et la matrice de Delassus modifiées par le changement de variable, et dt le pas de temps. Les détails sur la procédure sont données en annexe.

## 2.3 Test du modèle : compression uniaxiale 2d

Le modèle développé a été testé en 2d pour une sollicitation en compression uniaxiale. Tout d'abord nous détaillerons la méthode utilisée pour générer l'empilement initial et mettre en place les interactions cohésives. Ensuite, une étude de l'influence des différents paramètres du modèle a été menée et les résultats obtenus seront présentés.

#### 2.3.1 Empilement initial

L'empilement initial est obtenu par la méthode suivante : tout d'abord, des disques de diamètre moyen d sont déposés sous gravité dans une boite rectangulaire composée de quatre parois rigides. Les diamètres des particules sont uniformément distribués entre 0.5d et 1.5d pour obtenir un empilement polydisperse. Ensuite, chaque disque est remplacé par un pentagone régulier dont l'orientation initiale est identique pour tous les pentagones. L'empilement ainsi obtenu est ensuite soumis à une phase de compression pour augmenter sa compacité. Les parois sont déplacées à une vitesse constante  $V = 5.10^{-3} \left[ d^{3/2} \sqrt{\frac{E_{\mu}}{m}} \right]$  (voir section 2.3.2.1 pour les échelles de masse, longueur et contrainte), sans aucune autre force externe que celle appliquée par les parois (c.a.d. pas de gravité). Les vitesses relatives entre les parois haute/basse et gauche/droite sont choisies de sorte que l'empilement atteigne le rapport d'aspect final désiré.

Du fait du déplacement des parois, la compacité n'est pas homogène au sein du système. Elle est plus élevée au niveau des parois qu'à l'intérieur de l'empilement. Pour obtenir un empilement suffisamment homogène, une phase de mélange est introduite : après un certain nombre de pas de temps de compression, les parois sont maintenues fixes et des vitesses de translation aléatoires sont assignées aux particules. Pour assurer une efficacité maximale du procédé d'homogénéisation, les contacts pentagone/pentagone et pentagone/paroi sont résolus avec une loi de collision élastique et à coefficient de frottement nul, de sorte que l'énergie cinétique ne soit pas dissipée. Ensuite, les vitesses (translation, rotation) des particules sont mises à zéro et la phase de compression reprend.

Dès que la compacité cible est atteinte, la phase de compression est stoppée et les vitesses (translation,rotation) des particules sont mises à zéro. Des précautions doivent être prises au niveau du contact entre l'empilement et les parois lors des simulations de compression. En effet, du fait de la forme, de la taille et du nombre de particules, la probabilité d'appliquer la charge sur une seule particule est élevée. Ceci à pour conséquence d'initier la rupture de l'empilement précocement et de manière non réaliste. Pour éviter cela, les pentagones situés au niveau des surfaces haute et basse sont coupés pour créer une surface parfaitement plane et ainsi augmenter la surface de contact avec les parois (Fig. 2.3a).

On peut noter que dû à l'aléa introduit par la méthode, deux empilements avec les mêmes propriétés macroscopiques (compacité, nombre de particules, distribution de taille, ...) vont être différents au niveau de l'arrangement des particules. Les distributions



FIGURE 2.3: (a) Découpage des pentagones pour lisser la surface de contact avec les parois. (b) Exemple d'empilement de 5000 pentagones utilisé dans les simulations de compression uniaxiale.

d'orientation des vecteurs normaux caractérisant les contacts et les interactions cohésives sont données sur la figure 2.4 pour deux empilements. Bien que ces distributions soient similaires, on remarque de petites fluctuations dans les orientations caractérisant les différences des empilements obtenus. On peut cependant noter que les orientations sont distribuées de manière isotrope, et donc affirmer qu'il n'y a pas présence d'orientations privilégiées pouvant influer par la suite sur le schéma de rupture obtenu. Le profil de compacité obtenu pour deux empilements de compacité cible  $\phi = 0.84$  est tracé sur la figure 2.5. On constate que les empilements générés sont bien homogènes en compacité sur toute leur hauteur. Cette méthode de préparation permet donc d'obtenir des empilements homogènes tout en contrôlant précisément la compacité et le rapport d'aspect final, et procure ainsi des empilements contrôlables pour tester le modèle. Les résultats qui vont être présentés dans la suite de cette section ont été obtenus pour des empilements de rapport d'aspect L/l = 1.2 constitués de 5000 pentagones réguliers, ce qui est un bon compromis entre reproductibilité et temps de calcul. Un des empilements utilisés est représenté sur la figure 2.3b.

Une fois l'empilement initial construit, les interactions cohésives doivent être mises en place. Comme il peut exister de la cohésion entre deux particules même si elles ne sont pas directement en contact, un critère est nécessaire pour décider si deux particules partageront des interactions cohésives ou non. Ce critère peut être une longueur d'interaction comme définie par Hentz et al. (2004a,b), de sorte que si la distance entre les deux particules est inférieure à cette longueur d'interaction, alors elles partageront des interactions cohésives. Cependant cela requiert d'ajouter un paramètre supplémentaire



Figure 2.4: Distributions d'orientations du vecteur normal  $\boldsymbol{n}$  pour les interactions cohésives (a) et les contacts (b) obtenues pour deux empilement initiaux différents (ligne pleine, pointillés).

au modèle. Une autre méthode, qui est celle utilisée dans la suite, consiste à déterminer les particules qui interagissent via des interactions cohésives en calculant une triangulation de Delaunay à partir des centres de ces particules. Chaque arête de la triangulation correspond à une paire de particules en interaction cohésive. Ce choix n'est cependant pas sans conséquences puisqu'à 2d il mène à un nombre constant d'interactions cohésives par particule, ce qui pourrait avoir pour effet de diminuer l'influence de la compacité initiale de l'empilement sur la raideur macroscopique. Ceci sera discuté dans la section 2.3.2.3. Pour chaque paire de particules en interaction, deux interactions cohésives sont mises en place suivant les règles décrites dans la section 2.2.2.1. La distance R entre les points de cohésion et le centre est choisie comme le rayon équivalent r (défini comme le rayon d'un disque de même aire que le pentagone) du plus petit pentagone de la paire. L'empilement initial comportant une hétérogénéité due à la polydispersité de la taille des pentagones, elle se retrouve également dans la distribution des valeurs de R, et donc le rapport R/r est un paramètre de l'empilement identique pour toutes les interactions cohésives. L'influence de ce rapport sera discutée dans la section 2.3.2.6. Une fois toutes les interactions cohésives établies, les parois latérales sont enlevées et l'empilement est prêt pour le chargement.



Figure 2.5: Profil de compacité verticale obtenus pour deux empilements initiaux différents.

#### 2.3.2 Compression uniaxiale

Des essais de compression uniaxiale ont été menés pour étudier la réponse du matériau modèle dans le cas d'une sollicitation simple, et notamment l'influence des différents paramètres du modèle. La charge est appliquée en déplaçant la paroi haute à une vitesse verticale  $V_c$  constante tout en maintenant la paroi basse fixe. De plus, ces tests ont été effectués sans gravité. La vitesse de compression est choisie suffisamment faible pour garantir le régime quasi-statique, dont l'équilibre est vérifié en mesurant les contraintes sur les deux parois.

#### 2.3.2.1 Paramètres de simulation

Le comportement macroscopique obtenu dépend directement des paramètres microscopiques de contacts et d'interactions cohésives. Les paramètres utilisés dans les simulations sont rendus adimensionnels à partir des échelles suivantes :

- masse : masse moyenne m des particules
- longueur : moyenne des diamètres équivalent d = 2r des particules
- temps :  $t_0 = \sqrt{\frac{m}{E_{\mu}d}}$ , de sorte que l'échelle de contrainte soit le module d'Young de la pâte cohésive

Le module d'Young étant celui de la pâte cohésive, il est donc identique pour toutes les interactions cohésives, on a donc une valeur adimensionée  $E_{\mu} = 1$  conformément aux échelles choisies. Le coefficient de Poisson de la pâte vaut  $\nu = 0.25$ . Comme indiqué plus tôt, l'hétérogénéité des raideurs des interactions cohésives est introduite à partir des propriétés géométriques  $(S,l_0)$  des particules. Les coefficients de frottement des contacts pentagone/pentagone  $\mu_{pp}$  et pentagone/paroi  $\mu_{pw}$  sont respectivement égaux à 0.3 et 0.5. Le seuil de contrainte avant rupture en traction est de  $\sigma_r^n = 5.10^{-3}$  et, suivant l'équation (2.12), le seuil de contrainte en cisaillement est donc  $\sigma_r^t = 2.10^{-3}$ . Cette valeur de  $\sigma_r^n$  a été choisie pour amener la rupture à une déformation relative d'environ 0.5%. Finalement, la vitesse de compression est fixée à  $V_c = 2.10^{-5}$ .

Le choix du pas de temps dt est important car il garantit la précision et la stabilité des calculs. Il doit être choisi suffisamment petit en comparaison des autres échelles de temps, incluant l'échelle de temps caractéristique de l'amortissement au niveau des interactions cohésives, tout en permettant des temps de simulation raisonnables. Une valeur adimensionée de pas de temps dt = 0.1 est considérée dans notre cas comme un bon compromis. En général les simulations de compression uniaxiale présentées dans la suite nécessitent entre 50000 et 100000 pas de temps pour atteindre la rupture de l'empilement. Il est à noter que bien que la dynamique des contacts non régulière autorise des pas de temps grands en comparaison de ceux nécessaires en DEM, cet avantage est cependant diminué par la résolution des interactions cohésives.

#### 2.3.2.2 Comportement macroscopique

Une courbe de contrainte/déformation obtenue avec les paramètres de référence donnés dans la section 2.3.2.1 est présentée sur la figure 2.6 avec l'évolution du nombre d'interactions cohésives rompues. Pendant la première phase de compression, le matériau reproduit un comportement linéaire élastique caractérisé par la partie linéaire de la courbe  $\sigma = f(\epsilon)$ . Durant cette phase, les interactions cohésives stockent l'énergie de déformation appliquée par les parois à l'empilement. L'empilement modèle étant initialement consolidé, il ne reproduit pas l'augmentation non linéaire de raideur aux petites valeurs de déformation qui peut être observée expérimentalement du fait de la fermeture de pores ou de petits réarrangements de grains.

Ensuite, la contrainte supportée par quelques interactions cohésives excède le seuil de contrainte  $\sigma_r$  et elles se rompent. Ces ruptures correspondent à des petits sauts sur la courbe  $\sigma = f(\epsilon)$  et le comportement macroscopique commence à dévier légèrement du régime linéaire. Ensuite, lorsque la déformation critique  $\epsilon_p$  est atteinte, une grande quantité d'interactions cohésives se rompent ce qui correspond à des grands sauts verticaux sur la courbe  $\sigma = f(\epsilon)$ , donc à l'émergence et à la propagation d'une fissure macrosco-



FIGURE 2.6: Courbe contrainte axiale  $\sigma$  / déformation axiale  $\epsilon$  (ligne continue bleu) et fraction cumulée d'interactions cohésives rompues (pointillés vert).

pique à travers l'empilement. On remarque que ces chutes de contrainte correspondent à des ruptures massives d'interactions cohésives, puis le nombre d'interactions cohésives reste quasiment constant jusqu'au pic suivant. L'énergie de déformation stockée est libérée lors de la rupture massive d'interactions cohésives. Une nouvelle phase de stockage de la déformation commence alors, elle correspond aux paliers sur la courbe verte de la figure 2.6, et est le signe que malgrés la présence d'une fissure le matériau est toujours capable de résister à la charge appliquée.

La figure 2.7 présente la distribution spatiale des interactions cohésives rompues à différentes étapes de la compression. Initialement ( point I sur la figure 2.6), les interactions cohésives semblent se rompre plus ou moins aléatoirement à travers l'empilement. Cependant, juste avant le pic de contrainte (II) on observe une localisation des ruptures et l'apparition d'un chemin de fracture. De plus, la région après le point (II) de la figure 2.6 comporte plusieurs pics secondaires qui correspondent à l'extension de la fissure macroscopique ou à l'apparition de nouvelles fissures. On remarque que le plan de fracture finit par s'aligner avec les diagonales de l'empilement en formant deux cônes de rupture près des parois. Ce schéma de rupture concorde qualitativement bien avec les expérimentations sur des matériaux réels sous compression uniaxiale avec parois frottantes. Cependant, des conditions aux limites différentes, par exemple des parois non frottantes, devraient produire un schéma de rupture différent (D'Addetta et al., 2002). Nous allons à présent nous intéresser à l'influence des différents paramètres du modèle et de l'empilement initial sur le comportement macroscopique obtenu.



FIGURE 2.7: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues à différentes étapes de la compression. La localisation des ruptures des interactions cohésives et le comportement progressif de la rupture est clairement visible.



Figure 2.8: Module d'Young macroscopique  $E_M$  mesuré pour des compacités  $\phi$  allant de 0.6 à 0.84.

#### 2.3.2.3 Influence de la compacité initiale

Un paramètre important de l'empilement initial est sa compacité. En effet, en l'augmentant on augmente aussi la densité d'interactions cohésives, mais on diminue également leur longueur  $l_0$  car les particules sont plus proches les unes des autres. Selon l'équation (2.5), diminuer  $l_0$  augmente la raideur des interactions cohésives et donc influence directement la raideur macroscopique de l'empilement. Pour les résultats présentés dans la suite, le module d'Young macroscopique est déterminé comme la pente de la partie linéaire de la courbe  $\sigma = f(\epsilon)$ . La figure 2.8 montre le module d'Young macroscopique  $E_M$  obtenu pour des valeurs de compacité comprises entre 0.6 et 0.84. Comme attendu, augmenter la compacité a pour conséquence une augmentation de  $E_M$  pouvant aller jusqu'à 40% pour la gamme de valeurs étudiée. Il est clair que la compacité est un paramètre important pour le contrôle de la raideur macroscopique du matériau modélisé. On peut noter cependant que la méthode d'établissement des interactions cohésives faisant intervenir une triangulation de Delaunay sur le centre des particules, on obtient un nombre de coordination moyen de 6 en 2d quelle que soit la compacité (Gervois et al., 1995). L'effet observé sur la compacité pourrait être différent si le réseau d'interactions cohésives était déterminé différemment.

#### 2.3.2.4 Influence du nombre de coordination des interactions cohésives

Comme décrit précédemment, la triangulation de Delaunay utilisée pour établir le réseau d'interactions cohésives donne en 2d un nombre de coordination d'interactions



Figure 2.9: Courbes de contrainte axiale  $\sigma$  / déformation axiale  $\epsilon$  obtenues pour des valeurs de nombre de coordination des interactions cohésives z de 3 à 6. Encart : Module d'Young macroscopique  $E_M$  en fonction de z. Les barres d'erreur sont comprises dans l'épaisseur du trait.

cohésives de z = 6. Dans le but d'étudier l'influence de plus petites valeurs de z sur le comportement macroscopique, des interactions cohésives on été aléatoirement supprimées de l'empilement. Ceci peut être comparé à des micro-fissures existants dans le matériau initialement. Les courbes contrainte/déformation pour z = 6, 5, 4 et 3 obtenues pour un empilement de compacité  $\phi = 0.84$  sont présentées sur la figure 2.9. On remarque qu'il existe une relation linéaire entre le nombre de coordination des interactions cohésives et le module d'Young macroscopique  $E_M$  du matériau modélisé. En effet, un nombre de coordination plus faible implique moins d'interactions cohésives pour contribuer à la raideur globale du matériau. En outre, la même quantité d'énergie de déformation est stockée par un nombre plus faible d'interactions cohésives, le pic de contrainte est donc plus faible. On remarque surtout que z a une grande influence sur le comportement après rupture. En effet, l'amplitude des pics secondaires décroit avec z, tout comme la raideur résiduelle après rupture. La distribution spatiale des interactions cohésives rompues à la fin de la simulation ( $\epsilon = 0.009$ ) est tracée sur la figure 2.10 pour différentes valeurs de z. Pour des valeurs faibles de z, il apparaît clairement que la rupture des interactions cohésives n'est plus localisée sur des plans identifiables. La présence de ces micros-fissures distribuées aléatoirement dans tout l'empilement empêche la contrainte de se localiser. Ceci explique la diminution d'amplitude des pics secondaires car la faiblesse du réseau d'interactions cohésives ne permet plus d'accumuler autant d'énergie de déformation.



Figure 2.10: Interactions cohésives rompues à  $\epsilon = 0.009$  pour différents nombre de coordination : (a) z = 5, (b) z = 4, (c) z = 3. Une perte de localisation est observée pour des petites valeurs de z.

#### 2.3.2.5 Influence du frottement de contact

Le modèle présenté se distingue de ceux habituellement utilisés en DEM par le fait que les contacts entre particules sont modélisés de manière indépendante des interactions cohésives, ce qui a pour avantage de permettre de modéliser la cohésion quelle que soit la forme des particules utilisées. Néanmoins, bien que le comportement macroscopique soit majoritairement conditionné par les interactions cohésives, on s'attend à ce que le contact entre particules ait également un effet sur les propriétés macroscopique obtenues. Pour quantifier l'influence des contacts entre polygones, nous avons étudié l'effet du coefficient de frottement appliqué entre particules pour différentes compacités de l'empilement. Des simulations ont été effectuées avec un coefficient de frottement allant de  $\mu_{pp} = 0$  à  $\mu_{pp} = 0.7$ . Les figures 2.11a et 2.11b montrent l'effet de  $\mu_{pp}$  sur le module d'Young  $E_M$  et le coefficient de Poisson  $\nu_M$  de l'empilement. En augmentant le frottement entre particules, les forces de réaction s'opposant au glissement vont contribuer à la résistance globale du matériau. On constate bien, sur la figure 2.11a, que le module d'Young  $E_M$  augmente avec le coefficient de frottement. On s'attend également à ce que l'effet du coefficient de frottement dépende du nombre de contacts actifs, et donc de la compacité de l'empilement. L'étude de l'influence du coefficient de frottement a donc été menée pour des compacité  $\phi = 0.6, 0.7$  et 0.84. Il apparaît clairement que plus la compacité est élevée, plus l'effet du coefficient de frottement est important. Cependant, l'effet maximal obtenu sur le module d'Young dans la gamme d'étude pour  $\phi = 0.84$  et  $\mu_{pp} = 0.7$  n'est que de 4%, soit plus faible que l'influence des autres paramètres du modèle et de l'empilement. Pour une compacité de 0.84, le rap-



FIGURE 2.11: (a) Influence du coefficient de frottement entre pentagones  $\mu_{pp}$  sur le module d'Young macroscopique  $E_M$  pour différentes compacités. Le module d'Young pour chaque compacité a été normalisé par sa valeur à  $\mu_{pp} = 0$  pour mettre en avant son influence. Cet effet est petit bien qu'il augmente avec la compacité. Encart : Le module d'Young augmente en fonction de la compacité (voir section 2.3.2.3). (b) Coefficient de Poisson macroscopique  $\nu_M$  pour les mêmes valeurs de  $\phi$  et  $\mu_{pp}$  que (a). Encart :  $\nu_M$ normalisé par sa valeur à  $\mu_{pp} = 0$ .

port entre le nombre de contacts et nombre d'interactions cohésives est petit ( $\simeq 2\%$ ), la dissipation d'énergie due au frottement a donc peu d'influence en comparaison de la résistance fournie par les interactions cohésives.

De la même manière, si le coefficient de frottement augmente on s'attend à ce qu'il s'oppose au déplacement latéral des particules, et donc freine la dilatation de l'empilement. L'effet sur le coefficient de Poisson  $\nu_M$ , signe de la dilatation, est présenté sur la figure 2.11b. Le coefficient de Poisson a été déterminé en considérant une couche horizontale centrée sur la hauteur de l'empilement et et d'épaisseur égale à 20% de la hauteur de celui-ci. Cette couche est ensuite découpée en 20 couches d'égale épaisseur, dont on détermine pour chacune la déformation horizontale. Le coefficient de Poisson est ensuite déterminé par la pente de l'ajustement de la courbe de déformation verticale (fixée par le déplacement des parois) en fonction de la déformation horizontale. Les valeurs mesurées de  $\nu_M$  varient de 0.145 à presque 0.20 dans la gamme de paramètres étudiés. On remarque bien que lorsque le coefficient de frottement augmente, le coefficient de Poisson diminue. Néanmoins, cet effet semble saturer pour des coefficients de frottement inter-particules supérieurs à 0.3, ce qui n'est pas le cas pour le module



FIGURE 2.12: Courbes de contrainte axiale  $\sigma$  / déformation axiale  $\epsilon$  pour des coefficients de frottement  $\mu_{pp} = 0$  (ligne continue rouge) et  $\mu_{pp} = 0.3$  (pointillés bleu), à une compacite  $\phi = 0.84$ . Les comportements après rupture sont clairement différentes.

d'Young. Une augmentation de la compacité accentue également l'effet du coefficient de frottement sur le coefficient de Poisson (encart de la figure 2.11b). Cependant, pour les compacités de 0.7 et 0.84 les différences n'apparaissent que pour des coefficients de frottement supérieurs à 0.2.

Bien que l'influence du coefficient de frottement sur la réponse élastique de l'empilement reste relativement modérée, il a néanmoins une forte influence sur le comportement après rupture. La figure 2.12 montre les courbes contrainte/déformation obtenues avec deux échantillons strictement identiques, pour un coefficient de frottement  $\mu = 0$ et 0.3. La courbe correspondant à  $\mu = 0.3$  a déjà été décrite précédemment, avec les pics secondaires correspondant à des reprises de résistances après des événements de rupture massive d'interactions cohésives. Cependant, dans le cas d'un frottement nul, ces pics secondaires disparaissent totalement et la contrainte chute brutalement à zéro après la première rupture. Le frottement entre particules a donc un effet prépondérant sur la propagation des fractures au sein du matériau. En effet, pour que la fracture puisse se propager à travers l'empilement et le fragmenter, elle doit avoir suffisamment d'énergie pour rompre les interactions cohésives. Cependant, une partie de cette énergie va être dissipée par le frottement, la fracture peut alors être stoppée et la raideur



FIGURE 2.13: Module d'Young macroscopique  $E_M$  pour des valeurs du rapport R/r allant de 0 à 2, pour des empilement de compacité  $\phi = 0.84$ .

de l'empilement augmenter de nouveau jusqu'à ce qu'il lui soit fourni assez d'énergie pour reprendre la fracturation de l'empilement. Dans le cas d'un frottement nul il n'y a pas de dissipation d'énergie due au frottement, et donc la fracture peut se propager plus facilement et ainsi, comme c'est le cas ici, fragmenter l'empilement immédiatement après son initiation.

#### **2.3.2.6** Influence du rapport R/r

Pour introduire une résistance aux rotations relatives des particules, deux (en 2d) ou trois (en 3d) points de cohésion sont placés à une distance R du centre de chaque particule. Pour  $R \neq 0$ , une rotation relative des pentagones va induire un couple qui augmente avec R, et donc on s'attend à une augmentation de la raideur macroscopique du matériau modélisé. Comme décrit précédemment, R a été choisi comme le rayon équivalent r du plus petit pentagone de la paire, donc R/r = 1 pour toutes les interactions cohésives. La figure 2.13 montre les valeurs de module d'Young mesurées pour un rapport R/r allant de 0 à 2. On remarque clairement que le rapport R/r a un grand effet sur le module d'Young de l'empilement, jusqu'à 20% d'augmentation dans la gamme étudiée, ce qui indique également que les rotations des particules ne sont pas négligeables même dans le cas d'une compacité de 0.84. Cependant, cet effet semble saturer pour des valeurs de R/r supérieures à 1 dans ce cas. Le rapport R/r est donc un paramètre du modèle qui permet de contrôler la résistance aux rotations entre les particules et donc leur influence sur la raideur du matériau.

#### 2.3.2.7 Influence du seuil de rupture

Dans ce modèle, l'initiation de la fracture macroscopique du matériau est uniquement due à la rupture des interactions cohésives entre les particules. De ce fait, on peut s'attendre à ce que le seuil de rupture en contrainte  $\sigma_r$  ait une forte influence sur la résistance du matériau modélisé. Des simulations pour différentes valeurs de  $\sigma_r$  ont été effectuées, et les courbes  $\sigma = f(\epsilon)$  obtenues sont présentées sur la figure 2.14a. Comme attendu, le seuil de rupture des interactions cohésives contrôle directement le pic de contrainte et le pic de déformation de l'empilement, et donc la résistance du matériau à la compression uniaxiale. Cependant, il n'a aucune influence sur la pente de la partie élastique de la courbe  $\sigma = f(\epsilon)$  car aucune interaction cohésive ne dépasse ce seuil durant cette phase. Le seuil de contrainte change également le comportement après rupture du matériau en influençant la propagation de la fissure, comme on peut le voir sur la figure 2.14b. Les pics secondaires observés pour des empilements avec  $\sigma_r = 5.10^{-3}$ sont réduits quand  $\sigma_r$  décroit, et disparaissent pour  $\sigma_r = 2.10^{-4}$ . En effet, quand une fissure s'initie des interactions cohésives moins résistantes vont permettre une propagation plus facile de la fissure à travers l'empilement. Au contraire, des interactions cohésives plus résistances vont stopper la fissure prématurément et la propagation ne reprendra que lorsque l'énergie de déformation redeviendra suffisante pour rompre de nouvelles interactions cohésives. Dans le cas d'interactions cohésives très peu résistantes  $(\sigma_r = 2.10^{-4})$ , l'absence de pics secondaires indique que la première fissure avait assez d'énergie pour percoler à travers l'empilement. Cet effet de  $\sigma_r$  se superpose à celui du frottement de contact décrit précédemment pour conditionner la propagation de la fissure à travers le matériau.

## 2.4 Modélisation d'un matériau "plein"

Nous allons présenter dans cette partie l'application du modèle à un matériau "plein", c'est à dire de compacité  $\phi = 1$ . Ce type de matériau dispose d'une microstructure différente de celle d'un matériau cimentaire, car les grains sont imbriqués les uns dans les autres. La cohésion du matériau est assurée par les contraintes stockées lors de sa genèse. Nous allons tout d'abord présenter comment construire ce type d'échantillon, puis les modifications du modèle nécessaires. Enfin, des résultats de compression uniaxiale sont présentés.



FIGURE 2.14: (a) Influence du seuil de rupture des interactions cohésives sur la résistance de l'empilement. (b) Identique à (a) mais avec la contrainte  $\sigma$  et la déformation relative axiale  $\epsilon$  normalisées par leurs valeurs au pic ( $\sigma_{peak}, \epsilon_{peak}$ )pour voir les effets du seuil de contrainte sur le comportement après rupture.

#### 2.4.1 Construction de l'échantillon

Construire un empilement de compacité  $\phi = 1$  consiste à paver l'espace sans laisser de vide. Cette compacité étant impossible à atteindre avec des disques, l'emploi de polygones est donc nécessaire. Nous allons utiliser une méthode de partition de Voronoï qui permet à la fois de remplir totalement l'espace, mais qui génère également des polygones non réguliers. En effet, la création d'arrangements réguliers de polyèdres dans l'empilement est à éviter, car cela pourrait forcer des plans de rupture indésirables. Les partitions de Voronoï ayant servi à générer les échantillons présentés dans la suite ont été construites avec le programme Neper (Quey et al., 2011; Quey, 2015). Les données de la partition de Voronoï obtenues sont ensuite converties pour être importées dans LMGC90. Les échantillons utilisés sont des rectangles de largeur l = 1.0 et de hauteur L = 1.2, soit un rapport d'aspect L/l = 1.2, identique à celui utilisé pour la modélisation des matériaux cimentaires, et composés de 5000 polyèdres. Cependant, l'échelle de longueur utilisée dans les simulations est l, et non plus le diamètre moyen des pentagones comme c'était le cas précédemment. Les surfaces supérieure et inférieure de ce type d'empilement sont directement générées parfaitement planes, et ne nécessitent donc pas d'être coupées comme c'était le cas pour les empilements de matériaux cimentaires. La figure 2.15 présente un des empilements utilisés dans cette étude, ainsi que la différence de microstructure avec les empilements représentants des matériaux



FIGURE 2.15: À gauche : exemple d'empilement de compacité  $\phi = 1$  obtenu avec une partition de Voronoï. Au centre et à droite : différence de microstructure entre les échantillons "plein" et cimentés.

cimentaires.

Le nombre de coordination cohésif moyen des particules est de 5.89, ce qui correspond bien à la valeur théorique de 6 pour une partition de Voronoï, minoré par les particules situées au frontières de l'empilement. La méthode de génération de l'empilement produit des grains de forme et taille hétérogènes. La figure 2.16 présente les densités de probabilité des valeurs des paramètres  $l_0$ , S et m des interactions cohésives ainsi que la densité de probabilité du diamètre équivalent moyen d (voir 2.3.1) des polygones.

Les distributions d'orientation des normales des interactions cohésives sont données sur la figure 2.17 pour deux empilements. Bien que ces distributions soient similaires, on remarque de petites fluctuations dans les orientations caractérisant les différences des empilements obtenus. On peut cependant noter que les orientations sont distribuées de manière isotrope, et donc vérifier qu'il n'y a pas présence d'orientations privilégiées pouvant influer par la suite sur la schéma de rupture obtenu.

#### 2.4.2 Adaptation du modèle

Le modèle présenté dans la section 2.2 a été développé pour décrire la fracture d'un matériau cimentaire. Il doit donc être adapté pour un matériau plein. Tout d'abord, les



FIGURE 2.16: Densité de probabilité de (a) longueur initiale  $l_0$  des interactions cohésives, (b) diamètre équivalent moyen d des polygones (c) surface S des interactions cohésives et (c) masse m des interactions cohésives.



FIGURE 2.17: Distribution d'orientation des normales des interactions cohésives.


FIGURE 2.18: (a) Représentation de l'interaction cohésive mise en place entre deux particules. (b) Définition de la surface S et de la longueur initiale de l'interaction cohésive  $l_0$  pour le modèle de matériau "plein".

polygones étant imbriqués les uns dans les autres et donc en contact permanent, toute rotation relative induira une interpénétration qui sera immédiatement empêchée par la rigidité des particules voisines (condition de non-interpénétration). L'utilisation de deux interactions cohésives par paire de particule n'est donc pas vraiment nécessaire, une seule sera donc utilisée afin de réduire le coût de calcul et diminuer le temps de simulation. Les deux points de cohésion constituant cette interaction sont placés au centre des deux particules, soit R = 0 (Fig. 2.18a).

Pour cette configuration, la surface S d'interaction cohésive utilisée pour le calcul des raideurs doit être également définie différemment. Dans un pavage de type Voronoï, un choix naturel pour la surface S est la surface effective de contact entre les deux particules qui, à 2d, est la longueur de l'arête qu'elles partagent (Fig. 2.18b). La détermination de la longueur initiale de l'interaction  $l_0$  reste inchangée, et correspond à la distance initiale entre les deux points de cohésion. Les voisins partageant une interaction cohésive avec la particule sont toutes les particules partageant une arête avec elle.

Pour cet empilement, les particules sont entièrement en contact avec leurs voisins, on s'attend donc à ce que le frottement entre particules ait un effet bien plus important que dans le cas d'un matériau cimentaire. De plus, il est noté que si deux particules sont en contact (i.e.  $\Delta_n = 0$ ), la réaction à un déplacement tangentiel sera l'effet combiné du frottement de contact et de la réaction de l'interaction cohésive.

### 2.4.3 Résultats

Dans cette section, les résultats de compression uniaxiale 2*d* obtenus pour un matériau "plein" vont être présentés. Nous nous intéresserons plus particulièrement à l'influence du coefficient de frottement entre polygones, sur le comportement macroscopique de l'empilement. Dans cette étude, nous utiliserons une vitesse de compression de  $V = 1.10^{-5}$ , un seuil de contrainte en traction  $\sigma_r^n = 1.10^{-3}$ , et suivant l'équation (2.12) un seuil de contrainte en cisaillement  $\sigma_r^t = 2.10^{-3}$ . Le module d'Young  $E_{\mu}$  et le coefficient de Poisson  $\nu_{\mu}$  microscopique reste inchangés et valent respectivement 1 et 0.25. Dans un premier temps, le coefficient de frottement entre particules  $\mu_{pp}$  est fixé à 0.3, et le coefficient de frottement avec les parois à  $\mu_{pw} = 0.5$ .

### 2.4.3.1 Comportement macroscopique

Une courbe de contrainte/déformation obtenue avec ces paramètres est présentée sur la figure 2.19 avec l'évolution du nombre d'interactions cohésives rompues. Tout d'abord, on remarque que la première partie de la courbe n'est plus aussi linéaire que dans le cas cimenté, mais est composée d'une succession de petit "sauts". Comme on peut le voir sur la figure 2.20, qui représente des cartes de rupture des interactions cohésives pour différentes phases de déformation, au stade I aucune interaction cohésive n'est rompue. Ces petits sauts ne correspondent donc pas à des événements de rupture, mais sont imputables à un premier effet du frottement entre particules. En effet, le frottement va très probablement induire un comportement de stick/slip, et donc des petites relaxations de contrainte au sein de l'empilement.

Un pic de force principal correspondant à l'apparition d'une fissure macroscopique est toujours présent (*III*), cependant il n'est plus suivi de la chute brutale de contrainte qui était observée pour les matériaux cimentaires. Ceci apparaît de manière très significative sur la courbe de l'évolution du nombre d'interactions cohésives. En effet, les ruptures ne se font plus de manière massive par palier, mais très progressivement au cours de la déformation. Le matériau à donc un comportement moins fragile, et la fracture correspond plus à de l'endommagement progressif. On peut remarquer que pour une déformation double par rapport à la déformation correspondant au pic de rupture, l'échantillon résiste encore à une charge correspondant à la moitié de sa contrainte maximale.

La carte des interactions cohésives rompues au point (IV) montre que la fracture est beaucoup moins localisé que dans le cas cimenté. En effet, bien que l'on puisse identifier



FIGURE 2.19: Courbe contrainte/déformation (ligne bleu) et fraction cumulée d'interactions cohésives rompues (pointillés vert) pour une compression uniaxiale avec  $\mu_{pp} = 0.3$ .

trois blocs de bonne taille quasiment intacts, l'échantillon est fortement fragmenté, et on peut remarquer la présence de nombreuses fissures secondaires. Cependant, le phénomène est différent de celui observé pour les matériaux cimentés avec un nombre de coordination faible (Fig. 2.10c) car ici les fissures ne sont pas réparties de manière homogène dans l'empilement mais semblent s'aligner sur un plan proche de la verticale. Nous verrons dans la suite que ceci dépend directement de la valeur de coefficient de frottement entre particules utilisé.

#### 2.4.3.2 Influence du coefficient de frottement

Afin de comprendre l'origine du motif de rupture obtenu, et la raison de l'absence de fracturation rapide du matériau, nous allons à présent étudier plus précisément l'influence du frottement entre particules sur le comportement macroscopique obtenu. La figure 2.21 présente les courbes contrainte/déformation obtenues pour des valeurs de coefficient de frottement  $\mu_{pp} = 0, 0.3$  et 0.5. L'influence du coefficient de frottement est très nette. Tout d'abord, on remarque que plus  $\mu_{pp}$  augmente, plus la raideur macroscopique augmente (fig. 2.22c). La contrainte maximale que peut supporter l'échantillon augmente également de manière conséquente, d'un facteur d'environ 15 pour  $\mu_{pp} = 0.5$ par rapport à la situation à coefficient de frottement nul (fig. 2.22a). La déformation à la rupture augmente également, mais moins fortement que la raideur et la contrainte maximale (fig. 2.22b). On peut également confirmer que les petits "sauts" de la première partie de la courbe sont bien dus au frottement, car ceux ci disparaissent dans le cas



FIGURE 2.20: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues à différentes étapes de la compression. On remarque bien de nombreuses fractures secondaires à un état avancé de la compression.



Figure 2.21: Courbe contrainte/déformation pour le même empilement mais des valeurs de  $\mu_{pp} = 0., 0.3$  et 0.5. Encart : fraction d'interactions cohésives rompues en fonction de la déformation.

 $\mu_{pp} = 0.$ 

L'augmentation du coefficient de frottement tend à changer le comportement post rupture, avec une intensification des chutes brutales de contrainte pour des  $\mu_{pp}$  élevés. Cependant, comme on peut le voir sur les courbes de fraction d'interactions cohésives rompues (encart fig. 2.21), ces chutes brutales observées pour  $\mu_{pp} = 0.5$  ne sont pas dues à des ruptures massives d'interactions cohésives. On peut émettre l'hypothèse que ces chutes de contrainte sont la conséquence de déclenchement de glissements au niveau de zones déjà fracturées. Pour des coefficients de frottement plus faible, il n'y pas de blocage et donc d'accumulation d'énergie, le comportement post rupture est donc moins saccadé. D'autre part, l'absence de fracturation rapide du matériau est confirmée même pour le cas sans frottement. La diminution de fragilité observée dans le cas d'empilement "plein" par rapport à un empilement cimentaire n'est donc pas due à l'utilisation de frottement dans ce modèle.

La figure 2.23 montre des images de l'empilement prises au point (IV). On remarque que pour un coefficient de frottement nul, les plans de rupture sont nets, et l'échantillon se fragmente en quatre blocs parfaitement distincts. Cependant, lorsque l'on augmente le coefficient de frottement, des fractures secondaires apparaissent, ce qui entraîne une sur-fracturation de l'empilement. Il est intéressant de constater que ce n'est pas la structure de l'empilement (Voronoï,  $\phi = 1$ ) qui est responsable de ce phénomène, mais bien le frottement entre les particules. Ceci se voit très bien sur la figure 2.24, qui



Figure 2.22: Influence du coefficient de frottement  $\mu_{pp}$  sur la contrainte de rupture (a), la déformation à la rupture (b) et le module d'Young macroscopique (c) moyenné sur 6 échantillons.



FIGURE 2.23: Images de l'empilement obtenues au point (IV) pour à gauche  $\mu_{pp} = 0$ , au centre  $\mu_{pp} = 0.3$  et à droite  $\mu_{pp} = 0.5$ .

présente des cartes d'interactions cohésives rompues pour les trois valeurs de coefficient de frottement étudiées. La multiplication des fragmentations secondaires est clairement visible, et nous retrouvons également pour  $\mu_{pp} = 0$  un motif de rupture similaire à celui obtenu pour les matériaux cimentés.

Les fractures secondaires dues au frottement entre particules vont générer un nombre plus important de fragments, et donc vont créer plus de surface. La figure 2.25 représente la surface totale créée, calculée comme la somme des surfaces des interactions cohésives rompues, en fonction de la déformation pour les trois valeurs de  $\mu_{pp}$  étudiées. On constate bien qu'à un état avancé de la fracturation ( $\epsilon = 5.10^{-4}$ ), plus le coefficient de frottement est élevé, plus la surface créée est grande. On peut remarquer qu'au départ de la fracturation, juste après le maximum de contrainte, l'échantillon à frottement nul crée de la surface plus rapidement. Ceci est le signe que la fissure initiale se propage plus librement et plus rapidement dans ce cas.



FIGURE 2.24: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues au point (IV) pour (a)  $\mu_{pp} = 0$ , (b)  $\mu_{pp} = 0.3$  et (c)  $\mu_{pp} = 0.5$ .



FIGURE 2.25: Surface totale créée en fonction de la déformation pour les trois valeurs de  $\mu_{pp}$  étudiées. Encart : Surface totale crée normalisée par la valeur à  $\mu_{pp} = 0$ .

Le frottement entre particules a donc une influence bien plus importante pour le modèle de matériaux "pleins" que pour celui de matériaux cimentés. En effet, en plus d'influencer la raideur, la contrainte et la déformation à la rupture, il a une forte influence sur le motif de rupture obtenu, ainsi que le degré de fragmentation de l'échantillon. Ceci pourrait constituer une piste d'améliorer des concasseurs industriels, en cherchant à limiter la fragmentation parasite liée au frottement, car elle produit des fragments indésirables (fines).

# 2.5 Conclusion

Nous avons présenté dans cette partie un modèle mixte combinant une résolution du contact par la méthode NSCD et l'utilisation d'interactions cohésives composées de points de cohésion pour modéliser la présence d'une pâte cohésive cimentant les grains au sein d'une roche. L'utilisation des points de cohésion permet de traiter des particules de formes complexes, et ainsi d'utiliser des empilements de compacité allant jusqu'à 1.

Le modèle a été testé en 2d pour un matériau représenté par un empilement polydisperse de pentagones liés par des interactions cohésives dans le but de décrire la présence de ponts cohésifs, que l'on retrouve dans des roches sédimentaires notamment. Il permet de décrire convenablement le comportement macroscopique d'un matériau fragile sujet à une compression uniaxiale. Un comportement linéaire élastique durant lequel les interactions cohésives restent intactes est suivi par une chute soudaine de contrainte correspondant à l'initiation et à la propagation de fractures macroscopiques à l'intérieur de l'empilement, caractéristique d'un matériau fragile. L'étude de l'influence des paramètres du modèle a montré que la dissipation d'énergie due au frottement de contact a une grande importance sur la propagation des fractures à travers l'empilement et conduit à un comportement de fracturation progressive. La limite élastique des interactions cohésives permet de contrôler la résistance macroscopique du matériau modélisé sans influencer sa partie élastique. La propagation de la fissure est influencée par le seuil de limite élastique des interactions cohésives. En effet, un seuil plus élevé nécessite plus d'énergie pour que la fissure continue à rompre des interactions cohésives. Le nombre de coordination des interactions cohésives z a une influence sur la partie élastique mais également sur le comportement après rupture. En effet, diminuer z entraîne une diminution de la raideur macroscopique mais a également un effet sur la localisation des ruptures des interactions cohésives dans l'empilement. L'influence de la compacité de l'empilement a été étudiée, et présente un effet direct sur le module d'Young macroscopique et donc sur la raideur du matériau.

Une adaptation du modèle a ensuite été proposé pour permettre de modéliser un matériau de compacité  $\phi = 1$ . L'empilement a été généré à partir d'une partition de Voronoï, ce qui produit un pavage de l'espace composé de polygones non réguliers. Des simulations de compression uniaxiale 2d ont montré une différence de comportement macroscopique, avec notamment la disparition du caractère fragile de l'échantillon. Les résultats d'une étude de l'influence du frottement de contact entre les particules ont été présentés. Dans le cas d'un frottement nul, le motif de rupture obtenu est similaire à celui observé pour les matériaux cimentés. Pour des valeurs de coefficient de frottement non nul, on observe une sur-fragmentation de l'échantillon d'autant plus importante que le coefficient de frottement est grand. Enfin, indépendamment du frottement, la zone post rupture des courbes de contrainte/déformation ne présente plus les chutes brutales de contrainte dues à des ruptures massives d'interactions cohésives. Les résultats obtenus seront complétés avec une étude de l'influence des autres paramètres du modèle et de la géométrie de l'empilement.

# Chapitre 3

# Étude du chargement multi-point

# 3.1 Introduction

Dans un concasseur, les grains sont en interaction avec les pièces d'usure mais également avec les autres grains présents dans la chambre de concassage. Cette interaction entre grains va venir s'ajouter aux chocs des grains contre les pièces d'usure du concasseur, et va influer sur l'énergie requise pour les fragmenter, ainsi que sur la distribution de fragments obtenue. Cependant, modéliser l'effet d'un réseau de forces de contact localisées aléatoirement sur la résistance d'un grain de forme arbitraire n'est pas aisé, et donc peu de modèles en tiennent compte. Ben-Nun and Einav (2010) ont étudié la rupture d'un grain circulaire à 2d soumis à un réseau de forces arbitraires représentant l'effet de ses voisins. Ces auteurs proposent deux modèles : le premier est basé sur les travaux de Tsoungui et al. (1999a) pour le cas d'une fracture en traction (mode (I)). Le second est basé sur les travaux de Sukumaran et al. (2006) et considère une fracture en cisaillement (mode (II)). Dans les deux cas, la modélisation consiste à remplacer un réseau de forces localisées aléatoirement, représentant l'effet des voisins sur le grain, par une combinaison de forces permettant de déterminer un nouveau critère de rupture tenant compte de l'influence de ces forces externes sur la résistance du grain.

Le premier modèle considère qu'un grain circulaire soumise à un réseau de forces localisées aléatoirement va rompre diamétralement du fait d'une force de traction exercée au centre du grain. Le réseau de forces externes est remplacé par deux forces principales orthogonales maximale  $s_1$  et minimale  $s_2$  (Fig. 3.1).

Les auteurs proposent le critère de rupture suivant :

$$2S - N \ge F_{crit},$$

avec  $S = \frac{(s_1-s_2)}{2} \ge 0$  qui représente une force de cisaillement nominale;  $N = \frac{(s_1+s_2)}{2} \ge 0$  la force normale nominale, avec  $s_1$  et  $s_2$  donnés par :

$$s_{1} = \frac{s_{11} + s_{22}}{2} + \sqrt{\left(\frac{s_{11} - s_{22}}{2}\right)^{2} + s_{12}s_{21}},$$
$$s_{2} = \frac{s_{11} + s_{22}}{2} - \sqrt{\left(\frac{s_{11} - s_{22}}{2}\right)^{2} + s_{12}s_{21}}.$$

Les composantes  $s_{ij}$  du tenseur de force sont données par :

$$s_{ij} = \sum_{c=1}^{N_c} n_i^{(c)} F_j^{(c)},$$

avec  $N_c$  le nombre de coordination du grain et (c) représentant le c iéme contact de la particule. Finalement, la force critique  $F_{crit}$  est donnée pour le système 2d par :

$$F_{crit} = d\sigma_M f_w,$$

avec d le diamètre de la particule,  $\sigma_M$  la contrainte de rupture de la particule dans le cas d'un chargement diamétral et  $f_w$  un paramètre représentant la variabilité statistique de la résistance de la particule due à ses défauts. Une limitation du modèle apparaît si la particule est chargée de manière isotrope (ie :  $s_1 = s_2$ ). En effet, dans ce cas S = 0 et le critère de rupture n'est jamais atteint. Cependant, on sait que même dans ce cas une particule réelle finira par se fragmenter. Pour permettre la rupture avec un chargement isotrope, il devient nécessaire de considérer la rupture en cisaillement (mode II).

Ben-Nun and Einav (2010) se sont basés sur les travaux numériques de Sukumaran et al. (2006), afin de résoudre la limitation du modèle précédent en proposant un critère de rupture auquel est comparé la moyenne des composantes normales des forces externes : la particule se fragmente si  $\bar{F}_n$  donné par :

$$\bar{F}_n = \frac{1}{N_c} \sum_{c=1}^{N_c} F_j^{(c)}, \qquad (3.1)$$

est supérieur ou égal au critère de rupture :

$$F_{crit}^* = d\sigma_M f_w f_D f_{CN}.$$



FIGURE 3.1: Pour le modèle en traction, le réseau de forces aléatoires est remplacé par deux forces principales disposées en forme de croix (selon Tsoungui et al. (1999a)).



FIGURE 3.2: Pour le modèle de rupture en cisaillement, le réseau de forces aléatoires est remplacé par des forces normales disposées symétriquement (selon Ben-Nun and Einav (2010)).

Le facteur  $f_D$  permet de tenir compte de la courbure des particules interagissant avec le grain :

$$f_D = \frac{D/d}{\frac{D}{d} + 1},$$

avec d le diamètre du grain et D le diamètre des grains interagissant avec lui. Le facteur  $f_{CN}$  permet de tenir compte de l'effet du nombre de coordination C du grain, et est donné par :

$$f_{CN} = (C-1)exp\left(\left(\frac{D}{d}\right)\frac{(C-2)(C-3)}{4C}\right).$$

Cependant, ce modèle fait l'hypothèse que les points de contact équivalents sont



FIGURE 3.3: Exemple de deux configurations dont la moyenne des forces normales  $\bar{F}_N$  est identique, ce qui implique donc une résistance équivalente selon le modèle de Ben-Nun and Einav (2010).

répartis de manière homogène autour de la particule (Fig. 3.2). Ainsi, il ne prend pas en compte les positionnements réels des points d'application des forces de contact sur le grain dans le calcul du critère de rupture. En effet, seule la moyenne des normales des forces  $\bar{F_N}$  donnée par l'équation (3.1) est comparée à la force critique  $F_{crit}^*$ . Considérons par exemple deux grains soumis à trois forces normales identiques F, positionnées à des angles différents, comme schématisé sur la figure 3.3. Dans ces deux configurations, la moyenne  $\bar{F_N}$  des forces sera identique avec  $\bar{F_N} = F$ , ce qui implique un seuil de rupture également identique et égal à  $F_{crit}^*$ .

Dans le but d'étudier la pertinence de l'hypothèse précédente, des simulations numériques 3d de fracturation d'un échantillon cylindrique ont été effectuées pour différents positionnements des forces de contact appliquées à la particule. Les observations numériques ont ensuite été confrontées à des résultats expérimentaux d'impact. Tout d'abord, nous allons présenter l'étude numérique et les résultats obtenus. Ensuite, le dispositif expérimental sera détaillé, ainsi que la méthode de préparation des échantillons, et enfin les résultats expérimentaux obtenus.

# 3.2 Étude numérique 3d

## 3.2.1 Introduction

Des simulations numériques 3d de la fragmentation d'un échantillon cylindrique soumis à trois forces de contact ponctuelles ont été menées pour étudier l'influence de leurs positionnement sa résistance à la rupture. Tout d'abord, la construction de l'échantillon va être détaillée, ainsi que la configuration et les paramètres de simulation. Ensuite, les résultats obtenus seront présentés, et l'influence du positionnement des points de contact sera quantifiée.



FIGURE 3.4: À gauche : Rayon R de la particule avant la coupe et distance  $R^*$  entre le plan de coupe et le centre de la particule. Le rapport  $R^*/R$  est fixé à 0.9975. À droite : Empilement après découpage. Ici le rapport a été délibérément exagéré pour l'exemple, le rapport réellement utilisé ne permettant pas de distinguer la découpe.

# 3.2.2 Construction de l'échantillon et paramètres de simulation

Pour cette étude, nous allons modéliser le matériau à fragmenter par un échantillon "plein", nous utiliserons donc le modèle présenté dans la section 2.4.

### 3.2.2.1 Création de l'empilement

La partition de Voronoï 3*d* est construite à l'aide de l'outil "neper" et importée dans LMGC90, chaque cellule de la partition constituant un polyèdre. La particule obtenue est de forme cylindrique de diamètre d = 1., et de longueur H = 0.5, soit un rapport d'aspect d/H = 2, et est constituée de 5000 polyèdres.

Trois parois sont ensuite positionnées au niveau de l'échantillon. Deux parois inférieures fixes permettent d'appliquer deux contacts de part et d'autre de l'échantillon. Une parois supérieure est déplacée à vitesse constante pour appliquer la charge sur la particule. Les orientations des parois sont calculées de sorte que leurs normales soient dirigées vers le centre de la particule. Pour éviter d'appliquer toute la charge sur un seul sommet à la surface de l'empilement, les polyèdres au niveau du contact avec les parois sont légèrement coupés de sorte que la paroi repose sur une surface homogène. Le rapport de rayon avant/après (voir fig. 3.4) la découpe est fixé à 0.9975, suffisamment faible pour ne pas modifier la forme de la particule de manière significative. Cependant, cette étape peut générer des polyèdres "plats" de très petit volume, problématiques pour la détection de contact, qui sont donc supprimés si leur volume est inférieur d'un facteur 1000 au volume moyen des polyèdres. L'angle de découpe est calculé pour que la surface obtenue soit parfaitement parallèle à la parois venant en contact avec celleci. Les fonctions de densité de probabilité des distributions des surfaces S, longueurs initiales  $l_0$ , masses m et du rapport  $S/l_0$  des interactions cohésives sont présentées sur les figures 3.5 et 3.6 respectivement pour deux empilements différents.



FIGURE 3.5: Fonctions densités de probabilités des distributions des longueurs initiales  $l_0$  (à gauche) et surfaces S (à droite) des interactions cohésives pour deux empilements différents.



FIGURE 3.6: Fonctions densités de probabilités des distribution des masses m (à gauche) et du rapport  $S/l_0$  (à droite) des interactions cohésives pour deux empilements différents.

#### 3.2.2.2 Configuration et paramètres de simulation

Pour étudier l'effet du positionnement des points de contact, les deux parois inférieures vont être déplacées sur la surface cylindrique de la particule. La figure 3.7a montre un schéma de la configuration utilisée. Le paramètre à faire varier est l'angle  $\alpha$ , défini comme le demi-angle formé par les plans joignant les lignes de contact cylindre/paroi inférieures et l'axe de la particule. Les simulations numériques sont effectuées pour des valeurs de  $\alpha$  comprises entre 0, correspondant à une compression diamétrale (dans ce cas seulement deux parois sont utilisées), et  $\pi/3$ . La limite  $\alpha = \pi/2$ n'est pas atteignable dans cette configuration, car un support inférieur est nécessaire pour maintenir l'échantillon en place, nécessitant l'utilisation d'une quatrième paroi. Des images d'une particule dans les configurations diamétrales et  $\alpha = \pi/3$  sont présentées sur les figures 3.7b et 3.7c.



FIGURE 3.7: (a) Schéma de positionnement des parois et définition de l'angle  $\alpha$ . (b) Configuration diamétrale. (c) Configuration pour un angle  $\alpha = \pi/3$ .

Les parois inférieures sont maintenues fixes durant toute la simulation. La paroi supérieure est déplacée à vitesse constante  $V_c$ , déterminée de sorte que le système reste dans l'état quasi-statique, dans la direction  $-\overrightarrow{y}$ , les directions  $\overrightarrow{x}$  et  $\overrightarrow{z}$  étant fixées. Les paramètres de simulation utilisés sont résumés dans le tableau 3.1, et les résultats obtenus sont moyennés sur 6 répétitions. De plus, ces simulations sont effectuées à gravité nulle (g = 0). Les échelles de temps et de contraintes utilisées correspondent à leurs définitions données dans la section 2.3.2.1, néanmoins l'échelle de longueur est définie ici comme le diamètre d de la particule, comme pour les matériaux pleins à 2d

$\mu$	$\sigma_c^n$	$V_c$	dt	g
0.3	1e - 3	1e - 4	0.003	0

TABLE 3.1: Paramètres utilisés dans les simulations.

### 3.2.3 Résultats

### 3.2.3.1 Comportement macroscopique

Des images des motifs de rupture obtenus pour des angles  $\alpha = 0$ ,  $\pi/6$  et  $\pi/3$  sont présentées sur la figure 3.8. Pour le cas de la compression diamétrale ( $\alpha = 0$ ), on observe bien une fracture suivant le diamètre de la particule dans le plan diamétral perpendiculaire aux deux parois. Pour les configurations avec trois points de contact ( $\alpha = \pi/3$ et  $\pi/6$ ), la fracture n'est clairement plus diamétrale mais relie chacun des contacts inférieurs avec le contact supérieur. Ce mode de rupture influence donc directement la distribution de fragments, composée de trois blocs principaux dont la taille relative dépend de l'angle  $\alpha$ .

Les figures 3.9a et 3.9b montrent les distributions spatiales des interactions cohésives rompues pour  $\alpha = 0$  et  $\pi/3$ , qui confirment les observations précédentes. Pour la configuration  $\alpha = \pi/3$ , les ruptures sont localisées dans la forme triangulaire reliant les trois contacts, et principalement entre un contact inférieur et le contact supérieur. Dans le cas diamétral les ruptures se concentrent au voisinage du plan (y,z) centré sur la particule et sont plus localisées que dans la configuration à trois contacts. On notera cependant que la largeur de la/les bande(s) de rupture peut être conditionnée par la taille des polyèdres et/ou la largeur des parois utilisées.

Pour le cas d'une compression diamétrale quasi-statique, il a été observé que la fissure suit un mode de rupture en volume, c'est à dire qu'elle s'initie au centre de la particule et se propage vers les points de contact (Tang and Hudson, 2010). Un deuxième mode de rupture qui peut être observé dans le cas d'un chargement par impact est l'apparition de la fissure au niveau des points de contact et sa propagation vers le centre, appelée rupture de contact (Tsoungui et al., 1999a). La figure 3.10 montre la distribution spatiale des interactions cohésives rompues dans le plan diamétral à différentes étapes de la fracturation. On remarque que les interactions cohésives commencent par rompre dans une zone située au centre de la particule, puis la rupture se propage en direction des contacts. Nous reproduisons donc bien une rupture de volume. Les mêmes observations dans la configuration à trois contacts (Fig. 3.11) indiquent que l'on a à faire au même type de rupture. On constate également que la zone située en dessous du plan horizontal



FIGURE 3.8: Images de la rupture de l'échantillon pour les angles  $0,\pi/6$ , et  $\pi/3$  (de gauche à droite). L'échelle de couleur correspond au déplacement suivant la direction horizontale, positif en rouge et négatif en bleu.



FIGURE 3.9: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues pour la configuration (a) diamétrale (b)  $\alpha = \pi/3$  dans le plan (x,y).

passant par les deux contacts inférieurs n'est pas endommagée.

### **3.2.3.2** Influence de l'angle $\alpha$

Les courbes force/déplacement pour des valeurs d'angles  $\alpha = 0$ ,  $\pi/6$  et  $\pi/3$  sont présentées sur la figure 3.12a. La force  $F_y$  est la composante normale de la force mesu-



FIGURE 3.10: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues dans le plan (yz) de l'échantillon pour la configuration diamétrale ( $\alpha = 0$ ) et à différentes étapes de la fracturation.



FIGURE 3.11: Distribution spatiale des interactions cohésives rompues dans le plan (yz) de l'échantillon pour la configuration  $\alpha = \pi/3$  et à différentes étapes de la fracturation.



FIGURE 3.12: (a) Courbe force/déformation pour des angles  $\alpha = 0, \pi/6, \pi/3$ . (b) Fraction d'interactions cohésives rompues en fonction du déplacement  $\Delta_y$  (correspondant également à la déformation car d = 1) pour les mêmes valeurs d'angle que (a).

rée sur la paroi supérieure, et  $\Delta_y$  le déplacement de sa ligne d'application. Les courbes présentent une première phase quasiment linéaire de déformation élastique de l'empilement suivie d'une chute de force correspondant à la rupture de l'échantillon. La zone post rupture présente une décroissance relativement douce de la force, en effet si on note  $\Delta_y^{max}$  le déplacement correspondant à la force maximale  $F_{crit}$ , la force à  $2\Delta_y^{max}$  est en moyenne de  $0.46F_{crit}$ . L'augmentation de l'angle  $\alpha$  entraîne une très nette augmentation de la force  $F_{crit}$  nécessaire pour fracturer la particule, correspondant au pic de force sur la courbe force/déplacement. Cette évolution est représentée sur la figure 3.13a pour 6 angles allant de 0 à  $\pi/3$ . On constate qu'elle semble linéaire en fonction de  $\alpha$  avec une pente de 2.95. La déformation à la rupture (Fig. 3.13b) est relativement constante, excepté pour  $\alpha = \pi/3$  où elle augmente légèrement. Le rapport  $F_y/\Delta_y$ , calculé pour des petites déformations (zone élastique), qui peut caractériser la raideur de l'empilement, augmente de façon similaire à  $F_{crit}$  (Fig. 3.13c).

Les fractions d'interactions cohésives rompues en fonction de la déformation pour  $\alpha = 0, \pi/6$  et  $\pi/3$  sont représentées sur la figure 3.12b. On remarque premièrement que pour la configuration à trois contacts, la rupture des interactions cohésives commence plus tôt que dans le cas diamétral, bien que la résistance globale de la particule soit plus élevée. A l'état final, le nombre d'interactions cohésives rompues augmente avec l'angle  $\alpha$ . Ceci est cohérent avec l'idée que augmenter  $\alpha$  a pour conséquence d'accroître le confinement appliqué à la particule, et donc de permettre un meilleur stockage de l'énergie. Lors de l'initiation de la fissure, cette énergie va se libérer sous forme de



FIGURE 3.13: Evolution des paramètres de la rupture en fonction de  $\alpha$ : (a) Rapport  $F_y^{crit}/F_{y,\alpha=0}^{crit}$ , (b) déformation au pic de force  $\Delta_y^{crit}$  et (c) rapport  $F_y/\Delta_y$ . Les barres d'erreur correspondent à 2 fois l'écart type sur la distribution de valeurs.

ruptures progressives, et la fracturation de l'échantillon sera d'autant plus grande que l'énergie stockée est importante.

La surface totale créée lors de la rupture, calculée en sommant la surface de chaque interaction cohésive rompue, est présentée sur la figure 3.14a pour deux valeurs du déplacement  $\Delta_y$  correspondant à  $\Delta_y^{crit}$  et à  $1.5 \Delta_y^{crit}$ . La surface totale créée augmente avec  $\alpha$ , ce qui est à l'opposé du comportement attendu si l'hypothèse d'un plan de fracture d'épaisseur infiniment petite est faite. En effet, si nous considérons une rupture parfaitement droite et plane entre le contact supérieur et chacun des deux contacts inférieurs, la surface totale créée théorique  $S_{créée}^0$  est donnée par la relation :

$$S_{cr\acute{e}\acute{e}}^{0} = 4RH \frac{\sin(\alpha)}{\sin(\alpha/2)}.$$
(3.2)



FIGURE 3.14: (a) Surface totale crée par la rupture des interactions cohésives pour deux déformations  $\Delta_y^{crit}$  et  $1.5\Delta_y^{crit}$ . (b) Surface de rupture théorique calculée avec la relation 3.2.

Le profil obtenu à partir de cette relation est présenté sur la figure 3.14b. On constate bien que d'un point de vue purement géométrique la surface créée théorique  $S_{créee}^0$  diminue lorsque  $\alpha$  augmente, contrairement aux résultats obtenus. Une partie non négligeable de l'énergie transmise à l'échantillon est donc dissipée ou consommée autrement que pour produire de la surface de rupture sur le plan entre les points de contact, et ce phénomène augmente avec  $\alpha$ .

Cette étude numérique 3d permet donc de montrer qu'il existe un effet du positionnement des forces de contact externe sur la réponse macroscopique de la particule, et notamment sa capacité à résister à la charge qui lui est appliquée.

# 3.3 Étude expérimentale

# 3.3.1 Introduction

Pour confirmer les observations faites à partir des simulations numériques, une étude expérimentale a été menée. Un dispositif simple a été développé, permettant d'impacter un échantillon avec une masse lâchée de différentes hauteurs. L'utilisation d'un dispositif appliquant deux points de contact sur la partie inférieure de l'échantillon permet d'étudier l'effet du positionnement de ces points sur sa résistance. Le dispositif va tout d'abord être décrit ainsi que la méthode de préparation des échantillons. Enfin les résultats obtenus seront présentés et analysés.





FIGURE 3.15: Dispositif expérimental d'étude de la fragmentation dynamique par impact.



FIGURE 3.16: Dispositif multi-point permettant d'appliquer deux points de contact sur la partie inférieure de l'échantillon.

# 3.3.2 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental utilisé est présenté sur la figure 3.15. Il est composé d'un bras réglable en hauteur à deux endroits permettant d'atteindre une hauteur maximale de lâcher d'environ 1 m. L'échantillon est placé sur une dalle en béton qui permet d'éviter la dissipation d'énergie élastique dans la table lors de l'essai.

Un électro-aimant est fixé sur le support réglable attaché au bras principal. Il permet de maintenir une masse en acier pouvant aller jusqu'à 18Kg s'il est alimenté par une tension de 24V. Un interrupteur permet de couper l'alimentation en courant de l'électro-aimant et donc d'effectuer le lâcher. Le courant parcourant l'électro-aimant générant beaucoup de chaleur, pour éviter des risques de brûlure, une ampoule indique visuellement si l'électro- est alimenté. Les essais ont été réalisés avec une masse de 2Kg d'une épaisseur de 3cm et d'un diamètre de 10cm. Les masses ont un méplat qui permet de maximiser la surface de contact avec l'aimant et donc la force de maintien de celui-ci. Une cage en métal permet de contenir les projections issues de l'impact. La face avant est composée d'une vitre en plexiglas pour permettre l'acquisition d'images. Une caméra rapide qui peut atteindre une vitesse d'acquisition de plus de 50 000 images/seconde permet de filmer la propagation de la rupture. Finalement, un dispositif réglable composé de deux barreaux de profil carré de 10mm de coté permet d'appliquer deux points de contact à l'échantillon et d'en varier le positionnement. Dans la suite, nous appellerons cet équipement le dispositif multi-point (Fig. 3.16).

### 3.3.3 Préparation des échantillons

La préparation des échantillons est une étape importante. En effet, les hétérogénéités de microstructure des échantillons, leur état de surface, leurs irrégularités de forme, sont quelques uns des nombreux paramètres qui influencent la distribution des résistances que l'on va obtenir. Nous souhaitons étudier uniquement l'effet du positionnement des contacts, il est donc indispensable de minimiser l'influence de la méthode de préparation sur la variabilité des résultats obtenus, en la contrôlant au maximum.

#### 3.3.3.1 Choix du matériau

Le matériau choisi doit permettre une fragmentation de l'échantillon avec le dispositif utilisé, mais il doit néanmoins être suffisamment résistant. L'utilisation de mortier (sable, ciment, filler calcaire, eau) apporte un bon compromis, et de plus permet une fabrication simple et en grande quantité, à partir de matériaux facilement disponibles.

La formulation du mortier doit permettre de satisfaire différents critères :

- une résistance finale adaptée à la manipulation;
- une consistance adaptée au remplissage des moules;
- une surface latérale suffisamment lisse.

La résistance finale est principalement déterminée par la quantité de ciment et le rapport eau/ciment. Le logiciel BétonLab (De Larrard and Sedran, 2007) a été utilisé pour estimer une première formulation permettant d'atteindre une résistance satisfaisante. Ensuite, des échantillons ont été fabriqués et testés sur la manipulation pour déterminer les corrections à appliquer à la formulation. Le mortier doit également être suffisamment liquide pour que la mise en place dans les moules soit facilitée. Cependant, un mortier trop liquide va avoir tendance à se tasser et également à fuir par le fond du moule. De plus un mortier trop sec à plusieurs conséquences : la présence de nombreux pores au sein du mortier et à sa surface. De nombreuses combinaisons des différents paramètres et méthodes de préparation ont finalement permis d'élaborer la formulation suivante :

- Sable : 54.5%

- Ciment : 19.7%
- Filler calcaire : 11.6%

— Eau : 14%

- Plastifiant : 0.2%

Le plastifiant ajouté à la formulation permet de réduire la quantité d'eau de gâchage tout en ayant un mélange maniable à l'état frais, permettant de bien épouser la forme du moule.

### 3.3.3.2 Mesure de la résistance du mortier obtenu

Pour connaître précisément la résistance en compression du mortier formulé, une presse hydraulique conforme à la norme EN 12390-4 a été utilisée, comprimant l'échantillon une rampe de force de 15.11 kN/s. Les trois échantillons utilisés pour ce cas sont des cubes de 10 cm de côté, dont la forme, la confection et la conduite de l'essai sont donnés par les normes NF EN 12390-1, NF EN 12390-2 et NF EN 12390-3.

Les résistances de rupture obtenues sont de 42.42MPa, 44.96MPa et 43.05MPa, soit une résistance moyenne en compression de 43.5MPa. Bien que les valeurs de résistance que l'on obtiendra dans la suite avec les échantillons cylindriques ne pourront pas directement être comparées à ces valeurs, cela permet néanmoins d'avoir une idée de la résistance de ce mortier et de la reproductibilité de sa fabrication.

#### 3.3.3.3 Forme des échantillons et fabrication des moules

Les échantillons sont de géométrie cylindrique ce qui permet la fabrication des moules simplement à partir d'un tube coupé dans sa longueur. Un tube en acier de 50 mm de diamètre intérieur a été utilisé. Ce matériau permet le maintien de la forme des échantillons même pour des faibles hauteurs de moule. Les échantillons font 25 mm de longueur, soit un rapport d'aspect d/l = 2, identique à celui utilisé pour les simulations numériques.



FIGURE 3.17: Moules d'acier utilisés pour la préparation des échantillons, avec les bandelettes en plastique.



FIGURE 3.18: A gauche : échantillon obtenu avec bandelettes en papier,. A droite : échantillon obtenu avec bandelettes en plastique. La différence de surface est clairement visible.

#### 3.3.3.4 Le problème du démoulage

Le souci principal avec ce mode de fabrication et ce type de matériau est la difficulté de démouler les échantillons une fois le mortier sec. Pour ne pas créer de pré-fissures dans les échantillons, il est inenvisageable de devoir sortir l'échantillon du moule en force. Des bandelettes ont donc été intercalées entre le moule et le mortier pour faciliter le démoulage. Cependant, l'utilisation de bandelettes en papier absorbant l'eau durant le séchage a eu deux conséquences : l'eau à disposition du ciment dans le mortier était inférieure à la valeur calculée dans la formulation et la bandelette se déformait, ce qui a perturbait la surface de l'échantillon.

Les bandelettes en papier ont donc été remplacées par des bandelettes en plastique, qui ont grandement facilité le démoulage, sans perturber la surface (Fig. 3.18). Malgré cela, le démoulage devait être effectué avant la prise complète. Après plusieurs expérimentations il a été estimé que le démoulage devait être effectué 1 à 2 heures après la fabrication, de sorte que le mortier soit suffisamment pris pour ne pas que l'échantillon se déforme. En outre, la hauteur des bandelettes a été choisie légèrement supérieure à la hauteur du moule pour éviter l'apparition de rebords latéraux au niveau de la face supérieure.





FIGURE 3.19: Malaxeur de laboratoire Eirich R02 utilisé pour le mélange des différents constituants du mortier.

### 3.3.3.5 Déroulement de la préparation d'une série d'échantillons

Le protocole de préparation d'une série d'échantillons est le suivant : tout d'abord on commence par ajouter le sable, le ciment et le filler calcaire, dont les quantités sont déterminées à partir de la formulation et du volume final de mortier nécessaire, dans un malaxeur de laboratoire de type Eirich R02 d'une contenance de 5L (Fig. 3.19). Durant la phase de détermination de la formulation, les quantités à produire étaient suffisamment faibles pour permettre un mélange à la main. Cependant dans le cadre de la production en série il est nécessaire d'utiliser un malaxeur pour obtenir un mélange suffisamment homogène des constituants. Le mélange de sable, de ciment et de filler calcaire est malaxé durant 1 à 2 minutes. Ensuite, l'eau à laquelle a été préalablement mélangé le plastifiant est ajoutée progressivement, et le tout est malaxé environ 10 minutes pour obtenir un mélange bien homogène. Le mortier est ensuite disposé dans les moules. Pour éliminer les bulles d'air présentes, l'échantillon est piqué à l'aide d'une tige cylindrique et le mortier est réparti de sorte qu'il remplisse bien le moule. La surface supérieure est enfin lissée avec une spatule. Précisons que la mise en place du mortier doit se faire suffisamment rapidement pour éviter qu'il soit trop sec avant le remplissage des derniers moules.

Après 1 à 2 heures de repos, les moules sont retirés délicatement et les échantillons sont stockés dans une pièce à température et humidité contrôlées durant au moins 28 jours. Ce temps de cure permet de garantir que tous les échantillons auront bien une résistance équivalente et stabilisée pour les essais.



FIGURE 3.20: Série d'échantillons pendant la phase de cure.

### 3.3.4 Résultats obtenus

Comme nous l'avons détaillé dans la partie précédente, l'expérience consiste à lâcher une masse sur un échantillon de forme cylindrique positionné soit directement sur la dalle, soit sur un dispositif permettant d'appliquer deux points de contact sur la partie inférieure de l'échantillon. La manipulation ne permet pas de mesurer directement la force nécessaire pour rompre l'échantillon. La masse est lâchée d'une hauteur qui n'est pas suffisante pour fracturer l'échantillon, une succession d'impacts à cette hauteur sera effecuée, ce qui entraînera l'endommagement progressif puis la rupture. Pour estimer l'influence du positionnement des points de contact, le nombre d'impacts successifs nécessaire à la fragmentation sera mesuré. Ceci permettra de comparer pour une même hauteur le nombre d'impacts nécessaires à la rupture en fonction de la configuration (diamétrale, multi-point).

Un paramètre physique intervenant dans la rupture de l'échantillon est l'énergie qui lui a été transmise par la masse impactante. L'énergie de la masse au moment de l'impact est donnée par :

$$E_i = m_{masse}g\Delta_h$$

avec  $m_{masse}$  la masse , et  $\Delta_h$  la hauteur de lâché mesurée entre le bas de la masse suspendue à l'électro-aimant et le haut de l'échantillon. Une hypothèse sera faite dans l'interprétation des résultats : nous considérerons que l'énergie est transmise en totalité à l'échantillon. En effet, la dalle est considérée suffisamment massive pour ne se déformer que très faiblement lors de l'impact. De plus, les films à la caméra rapide ont montré que la masse a bien une vitesse nulle juste après l'impact, l'hypothèse d'une transmission totale de son énergie est donc acceptable. Nous avons utilisé une masse de 2 kg, la gamme d'énergie accessible est donnée dans le tableau 3.2.



FIGURE 3.21: Surface de l'échantillon après un impact. On remarque que la zone d'impact est bien homogène.

hauteur (m)	Energie (joule)	vitesse $(m/s)$
0,10	1,96	1,40
0,20	3,92	$1,\!98$
0,30	5,89	2,43
0,40	7,85	2,80
0,50	9,81	$^{3,13}$
0,60	11,77	3,43
0,80	15,70	3,96

TABLE 3.2: Energies et vitesses d'impacts en fonction de la hauteur de chute.

Enfin, la mise en place de l'échantillon et de la masse doit être faite avec précision pour garantir que la masse va impacter l'échantillon dans son plan diamétral et ainsi éviter l'apparition de motifs de rupture indésirables. La figure 3.21 montre la surface d'impact de la masse sur l'échantillon, on peut remarquer que l'impact est bien suffisamment homogène dans la longueur.

Nous allons dans la suite présenter les résultats obtenus tout d'abord pour la configuration diamétrale puis avec le dispositif multi-point.

### 3.3.4.1 Essais d'impacts en configuration diamétrale

Les essais dans la configuration diamétrale vont permettre d'avoir un point de référence pour l'étude de l'influence du positionnement des points de contact pour la



FIGURE 3.22: À gauche : échantillon avant essai. À droite : échantillons fracturés dans la configuration diamétrale.

configuration multi-point. La figure 3.22 montre deux échantillons avant et après l'impact. On remarque bien que les échantillons se fragmentent diamétralement comme attendu. Des fragments de petites tailles sont générés au niveau des deux surfaces de contact (masse et dalle).

La propagation de la fissure étant très rapide, une caméra filmant à grande vitesse est nécessaire pour pouvoir en capturer la propagation. La figure 3.23 montre des images de l'impact capturées avec la caméra rapide à une vitesse d'acquisition de 25 000 images/s, tout juste suffisante pour voir la propagation de la fissure. Une étude fine des images obtenues permet de montrer que l'échantillon commence par se déformer légèrement, puis deux fissures démarrant quasiment simultanément depuis chaque zone de contact commencent à se propager. Ces deux fissures vont ensuite se rejoindre au centre et entraîner une rupture diamétrale. On peut également distinguer des fissures secondaires au niveau des points de contacts qui produiront des petits fragments.

Comme précisé auparavant, la manipulation ne permet pas de mesurer la force nécessaire à la rupture de l'échantillon. Le nombre d'impacts nécessaires pour fragmenter l'échantillon a été mesuré pour différentes hauteurs. L'échantillon est considéré comme fragmenté si les deux (ou trois) fragments principaux se sont séparés. De nombreux paramètres (microstructure du matériau, incertitudes liées à l'essai,...) influençant la mesure, les valeurs obtenues sont moyennés sur 20 échantillons pour chaque hauteur. La figure 3.24 présente le nombre d'impacts nécessaires pour fragmenter l'échantillon en fonction de l'énergie apportée à chaque impact (contrôlée par la hauteur de lâchée).



FIGURE 3.23: Images de l'impact tirées d'une séquence filmée à  $25\,000$  i/s avec la caméra rapide pour la configuration diamétrale.



FIGURE 3.24: Nombre d'impacts nécessaires à la fragmentation en fonction de l'énergie fournie à chaque impact pour la configuration diamétrale. Les barres d'erreur correspondent à l'écart type de la distribution de valeurs obtenues.

Tout d'abord, on remarque, comme on peut s'y attendre, que plus l'énergie transmise à l'échantillon à chaque impact est élevée, plus le nombre d'impacts nécessaire pour le fragmenter est faible. Une énergie critique peut être estimée comme l'énergie permettant de fragmenter l'échantillon en un seul impact. Si l'énergie transmise à l'échantillon est supérieure à cette énergie critique, le surplus d'énergie sera converti en énergie cinétique pour la mise en mouvement des fragments, ou la sur-fragmentation de l'échantillon.

### 3.3.4.2 Essais d'impacts en configuration multi-point

La configuration des essais en multi-point est similaire à celle utilisée pour les essais en configuration diamétrale, cependant dans ce cas le point de contact avec la dalle est remplacé par deux génératrices de contact appliqués par le dispositif multi-point en acier, présenté sur la figure 3.16. Ce dispositif est constitué de deux barreaux de profil carré en métal de 10 mm, fixés par deux tiges filetées permettant un réglage de l'écartement.

Le choix a été fait de garder la convention de positionnement des points de contact utilisée dans les simulations numériques présentées dans la section 3.2. Suivant cette convention, l'angle  $\alpha$  correspond à la moitié de l'angle formé par les deux points de contact et le centre de l'échantillon. La relation entre l'écartement e et l'angle est donnée par :

$$e = 2Rsin(\alpha),$$

avec R le rayon de l'échantillon.

Comme le montrent les images obtenues à la caméra rapide présentées sur la figure 3.25, le remplacement du point de contact inférieur par deux points de contact change le motif de rupture de l'échantillon. Deux fissures apparaissent symétriquement entre le point d'impact et les deux points de contact, ce qui correspond à ce que l'on observait dans les simulations numériques. Dans l'exemple présenté sur la figure 3.25, une première fissure apparaît à gauche et se développe à partir du point de contact inférieur et du point d'impact. Ensuite, la deuxième fissure à droite commence à se propager. Ceci ne peut être considéré comme un comportement systématique. En effet, si le dispositif multi-point permettait d'appliquer les deux points de contact de manière parfaitement symétrique, on pourrait s'attendre à ce que les deux fissures s'initient au même instant. Bien évidemment, même dans ce cas idéal, la microstructure de l'échantillon pourrait perturber la synchronisation des fissures.



FIGURE 3.25: Images de l'impact tirées d'une séquence filmée à 25 000 i/s avec la caméra rapide pour la configuration multi-points.

Les probabilités de rupture des échantillons en fonction de l'énergie transmise pour les angles  $\alpha = 0$  (configuration diamétrale),  $\alpha = \pi/6$  et  $\alpha = \pi/3$  sont représentées sur la figure 3.26. Il apparaît clairement que l'énergie totale à transmettre à l'échantillon pour le fragmenter augmente avec l'angle  $\alpha$ . L'encart de la figure 3.26 présente l'énergie correspondant à une probabilité de rupture de 0.5 pour les trois angles, divisée par sa valeur pour  $\alpha = 0$ . Les valeurs obtenues viennent confirmer qualitativement les observations faites par les simulations numériques. Cependant, ces résultats sont obtenus pour des impacts, ce qui n'est pas le cas de l'étude numérique, une comparaison des résultats plus précise est donc difficile à envisager. Une étude ultérieure permettant d'appliquer des efforts quasi-statique et de mesurer précisément la force critique est envisageable, ce qui devrait permettre une confrontation avec les résultats numériques.

# 3.4 Conclusion

Une étude numérique a été menée pour examiner l'effet du positionnement des forces de contacts exercées par son voisinage sur la résistance d'un grain. Un système simple composé d'une particule de forme cylindrique en appuie sur deux contacts fixes et comprimée par une parois supérieure a été mis au point et simulé. L'angle formé par les contacts fixes est modifié pour en étudier l'influence.



FIGURE 3.26: Probabilité de rupture de l'échantillon en fonction de l'énergie d'impact pour  $\alpha = 0$  (configuration diamétrale),  $\alpha = \pi/6$  et  $\alpha = \pi/3$ . Encart : énergie pour une probabilité de rupture de 0.5 pour les trois angles, divisée par sa valeur pour  $\alpha = 0$ .

Les résultats obtenus ont montré que la position des contacts influence fortement la force nécessaire pour rompre la particule, mais également sa raideur apparente. Le motif de fracture est également impacté par la présence des contacts par rapport à une configuration diamétrale, dans laquelle la fracture se propage uniquement suivant ce plan diamétral. Ceci a pour conséquence d'influencer également la distribution de taille des fragments obtenus.

Une étude expérimentale a été menée avec la mise en place d'un dispositif expérimental permettant la fragmentation par impact. Les résultats expérimentaux ont confirmé une influence du positionnement des points de contacts sur la résistance de la particule. Des images obtenues à l'aide d'une caméra rapide ont permis d'observer l'initiation de la fissure au niveau des contacts, et sa propagation dans l'échantillon. Une étude expérimentale à venir avec l'utilisation d'une presse hydraulique en régime quasi-statique devrait permettre une comparaison plus précise avec les résultats numériques. De plus, des simulations numériques d'impacts sont également envisagées pour quantifier l'influence de l'effet dynamique sur la rupture, et notamment sur les zones d'initiation des fissures.
# Chapitre 4

# Simulation de la rupture d'un grain réel

# 4.1 Introduction

L'influence de la forme d'un grain sur sa rupture a été peu étudiée et reste mal comprise, principalement du fait de la complexité d'établir des modèles utilisables pour des formes arbitraires. Cependant, Hagerty et al. (1993) ont observé expérimentalement que l'angularité d'un grain soumis à une compression uni-axiale affecte sa résistance. Plus récemment, Ueda et al. (2013) ont étudié par DEM la compression axiale d'un empilement de grains pouvant être rompus. Ils ont montré que la forme de ces grains influence le type de fragmentation qui intervient au sein de l'empilement (clivage, abrasion ...). Abe and Mair (2009) ont montré que la forme des grains situés au niveau d'une faille influence son frottement effectif, et la prise en compte de ces formes permet de reproduire par simulation des valeurs de frottement observées expérimentalement. La prise en compte de la rupture des grains et, de ce fait, de l'influence de leur forme sur leur résistance est donc d'un grand intérêt pour de nombreux systèmes naturels ou industriels.

La modélisation par les méthodes DEM de grains de forme complexe se fait généralement en agglomérant des particules circulaires/sphériques. Certaines de ces approches ont été présentées brièvement dans le premier chapitre. Néanmoins, ces méthodes ont l'inconvénient de générer une surface comportant des grandes rugosités purement artificielles et peu représentatives du grain réel. D'autres méthodes basées sur un amas de sphères qui s'interpénètrent permettent d'améliorer la description de la surface du grain. Cependant, un nombre important de sphères est nécessaire pour obtenir une résolution



FIGURE 4.1: Reconstruction d'un grain de ballast à partir de sphères interpénétrées (Ferellec and McDowell, 2010).

suffisante, ce qui engendre des temps de calcul plus importants. De plus, ces interpénétrations introduisent une hétérogénéité de masse au sein du grain. Cette distribution non uniforme de la masse va fausser le calcul du tenseur d'inertie et de la position du centre de gravité, et conduire à un calcul erroné des rotations du grain. Ferellec and McDowell (2010) ont appliqué cette méthode à la reconstruction de la forme de grains de ballast (Fig. 4.1) et ont proposé un calcul des masses des particules permettant de diminuer l'erreur sur le calcul des moments d'inertie du grain. Cependant, cette méthode de sphères fortement interpénétrées rend la modélisation de la fracturation du grain difficilement envisageable. Enfin, Cil and Alshibli (2012, 2014) ont étudié expérimentalement la compression d'empilements de grains de sable de silice, et comparé les résultats numériques avec des mesures de tomographie synchrotron 3d (Fig. 4.2). Cette étude démontre l'intérêt de combiner la caractérisation des grains par des mesures tomographie avec avec leur modélisation numérique. Néanmoins, dans cette étude les grains sont représentés par des agglomérats de sphères, leur forme réelle n'est donc pas prise en compte. Il est donc intéressant de chercher à aller plus loin en permettant la reconstruction numérique de la forme du grain à partir des données de tomographie pour ensuite en simuler la fracturation.

L'utilisation d'un modèle de grain constitué de polyèdres, comme celui développé durant ce travail de thèse, paraît adapté à la modélisation de grains de formes complexes. En effet, les éléments polyédriques permettent de représenter convenablement la forme du grain ainsi que sa surface, sans générer de rugosité artificielle comme c'est le cas pour les méthodes avec des sphères. Nous allons présenter dans la suite une application



FIGURE 4.2: Compression expérimentale (à gauche) et numérique (à droite) d'un empilement de trois grains, tiré de (Cil and Alshibli, 2012, 2014).

du modèle à la fracturation de grains de formes réelles. Les données utilisées pour la reconstruction sont issues de mesures de micro-tomographie à rayons X effectuées par Zhao et al. (2015a). Dans la suite nous allons tout d'abord décrire la méthode employée par ces auteurs ainsi que les résultats obtenus. Nous détaillerons ensuite la procédure de reconstruction 3d du grain. Enfin, les résultats numériques et leur comparaison avec les résultats expérimentaux de Zhao et al. (2015a) seront détaillés dans la troisième partie.

## 4.2 Tomographie de grains de sable

Pour étudier expérimentalement la fracture d'un grain, Zhao et al. (2015a) ont développé un dispositif expérimental permettant d'effectuer des tests de compression uni-axiale tout en scannant le grain par micro-tomographie aux rayons X ( $\mu CT$ ). Ce dispositif est constitué d'une cellule de chargement disposée sur un plateau permettant une rotation de celle-ci à 360° et d'un tube focalisant les rayons X au niveau de l'échantillon. Les tests ont été effectués sur deux types de matériaux : du sable de Leighton Buzzard et du granite fortement altéré. Les résultats présentés dans ce chapitre concernent les essais réalisés sur des grains de sable Leighton Buzzard auquel il sera fait référence par le terme LBS dans la suite. Ces grains ont une surface relativement lisse et une forme peu anguleuse, comme on peut le voir sur la figure qui présente les reconstructions  $\mu CT$ obtenues par Zhao et al. (2015a) pour les particules LBS-1 (Fig. 4.3a) et LBS-3 (Fig. 4.3b) que nous allons étudier dans la suite. Les paramètres de morphologie mesurés par Zhao et al. (2015a) pour les particules LBS-1 et LBS-3 sont présentés dans le tableau



FIGURE 4.3: Reconstruction 3d de grains par  $\mu CT$  obtenus par Zhao et al. (2015a) : LBS-1 à gauche et LBS-3 à droite.

4.1. Bien que la méthode employée par les auteurs leur permette d'accéder à la microstructure des grains et ainsi tenter de la relier au motif de rupture obtenu, nous nous intéresserons dans la suite uniquement à la reconstruction de la forme du grain.

Particule	Taille de voxel $(\mu m)$	Hauteur (mm)	Volume $(mm^3)$	Surface $(mm^2)$
LBS-1	3.89	1.36	2.18	10.11
LBS-3	3.31	1.43	3.16	12.24

TABLE 4.1: Caractéristiques des grains LBS-1 et LBS-3, selon (Zhao et al., 2015a).

Ces auteurs ont comprimé les grains dans leur dispositif jusqu'à fragmentation, et ils ont effectué trois reconstructions complètes à différentes étapes de la fracturation. Cela leur a permis d'étudier le motif de rupture des grains ainsi que les fragments obtenus. Nous remercions les auteurs de nous avoir aimablement fourni les données issues des reconstructions tomographiques pour les particules LBS-1 et LBS-3. Nous allons présenter dans la suite la méthode de reconstruction utilisée pour générer les grains numériques à partir des données tomographiques permettant leur utilisation pour des simulations de compression simple.

## 4.3 Reconstruction du grain à 3d

Nous allons présenter la méthode utilisée pour reconstruire les grains obtenus par  $\mu CT$ . Le matériau modèle sera de type "plein" et donc constitué de polyèdres non réguliers. L'objectif de cette procédure est de pouvoir obtenir un grain numérique dont



FIGURE 4.4: A gauche : surface reconstruite à partir des données tomographiques par la méthode "Marching Cubes" du grain LBS-1. A droite : zoom de la surface, on remarque clairement les marches générées par l'algorithme.

la surface corresponde à celle du grain réel. Les données qui nous ont été fournies par Zhao et al. (2015a) consistent en une liste de voxels décrivant le grain dans son ensemble.

La première étape de la reconstruction consiste à déterminer la surface du grain. Pour cela la méthode "Marching Cubes" (Lorensen and Cline, 1987) qui permet d'extraire la surface d'un nuage de points à 3d est utilisée. La surface ainsi obtenue pour le grain LBS-1 est présentée sur la figure 4.4a. Le temps de calcul des simulations numériques qui seront effectuées par la suite dépend directement du nombre de polyèdres qui composent l'empilement qui doit, de ce fait, rester raisonnable. La surface obtenue (Fig. 4.4a) reproduit suffisamment correctement les éléments de forme de la particule réelle, on considère donc que les détails de forme à une échelle plus petite n'auront pas d'incidence sur la rupture du grain et ne sont donc pas représentés. La surface obtenue par l'algorithme "Marching Cubes" n'est pas lisse, et comporte des "marches" comme on peut le voir sur la figure 4.4b. De plus, la surface actuelle est composée d'un très grand nombre de faces et doit donc être simplifiée. Pour cela, la fonction "Quadric Edge Collapse Decimation" implémentée dans le logiciel de traitement de maillages 3d "Meshlab" a été utilisée pour réduire le nombre de faces à 2000. La surface ainsi simplifiée est présentée sur la figure 4.5.

L'étape suivante de la reconstruction va consister à créer un pavage de Voronoï 3d dans lequel la surface du grain va être découpée. La tessellation de Voronoï est construite à partir de la méthode "Vectorizable Random Lattice" (Moukarzel and Herrmann, 1992) qui permet de contrôler la régularité du pavage obtenu. Tout d'abord, une grille cubique



FIGURE 4.5: Maillage de la surface reconstruite et simplifiée du grain LBS-1.



FIGURE 4.6: Construction de la tessellation de Voronoï avec la méthode "Vectorizable Random Lattice" (Moukarzel and Herrmann, 1992). (a) Grille pour la distribution des germes et triangulation de Delaunay correspondante. (b) Effet du paramètre *a* sur la régularité de la tessellation obtenue, tiré de D'Addetta (2004).

régulière composée de 50 cellules par côté est créée. La longueur des côtés de la grille est égale à 1.4 fois la plus grande longueur  $L_{max}$  du grain, les cellules de la grille ont donc un côté de longueur  $l_{cell} = (1.4 L_{max})/50$ . Une sous-cellule cubique de côté a est ensuite définie au centre de chaque cellule de la grille. Un point aléatoire est distribué dans chacune de ces sous-cellule, et l'ensemble de ces points constitueront les germes du diagramme de Voronoï (Fig. 4.6a). Le paramètre a permet donc de varier la régularité du pavage obtenu avec les limites a = 0 (point au centre de le cellule) qui produit un pavage régulier cubique et a = 1 le pavage le moins régulier accessible à partir d'une distribution aléatoire des germes dans une grille cubique (Fig. 4.6b). Pour limiter l'apparition de structures régulières dans l'empilement qui pourrait impacter le motif de rupture nous avons choisi une valeur a = 0.99.

La forme du grain est ensuite obtenue en découpant les polyèdres du pavage de



FIGURE 4.7: Méthode proposée par Mollon (2015) permettant d'obtenir des polyèdres de forme convenable au niveau de la surface du grain.

Voronoï selon la surface reconstruite à partir des données tomographiques. Cependant, une découpe directe des polyèdres qui intersectent cette surface aura tendance à générer des particules de forme indésirable (plat, très petit volume ...) au niveau de la surface du grain numérique. Mollon (2015) a proposé une méthode permettant de découper cette surface tout en minimisant la production de polyèdres de forme singulière, c'est cette méthode qui a été adaptée et utilisée pour la reconstruction. L'idée principale de la méthode proposée par Mollon (2015) est de corriger les germes proches de la surface à découper, ce qui permettra d'obtenir une tessellation de Voronoï plus adaptée à la découpe de cette surface. Tout d'abord, le maillage de la surface est superposé à la grille contenant les germes générés précédemment (Fig. 4.7a). Ensuite, les germes situés à une distance de la surface inférieure à  $d_1 = l_{cell}$  sont supprimés (Fig. 4.7b,4.7c). Des points sont distribués aléatoirement sur la surface avec une densité correspondante à celle des germes à l'intérieur du grain et sont ajoutés à la liste des germes de la tessellation de Voronoï (Fig. 4.7d). Les polyèdres du pavage ainsi obtenu sont découpés lorsqu'ils intersectent la surface, et ne sont gardés que les polyèdres situés à l'intérieur du volume qu'elle définie. La cohésion sera mise en place au sein du matériau suivant le modèle développé pour les matériaux "pleins".

## 4.4 Tests de compression simple

### 4.4.1 Configuration de simulation

Des simulations numériques de compression simple ont été effectuées sur les grains LBS-1 et LBS-3 reconstruits par la méthode décrite précédemment, dont les empilements obtenus sont présentés sur les figures 4.8a et 4.8b respectivement.



FIGURE 4.8: Empilement final reconstruit pour les grains : LBS-1 à gauche et LBS-3 à droite.

Les résultats présentés dans la suite ont été adimensionnés avec comme échelle de longueur la hauteur du grain, comme échelle de contrainte le module d'Young de la pâte cohésive ( $E_{\mu} = 1$ ), et les simulations sont effectuées à gravité nulle. Les échantillons sont comprimés dans leur hauteur entre deux parois. La paroi supérieure est déplacée à une vitesse constante  $V_c = 5.10^{-5}$  garantissant un régime quasi-statique, la paroi inférieure étant maintenue fixe. Les seuils de rupture en traction et en cisaillement sont respectivement de  $\sigma_n = 10^{-3}$  et  $\sigma_t = 4.10^{-4}$ , le frottement entre polyèdres est nul ( $\mu = 0$ ), et le frottement des parois vaut 0.5. Des simulations ont été effectuées pour différentes valeurs de ces paramètres, et sont résumés dans le tableau 4.2. La configuration de l'essai avec le positionnement des parois est présentée sur la figure 4.9.

	LI	LBS-2	
$\sigma_n$	$\mu = 0$	$\mu = 0.3$	$\mu = 0$
$2, 5.10^{-1}$	0	0	0
$1.10^{-1}$	0	0	0
$5.10^{-2}$	0	0	0
$1.10^{-3}$	0	×	0

TABLE 4.2: Simulations numériques effectuées pour l'étude de la fragmentation des grains LBS-1 et LBS-3.



FIGURE 4.9: Configuration de l'essai en compression simple pour le grain (a) LBS-1 et (b) LBS-3.

### 4.4.2 Caractéristiques des empilements

Le nombre d'éléments et le diamètre équivalent minimum  $d_{min}$ , maximum  $d_{max}$  et moyen  $d_{moy}$  des polyèdres composants le grain, défini comme le diamètre de la sphère ayant le même volume que le polyèdre, sont donnés dans le tableau 4.3.

TABLE 4.3: Nombre d'éléments et diamètre équivalent minimum, maximum et moyen des empilements pour les grains LBS-1 et LBS-3.

	Nombre d'éléments	$d_{min}$	$d_{max}$	$d_{moy}$
LBS-1	9371	$1,46.10^{-3}$	$1,01.10^{-1}$	$7,48.10^{-2}$
LBS-3	9344	$4.93.10^{-3}$	$1, 15.10^{-1}$	$8,57.10^{-2}$

Les fonctions de densité de probabilité des distributions des surfaces S, longueurs initiales  $l_0$ , masses m et du rapport  $S/l_0$  des interactions cohésives sont présentées sur les figures 4.10 et 4.11 respectivement pour les deux grains LBS-1 et LBS-3. Les distributions de  $l_0$  et m diffèrent légèrement, cependant les distributions de S et surtout du rapport  $S/l_0$  caractérisant la raideur des interactions cohésives sont suffisamment proches pour considérer que les microsctructures des grains sont semblables.



FIGURE 4.10: Fonctions densités de probabilités des distributions des longueurs initiales  $l_0$  (à gauche) et surfaces S (à droite) des interactions cohésives pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).



FIGURE 4.11: Fonctions densités de probabilités des distribution des masses m (à gauche) et du rapport  $S/l_0$  (à droite) des interactions cohésives pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).

#### 4.4.3 Comportement macroscopique et résistance des grains

Les courbes force/déplacement ainsi que l'évolution de la fraction d'interactions cohésives rompues sont présentées sur la figure 4.12 pour LBS-1 et LBS-3. Le comportement force/déplacement se décompose en une phase élastique suivie d'une chute de résistance due à l'initiation et la propagation d'une fissure. L'observation de l'évolution de la fraction d'interactions cohésives rompues montre dans les deux cas une évolution régulière, et donc une fracturation progressive du matériau. Bien que l'allure des courbes soit similaire pour les deux grains, on remarque nettement une résistance plus élevée pour le grain LBS-3, qui induit également un nombre plus important d'interactions cohésives rompues à un stade avancé de la fragmentation. La figure 4.13 présente les courbes de force déplacement mesurées expérimentalement par Zhao et al. (2015a). Plusieurs pics secondaires de grandes amplitudes sont présents après le pic initial, correspondant à des reprises de résistance et probablement l'apparition de fractures secondaires. On constate également que le grain LBS-3 à une résistance plus importante que le grain LBS-1, comportement qui est reproduit par les simulations numériques. Les distributions des paramètres microscopiques des interactions  $(S, l_0, m)$  étant similaires pour les deux grains, on peut donc en déduire que cette augmentation de résistance est principalement due à la forme des grains.



FIGURE 4.12: Courbes force/déplacement et évolutions de la rupture des interactions cohésives pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).



FIGURE 4.13: Courbes force/déplacement mesurées expérimentalement par Zhao et al. (2015a) pour les grains LBS-1 (trait pointillé) et LBS-3 (trait plein).

Des simulations pour différentes valeurs du seuil de rupture microscopique  $\sigma_n$  ont été effectuées, et l'évolution de la force à la rupture  $F_{max}$  en fonction de  $\sigma_n$  est présentée sur la figure 4.14a. La résistance macroscopique de l'échantillon augmente avec  $\sigma_n$  et cet effet est plus important pour le grain LBS-3 que pour le grain LBS-1. Des simulations avec un coefficient de frottement de  $\mu = 0.3$  ont été effectuées pour le grain LBS-1 pour en quantifier l'effet. On constate que la présence de frottement entre les polyèdres augmente beaucoup la résistance du matériau, une part de l'énergie de déformation étant dissipée par frottement aux contacts entre les polyèdres. Le rapport de la force appliquée F sur le déplacement axial de la paroi  $\Delta$ , calculé comme la pente de la courbe force/déplacement pour des déplacements faibles, en fonction de  $\sigma_n$  est présenté sur la figure 4.14b. L'effet du seuil de rupture  $\sigma_n$  est négligeable sur le rapport  $F/\Delta$ , il n'influence donc pas la raideur apparente du matériau, contrairement au frottement qui l'augmente de manière significative.

#### 4.4.4 Motifs de rupture et fragments

Les figures 4.15 et 4.16 montrent les motifs de rupture sous différents angles obtenus pour les grains LBS-1 et LBS-3 respectivement. Pour le cas LBS-1, on constate une fragmentation importante au sommet de l'échantillon au niveau du contact avec la paroi,



FIGURE 4.14: (a) Courbes de force à la rupture  $F_{max}$  en fonction du seuil de rupture en traction  $\sigma_n$  pour LBS-1 ( $\mu = 0$  et  $\mu = 0.3$ ) et LBS-3 ( $\mu = 0$ ). (a) Rapport force sur déplacement  $F/\Delta$  en fonction du seuil de rupture en traction  $\sigma_n$  pour les mêmes paramètres que (a).

ce qui concorde avec les résultats expérimentaux de Zhao et al. (2015a) (Fig. 4.15d). La fracture se produit dans un plan vertical, parallèle à la direction de compression. Le grain se fragmente en un bloc principal et un bloc de taille inférieure, contrairement au grain réel qui produit un nombre plus important de fragments. Pour le cas LBS-3, une fracture traversant entièrement l'échantillon est obtenue, ce qui produit deux blocs principaux de tailles équivalentes et également un bloc secondaire. On peut constater que la fracture principale correspond à celle obtenue pour le grain réel, ce dernier est néanmoins caractérisé par un deuxième plan de fracture perpendiculaire au premier qui manque dans la simulation. L'absence de modélisation de l'hétérogénéité de la microstructure due à la minéralogie du grain peut être la cause du manque de ces plans de fracture dans les simulations. Le lissage de la zone de contact avec les parois peut également influencer l'initiation des fissures et ainsi concentrer les contraintes sur un seul plan de fracture.

La figure 4.17 présente les distributions en nombre (Fig. 4.17a) et en masse (Fig. 4.17b) du diamètre équivalent du fragment  $d_{frag}$ , calculé comme le diamètre de la sphère ayant le même volume que le fragment, obtenus pour les grains LBS-1 et LBS-3. On constate la présence de nombreux fragments de diamètres correspondants au diamètre équivalent moyen des polyèdres, ce sont donc des fragments composés d'un seul élément. C'est évident que la discrétisation de l'empilement joue un rôle sur la distribution des petits fragments. La distribution en masse (Fig. 4.17b) fait apparaître plus clairement



FIGURE 4.15: Motifs de rupture du grain LBS-1 : (a) vue de côté, (b) vue du dessus, (c) vue du dessus, (d) vue du dessus des fragments obtenus par Zhao et al. (2015a).



FIGURE 4.16: Motifs de rupture du grain LBS-3 : (a) vue de côté, (b) vue du dessus, (c) vue du dessus, (d) vue du dessus des fragments obtenus par Zhao et al. (2015a).



FIGURE 4.17: Fonctions de densité de probabilité du diamètre des fragments  $d_{frag}$  obtenus pour LBS-1 (rond bleu) et LBS-3 (carré vert). (a) Distribution en nombre, (b) distribution en masse.

les gros fragments, et on constate que les nombreux petits fragments ne représentent qu'une fraction très faible de la masse du grain.

La méthode de reconstruction et de simulation est donc encourageante car elle permet de reproduire : (1) l'effet de la forme des grains sur leur résistance et (2) une partie des fragments observés expérimentalement. De plus, des analyses sur le produit de la fracture peuvent être menées, qui sont néanmoins limitées par la discrétisation de l'empilement qui influence la distribution de taille des petits fragments.

## 4.5 Conclusion

La forme des grains influence fortement leur comportement à la fragmentation, et notamment leur résistance et le motif de fracture qui conditionne la forme des fragments obtenus. Cependant, la prise en compte de la forme réelle des grains pour une utilisation avec des méthodes numériques de type éléments discrets pose plusieurs difficultés. Tout d'abord, l'utilisation de particules sphériques nécessite un grand nombre de particules pour obtenir une description convenable de la surface du grain et donc une augmentation importante du temps de calcul. Une alternative intéressante est l'utilisation de particules polyédriques permettant de reconstruire la surface du grain de manière précise et avec un nombre limité de particules.

Une méthode de reconstruction de grains réels issus de mesures tomographiques a été présentée. La surface du grain est reconstruite numériquement à partir des données tomographiques (voxels) avec l'algorithme "Marching Cubes", puis simplifiée pour limiter le nombre de faces du maillage généré. Le grain numérique est ensuite construit à partir d'un empilement issu d'une tessellation de Voronoï, au sein de laquelle la forme du grain est "découpée" à l'aide de la surface reconstruite. Une méthode issue des travaux de Mollon (2015) permet d'éviter la création de polyèdres de mauvaise forme à proximité de la surface.

Des tests de compression uniaxiale ont été effectués pour deux grains reconstruits avec la méthode présentée et les motifs de rupture obtenus ont été comparés aux résultats expérimentaux de Zhao et al. (2015a). Pour les deux cas étudiés, le modèle numérique permet de reproduire l'effet de la forme du grain sur sa résistance, comme observé expérimentalement pour les deux grains étudiés. Cependant, le modèle ne reproduit pas l'intégralité des fractures, et de ce fait la progéniture de fragments obtenus. Ces différences peuvent être attribuées au manque de représentation de la microstructure et de la minéralogie du grain. Sa prise en compte est envisageable par l'introduction de clusters de polyèdres au sein de la tessellation de Voronoï, dont la détermination serait également issue des données tomographiques.

# Bilan et perspectives

Les méthodes aux éléments discrets ont prouvé leur efficacité pour l'étude de la fracturation des matériaux. Leur utilisation ne nécessite pas de modèles décrivant explicitement l'initiation de la fissure et son mode de propagation que l'on retrouve dans les méthodes continues. En effet, la fissure macroscopique s'initie au niveau microscopique par la rupture d'interactions entre les éléments formant le matériau, ce qui constitue une description plus proche du phénomène intervenant lors de la fracturation de matériaux réels. Cependant, plusieurs études ont montré l'importance de la microstructure sur le comportement obtenu, et notamment ont mis en avant les limitations dues à l'utilisation de particules circulaires ou sphériques dans ces méthodes. Pour contourner ces limitations des modèles permettant de grouper les particules pour représenter des grains de forme irrégulière au sein du matériau ont été proposés, et ont démontré qu'ils permettaient d'obtenir un comportement proche de celui attendu. Dans le but de décrire plus finement la microstructure de certains matériaux, des modèles à éléments polygonaux/polyédriques ont également été proposés. Ils permettent de tenir compte de l'irrégularité des grains directement à partir de l'empilement généré, généralement à partir d'une tessellation de Voronoï.

Des avancées récentes en terme d'analyse de la microstructure des matériaux par tomographie RX fournissent une description très précise des arrangements des grains et de leur forme. Il est donc intéressant de chercher à pouvoir utiliser ces données issues de matériaux réels pour la génération d'empilements utilisables dans les simulations numériques. Cependant, cela requiert de disposer d'un modèle suffisamment souple permettant de traiter les formes irrégulières de particules, et de modéliser la cohésion au sein de l'empilement.

Ce travail de thèse à donc consisté au développement d'un modèle aux éléments discrets permettant de simuler des matériaux fragiles constitués d'un empilement de

particules de formes arbitraires. Ce modèle a été présenté en détail dans le chapitre 2. Le contact entre particules est décrit par la dynamique des contacts non régulière (NSCD), et est séparé de la modélisation de la cohésion. Ce découplage permet de mettre en place la cohésion dans l'empilement quelle que soit la forme des particules qui le compose. Dans le cas de matériaux cimentés, la pâte cohésive se trouvant dans la zone entre les grains est modélisée par deux ressorts (trois en 3d) agissant dans les directions normale et tangentielle et situés de part et d'autre des particules. De cette manière, la forme des particules n'aura d'effet que sur le positionnement de ces ressorts, auquel s'ajoutera l'effet du contact entre elles. Les résultats obtenus ont montré que le modèle permet de reproduire convenablement le comportement macroscopique d'un matériau fragile sous compression uniaxiale. Une phase linéaire élastique durant laquelle les interactions cohésives restent intactes est suivie par une chute soudaine de contrainte correspondant à l'initiation et à la propagation de fractures macroscopiques dans l'empilement, caractéristique d'un matériau fragile. L'étude de l'influence des paramètres du modèle a montré que la dissipation d'énergie due au frottement de contact a une grande importance sur la propagation des fractures à travers l'empilement et conduit à un comportement de fracturation progressive, pas conséquent elle ne peut plus être négligée. Le modèle a ensuite été adapté à la description de matériaux « pleins ». Dans ce cas, les empilements sont construits à partir de tessellations de Voronoï, ce qui permet d'obtenir des empilements de compacité 1. Pour ce modèle, les résultats ont montré que le frottement entre particules a une grande influence sur le comportement macroscopique, et notamment sur le motif de rupture obtenu. Les différences de comportement en contrainte/déformation des modèles pour ces deux types de matériaux s'observent principalement dans la zone post-rupture, dénotant une perte du comportement fragile pour le modèle de matériaux « pleins » (Fig. 4.18). Une étude paramétrique ultérieure permettant de caractériser l'influence des différents paramètres utilisés devrait permettre de déterminer l'origine de cette perte de fragilité.

Le modèle a ensuite été appliqué à l'étude de l'influence du positionnement des points de contact externes sur la résistance d'une particule cylindrique. Ce travail se situe dans la continuité des travaux de Tsoungui et al. (1999b) et Ben-Nun and Einav (2010) qui ont modélisé l'influence des forces exercées par les voisins sur la résistance d'une particule circulaire. Ces modèles transforment un réseau de forces externes arbitraires appliquées sur la périphérie d'une particule circulaire en une configuration à deux (Tsoungui et al., 1999b) ou trois (Ben-Nun and Einav, 2010) forces équivalentes pour modéliser une rupture due respectivement à des efforts en traction ou en cisaillement.



FIGURE 4.18: Courbes de contrainte/déformation en compression uniaxiale pour le modèle de matériaux (a) cimentés (b) « pleins ».

Dans le modèle de Ben-Nun and Einav (2010), les trois forces équivalentes sont placées régulièrement autour de la particule. Cependant, les études numériques que nous avons effectuées ont montré que le positionnement des points de contact autour de la particule a une influence majeure sur sa résistance à la fragmentation. Un dispositif expérimental de fragmentation dynamique par impact a été mis en place, permettant l'application de trois points de contact fixes à positionnement variable. Cette étude expérimentale a permis de confirmer les résultats numériques. Cependant, la configuration du dispositif ne permet pas en l'état une comparaison plus fine des résultats obtenus, mais a néanmoins permis de justifier une telle étude. Une étude expérimentale ultérieure avec application d'efforts quasi-statiques sous presse hydraulique devrait permettre une comparaison plus précise, et également l'élaboration d'un modèle incluant l'effet du positionnement des points de contact sur le confinement appliqué à la particule.

Le modèle développé durant cette thèse a également été appliqué à l'étude de la fragmentation de grains reconstruits à partir de données issues de mesures tomographiques de matériaux réels. Une méthode de reconstruction 3d a été présentée, elle permet de construire un empilement "plein" dont la surface correspond à celle du grain tomographié. Des simulations numériques de compressions uniaxiales ont permis de comparer les motifs de rupture obtenus numériquement et expérimentalement. Le modèle permet de reproduire certaines des fractures observées expérimentalement. Cependant, la microstructure et la minéralogie du matérau réel n'étant prise en compte, le modèle le permet pas de reproduire pleinement le comportement macroscopique. Néanmoins, cela permet de démontrer la nécessité de la prise en compte de la forme réelle des grains dans les modèles de fragmentation. Ces grains numériques pourront ensuite être utilisés pour des études à plus grandes échelles comme par exemple l'étude de la fragmentation de matériaux au sein d'un concasseur. Un premier exemple de simulation de concasseur à impact réalisée durant cette thèse pour montrer une application possible de cette étude est présenté sur la figure 4.19.



FIGURE 4.19: Exemple d'application envisagée pour le modèle développé : simulation d'un concasseur à impact.

# Annexe : Implémentation de la loi d'interaction cohésive par changement de variable dans LMGC90

Le système résolu par le solveur de LMGC90 dans un cas sans frottement est le suivant :

$$\begin{pmatrix} U_N \\ U_T \end{pmatrix} = U_{free} + W \begin{pmatrix} I_N \\ I_T \end{pmatrix}, \tag{1}$$

$$g \ge 0, \qquad I_N \ge 0, \qquad gI_N = 0, \tag{2}$$

$$I_T = 0, (3)$$

avec  $I_N$ ,  $I_T$  les impulsions normale et tangentielle au contact,  $U_{free}$  la vitesse du contact sans interaction et W la matrice de Delassus. On pose le changement de variable suivant :

$$I_N = \widetilde{I_N} + F_N^c h,$$
$$I_T = \widetilde{I_T} + F_T^c h,$$

avec  $\widetilde{I_N}$ ,  $\widetilde{I_T}$  les impulsions modifiées, et  $F_N^c h$ ,  $F_T^c h$  les impulsions dues aux interactions cohésives (avec h le pas de temps). Les forces et vitesses relatives au contact sont données par :

$$F_N^c = -k_n^s \Delta_n - k_n^v U_N,$$
  

$$F_T^c = -k_t^s \Delta_t - k_t^v U_T,$$
  

$$U_T = \frac{\Delta_t - \Delta_t^b}{h},$$
  

$$U_N = \frac{\Delta_n - \Delta_n^b}{h}.$$

Le système à résoudre devient :

$$\begin{pmatrix} U_N \\ U_T \end{pmatrix} = U_{free} + W \begin{pmatrix} \widetilde{I_N} - k_n^s \Delta_n h - k_n^v U_N h \\ \widetilde{I_T} - k_t^s \Delta_t h - k_t^v U_T h \end{pmatrix}.$$
(4)

En développant la partie qui multiplie W, et en transférant les termes ne dépendant pas des vitesses  $U_N$  et  $U_T$  dans  $U_{free}$  on obtient :

$$\begin{pmatrix} U_N \\ U_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{free,n} + W_{NN}\Delta_n^b k_n^s h - W_{NT}\Delta_t^b k_t^s h \\ U_{free,t} + W_{TN}\Delta_n^b k_n^s h - W_{TT}\Delta_t^b k_t^s h \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} \widetilde{I_N} \\ \widetilde{I_T} \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} -k_n^s U_N h^2 - k_n^v U_N h \\ -k_t^s U_T h^2 - k_t^v U_T h \end{pmatrix},$$
(5)

$$\begin{pmatrix} U_N \\ U_T \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 + W_{NN}(k_n^s h^2 + k_n^v h) & W_{NT}(k_t^s h^2 + k_t^v h) \\ W_{TN}(k_n^s h^2 + k_n^v h) & 1 + W_{TT}(k_t^s h^2 + k_t^v h) \end{pmatrix} = \widetilde{U}_{free} + W \begin{pmatrix} \widetilde{I_N} \\ \widetilde{I_T} \end{pmatrix}.$$
(6)

En posant :

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 + W_{NN}(k_n^s h^2 + k_n^v h) & W_{NT}(k_t^s h^2 + k_t^v h) \\ W_{TN}(k_n^s h^2 + k_n^v h) & 1 + W_{TT}(k_t^s h^2 + k_t^v h) \end{bmatrix}$$
(7)

On obtient finalement le système à résoudre :

$$\begin{pmatrix} U_N \\ U_T \end{pmatrix} = \widetilde{\widetilde{U}}_{free} + \widetilde{W} \begin{pmatrix} \widetilde{I}_N \\ \widetilde{I}_T \end{pmatrix}, \qquad (8)$$

 $\operatorname{avec}$  :

$$\widetilde{\widetilde{U}}_{free} = \mathbf{G}^{-1} \widetilde{U}_{free},\tag{9}$$

$$\widetilde{W} = \mathbf{G}^{-1} W. \tag{10}$$

Ce système est de la même forme que le système 1, et considérant que la loi d'interaction cohésive avec le changement de variable devient :

$$g \ge 0, \qquad \widetilde{I}_N \ge 0, \qquad g\widetilde{I}_N = 0,$$
 (11)

$$\widetilde{I}_T = 0, \tag{12}$$

le système peut être résolu par le solveur NLGS de LMGC90.

# Bibliographie

- Abe, S. and Mair, K. (2005). Grain fracture in 3D numerical simulations of granular shear. *Geophysical Research Letters*, 32(5):1–4.
- Abe, S. and Mair, K. (2009). Effects of gouge fragment shape on fault friction : New 3D modelling results. *Geophysical Research Letters*, 36(23) :2–5.
- Affes, R., Delenne, J.-Y. Y., Monerie, Y., Radjaï, F., and Topin, V. (2012). Tensile strength and fracture of cemented granular aggregates. *European Physical Journal* E, 35(11) :117.
- Alaei, E. and Mahboubi, A. (2012). A discrete model for simulating shear strength and deformation behaviour of rockfill material, considering the particle breakage phenomenon. *Granular Matter*, 14(6):707–717.
- Alonso, E., Tapias, M., and Gili, J. (2013). Particle crushing, scale effects and delayed behaviour of rockfill. A DEM investigation. Alter workshop. Degradation in geomaterials.
- André, D., Iordanoff, I., Charles, J.-l., and Néauport, J. (2012). Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213-216 :113-125.
- André, D., Jebahi, M., Iordanoff, I., Charles, J.-l., and Néauport, J. (2013). Using the discrete element method to simulate brittle fracture in the indentation of a silica glass with a blunt indenter. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 265 :136-147.
- Asahina, D. and Bolander, J. E. (2011). Voronoi-based discretizations for fracture analysis of particulate materials. *Powder Technology*, 213(1):92–99.

- Bagherzadeh Kh., a., a.a. Mirghasemi, and Mohammadi, S. (2011). Numerical simulation of particle breakage of angular particles using combined DEM and FEM. *Powder Technology*, 205(1-3) :15–29.
- Barenblatt, G. and Cherepanov, G. (1960). On the wedging of brittle bodies.
- Ben-Nun, O. and Einav, I. (2010). The role of self-organization during confined comminution of granular materials. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, 368(1910) :231-47.
- Berton, S. and Bolander, J. E. (2006). Crack band model of fracture in irregular lattices. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 195(52):7172–7181.
- Bolander, J. E. and Sukumar, N. (2005). Irregular lattice model for quasistatic crack propagation. Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 71(9) :1– 12.
- Bolton, M. D., Nakata, Y., and Cheng, Y. P. (2004). Crushing and plastic deformation of soils simulated using DEM. *Géotechnique*, 54(2):131–141.
- Bolton, M. D., Nakata, Y., and Cheng, Y. P. (2008). Micro- and macro-mechanical behaviour of DEM crushable materials. *Géotechnique*, 58(6):471–480.
- Bono, J. P. D., McDowell, G. R., and Wanatowski, D. (2014). DEM of triaxial tests on crushable cemented sand. *Granular Matter*, 16(4):563–572.
- Brosh, T., Kalman, H., and Levy, A. (2011). Fragments spawning and interaction models for DEM breakage simulation. *Granular Matter*, 13(6):765-776.
- Brown, N. J., Chen, J.-F., and Ooi, J. Y. (2014). A bond model for DEM simulation of cementitious materials and deformable structures. *Granular Matter*, 16(3):299-311.
- Bruchmüller, J., van Wachem, B. G. M., Gu, S., and Luo, K. H. (2011). Modelling discrete fragmentation of brittle particles. *Powder Technology*, 208(3):731–739.
- Cantor, D. and Estrada, N. (2015). New approach to grain fragmentation for discrete element methods. *Geomechanics from Micro to Macro*, pages 257–262.
- Cantor, D., Estrada, N., and Azéma, E. (2015). Split-Cell Method for grain fragmentation. *Computers and Geotechnics*, 67:150–156.

- Carmona, H. A., Wittel, F. K., and Kun, F. (2014). From fracture to fragmentation : Discrete element modeling : Complexity of crackling noise and fragmentation phenomena revealed by discrete element simulations. *European Physical Journal : Special Topics*, 223(11) :2369–2382.
- Carmona, H. a., Wittel, F. K., Kun, F., and Herrmann, H. J. (2008). Fragmentation processes in impact of spheres. *Physical Review E*, 77(5):051302.
- Cheng, Y. P., Bolton, M. D., and Nakata, Y. (2003). Discrete element simulation of crushable soil. *Géotechnique*, 53(7):633-641.
- Cho, N., Martin, C., and Sego, D. (2007). A clumped particle model for rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 44(7):997–1010.
- Cil, M. and Alshibli, K. (2014). 3D evolution of sand fracture under 1D compression. Géotechnique, 64(5):351–364.
- Cil, M. B. and Alshibli, K. a. (2012). 3D assessment of fracture of sand particles using discrete element method. *Géotechnique Letters*, 2(July-September) :161–166.
- Cleary, P. (2001). Modelling comminution devices using DEM. Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech., 25(July 2000) :83-105.
- Cook, N. (1965). The failure of rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts, 2(4):389-403.
- Cundall, P. (1988). Formulation of a Three-dimensional Distinct Element M odel Part
  I. A Scheme to Detect and Represent Contacts in a System Composed of Many
  Polyhedral Blocks. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr., 25(3):107-116.
- D'Addetta, G. A. (2004). Discrete Models for Cohesive Frictional Materials. PhD thesis.
- D'Addetta, G. A., Kun, F., and Ramm, E. (2002). On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials. *Granular Matter*, 4(2):77–90.
- de Bono, J. P. and McDowell, G. R. (2013). Discrete element modelling of onedimensional compression of cemented sand. *Granular Matter*, 16(1):79–90.
- de Bono, J. P. and McDowell, G. R. (2014). DEM of triaxial tests on crushable sand. Granular Matter, 16(4):551–562.

- De Larrard, F. and Sedran, T. (2007). Le logiciel BétonlabPro 3. Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées, 270-271.
- Donzé, F., Bouchez, J., and Magnier, S. (1997). Modeling fractures in rock blasting. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 34(8) :1153–1163.
- Dubois, F., Jean, M., Renouf, M., Mozul, R., Martin, A., and Bagneris, M. (2011). LMGC90. In 10e Colloque National en Calcul des Structures, pages 1–8.
- Dugdale, D. (1960). Yielding of steel sheets containing slits. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 8(2) :100–104.
- Elghezal, L., Jamei, M., and Georgopoulos, I.-O. (2013). DEM simulations of stiff and soft materials with crushable particles : an application of expanded perlite as a soft granular material. *Granular Matter*, 15(5):685–704.
- Fell, J. T. and Newton, J. M. (1970). Determination of tablet strength by the diametral compression test. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 59(5):688–691.
- Feng, J., Chen, P., and Ni, J. (2012). Prediction of surface generation in microgrinding of ceramic materials by coupled trajectory and finite element analysis. *Finite Elements* in Analysis and Design, 57(2013) :67–80.
- Ferellec, J.-F. and McDowell, G. R. (2010). A method to model realistic particle shape and inertia in DEM. *Granular Matter*, 12(5):459–467.
- Franklin, J. a. (1971). Triaxial strength of rock materials. Rock Mechanics Felsmechanik Mi¿œcanique des Roches, 3(2):86–98.
- Galindo-Torres, S., Pedroso, D., Williams, D., and Li, L. (2012). Breaking processes in three-dimensional bonded granular materials with general shapes. *Computer Physics Communications*, 183(2):266–277.
- Gervois, A., Annic, C., Lemaitre, J., Ammi, M., Oger, L., and Troadec, J.-P. P. (1995). Arrangement Of Discs In 2d Binary Assemblies. *Physica A*, 218(3-4) :403–418.
- Griffith, A. A. (1921). The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A., 221(582-593) :163-198.
- Hagerty, B. M. M., Member, A., Hite, D. R., Ullrich, C. R., and Hagerty, D. J. (1993). One Dimensional High Pressure Compression of Granular Media. *Journal of Geo*technical Engineering, 119(1):1–18.

- Hanley, K. J., O'Sullivan, C., Oliveira, J. C., Cronin, K., and Byrne, E. P. (2011). Application of Taguchi methods to DEM calibration of bonded agglomerates. *Powder Technology*, 210(3):230–240.
- Hardin, B. B. O. and Asce, F. (1986). Crushing Of Soil Particles. (10).
- Hart, R., Cundall, P., and Lemos, J. (1988). Formulation of a Three-dimensional Distinct Element Model Part II. Mechanical Calculations for Motion and Interaction of a System Composed of Many Polyhedral Blocks. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr., 25(3) :117–125.
- Hentz, S., Daudeville, L., and Donzé, F. V. (2004a). Identification and Validation of a Discrete Element Model for Concrete. J. Eng. Mech., 130(6) :709-719.
- Hentz, S., Donzé, F. V., and Daudeville, L. (2004b). Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. *Computers & Structures*, 82(29-30) :2509-2524.
- Herrmann, H. J. and Roux, S. (1990). Statistical Models for the Fracture of Disordered Media. North-Holland, Amsterdam.
- Herrmann, J., Hansen, A., and Roux, S. (1989). Disordered, Elastic Lattices. *Physical Review B*, 39(1).
- Hoek, E. (1968). Brittle Fracture of Rock. *Rock Mechanics in Engineering Practice*, pages 1–30.
- Hoek, E. and Bieniawski, Z. T. (1965). Brittle Rock Fracture Propagation In Rock Under Compression Brittle Rock Fracture Propagation in Rock Under Compression. International Journal of Fracture Mechanics, 1(3) :137–155.
- Holman, L. E. and Leuenberger, H. (1988). The relationship between solid fraction and mechanical properties of compacts - the percolation theory model approach. *International Journal of Pharmaceutics*, 46(1-2):35-44.
- Hrennikoff, A. (1941). Solution of problems of elasticity by the framework method. J. Appl. Mech. Trans. ASME, 8.
- Irwin, G. R. (1957). Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate. *Journal of Applied Mechanics*.

- Janach, W. (1976). The role of bulking in brittle failure of rocks under rapid compression. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts, 13(6) :177–186.
- Janach, W. (1977). Failure of granite under compression. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts, 14(4) :209-215.
- Jean, M. (1999). The non-smooth contact dynamics method. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 177(3-4) :235-257.
- Jiang, M., Liu, F., and Zhou, Y. (2014). A bond failure criterion for DEM simulations of cemented geomaterials considering variable bond thickness. Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.
- Jiang, M., Yu, H.-S., and Harris, D. (2005). A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance. *Computers and Geotechnics*, 32(5):340–357.
- Jiang, M. J., Yu, H. S., and Harris, D. (2006). Bond rolling resistance and its effect on yielding of bonded granulates by DEM analyses. *International Journal for Numerical* and Analytical Methods in Geomechanics, 30(8):723-761.
- Jing, L. (2003). A review of techniques, advances and outstanding issues in numerical modelling for rock mechanics and rock engineering. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 40(3):283-353.
- Jing, L. and Hudson, J. (2002). Numerical methods in rock mechanics. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 39(4):409-427.
- Kawamura, H., Hatano, T., Kato, N., Biswas, S., and Chakrabarti, B. K. (2012). Statistical physics of fracture, friction, and earthquakes. *Reviews of Modern Physics*, 84(2).
- Kendall, K. (1978). The impossibility of comminuting small particles by compression. *Nature*, 272.
- Lorensen, W. E. and Cline, H. E. (1987). Marching cubes : A high resolution 3D surface construction algorithm. Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques - SIGGRAPH '87, 21(4) :163-169.

- Moës, N., Dolbow, J., and Belytschko, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 46(1):131–150.
- Mollon, G. (2015). A numerical framework for discrete modelling of friction and wear using Voronoi polyhedrons. *Tribology International*, 90 :343–355.
- Moreau, J. J. (1988). Unilateral contact and dry friction in finite freedom analysis, volume 302. Springer-Verlag, Wien, New York, cism cours edition.
- Moukarzel, C. and Herrmann, H. J. (1992). A vectorizable random lattice. *Journal of Statistical Physics*, 68(5-6):911-923.
- Nguyen, D.-h., Azéma, E., Sornay, P., and Radjaï, F. (2015). Bonded-cell model for particle fracture. *Physical Review E*, 91(022203) :1–9.
- Obermayr, M., Dressler, K., Vrettos, C., and Eberhard, P. (2013). A bonded-particle model for cemented sand. *Computers and Geotechnics*, 49 :299–313.
- Oda, M. and Kazama, H. (1998). Microstructure of shear bands and its relation to the mechanisms of dilatancy and failure of dense granular soils. *Géotechnique*, 48(4):465– 481.
- Oda, M., Konishi, J., and Nemat-Nasser, S. (1982). Experimental micromechanical evaluation of strength of granular materials : Effects of particle rolling. *Mechanics of Materials*, 1(4) :269–283.
- Peng, S. and Johnson, A. M. (1972). Crack growth and faulting in cylindrical specimens of chelmsford granite. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and, 9(1):37-86.
- Potyondy, D. O. and Cundall, P. A. (2004). A bonded-particle model for rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 41(8) :1329-1364.
- Qian, Z. and Schlangen, E. (2012). Lattice Modeling of fracture processes in numerical concrete with irregular shape aggregates. VII International Conference on Fracture Mechanics of concrete and concrete structures, pages 1539–1545.
- Quey, R. (2015). Neper : numerical descriptors of polycrystals (version 2.0). Available at http://neper.sourceforge.net.

- Quey, R., Dawson, P. R., and Barbe, F. (2011). Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods* in Applied Mechanics and Engineering, 200(17-20) :1729–1745.
- Renouf, M., Dubois, F., and Alart, P. (2004). A parallel version of the non smooth contact dynamics algorithm applied to the simulation of granular media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168(1-2):375–382.
- Renouf, M., Gezahengn, B., Abbas, M., and Bourgeois, F. (2013). Impact of numerical models on fragmentation processes. AIP Conference Proceedings, 1542(2013) :907– 910.
- Rivière, J., Renouf, M., and Berthier, Y. (2015). Thermo-Mechanical Investigations of a Tribological Interface. *Tribology Letters*, 58(3).
- Roth, S., Hütter, G., and Kuna, M. (2014). Simulation of fatigue crack growth with a cyclic cohesive zone model. *International Journal of Fracture*, 188(1):23–45.
- Salman, A. D., Ghadiri, M., and Hounslow, M. J., editors (2007). *Particle Breakage*. Elsevier.
- Schlangen, E. and Garboczi, E. J. (1996). New method for simulating fracture using an elastically uniform random geometry lattice. *International Journal of Engineering Science*, 34(10) :1131–1144.
- Schlangen, E. and van Mier, J. G. M. (1992). Simple lattice model for numerical simulation of fracture of concrete materials and structures. *Materials and Structures*, 25(9):534–542.
- Scholtès, L. and Donzé, F.-V. (2012). Modelling progressive failure in fractured rock masses using a 3D discrete element method. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 52 :18–30.
- Scholtès, L. and Donzé, F.-V. (2013). A DEM model for soft and hard rocks : Role of grain interlocking on strength. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 61(2):352-369.
- Schwartz, L. M., Feng, S., Thorpe, M. F., and Sen, P. N. (1985). Behavior of depleted elastic networks : Comparison of effective-medium and numerical calculations. *Physical Review B*, 32(7) :4607–4617.

- Sukumaran, B., Einav, I., and Dyskin, A. (2006). Qualitative assessment of the influence of coordination number on crushing strength using DEM. Proceedings of the Fifth World Congress Particle Technology.
- Tang, C. and Hudson, J. a. (2010). Rock Failure Mechanisms.
- Thornton, C., Ciomocos, M., and Adams, M. (2004). Numerical simulations of diametrical compression tests on agglomerates. *Powder Technology*, 140(3) :258-267.
- Tillemans, H. J. and Herrmann, H. J. (1995). Simulating deformations of granular solids under shear. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 217(3-4) :261– 288.
- Topin, V., Delenne, J.-Y., Radjai, F., Brendel, L., and Mabille, F. (2007). Strength and failure of cemented granular matter. The European physical journal. E, Soft matter, 23(4):413–29.
- Tsoungui, O., Vallet, D., and Charmet, J.-C. (1999a). Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials. *Powder Technology*, 105(1-3) :190– 198.
- Tsoungui, O., Vallet, D., Charmet, J.-C., and Roux, S. (1999b). Size effects in single grain fragmentation. *Granular Matter*, 2(1):19–27.
- Ueda, T., Matsushima, T., and Yamada, Y. (2013). DEM simulation on the onedimensional compression behavior of various shaped crushable granular materials. *Granular Matter*, 15(5):675–684.
- Utili, S. and Nova, R. (2008). DEM analysis of bonded granular geomaterials. Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech., 32(August) :1997-2031.
- Wawersik, W. R. and Brate, W. F. (1971). Post-Failure Behavior of a Granite and Diabase. *Rock Mechanics*, 3 :61–85.
- Weibull, W. (1939). A statistical theory of the strength of materials.
- Yip, M., Li, Z., Liao, B. S., and Bolander, J. E. (2006). Irregular lattice models of fracture of multiphase particulate materials. *International Journal of Fracture*, 140(1-4):113–124.

- Zhang, B.-y., Jie, Y.-x., and Kong, D.-z. (2014). Simulation of Rockfill Materials Using Aggregates of Cement Ellipsoids. J. Mater. Civ. Eng., 26 :107–116.
- Zhao, B., Wang, J., Coop, M. R., Viggiani, G., and Jiang, M. (2015a). An investigation of single sand particle fracture using X-ray micro-tomography. *Géotechnique*, 65(8):625-641.
- Zhao, T., Dai, F., Xu, N. W., Liu, Y., and Xu, Y. (2015b). A composite particle model for non-spherical particles in DEM simulations. *Granular Matter*, 17(6):763-774.
- Zhou, W., Chang, X.-l., and Yuan, W. (2014). Combined FEM/DEM Modeling of Triaxial Compression Tests for Rock fi lls with Polyhedral Particles. *International Journal of Geomechanics*, pages 1–12.





# Thèse de Doctorat

# **Aurélien Neveu**

Titre de la thèse : Simulation numérique de la fragmentation des granulats

Title of thesis: Numerical simulation of the fragmentation of aggregates

#### Résumé

La fragmentation des matériaux est un phénomène qui entre en jeu dans de nombreux systèmes naturels et industriels, et à différentes échelles. D'un point de vue industriel, la fragmentation est d'une grande importance dans la production de granulats de carrière, qui sont soumis à des critères stricts en termes de tailles et de formes. Néanmoins, les phénomènes à l'origine de la fracture des matériaux restent encore aujourd'hui mal maîtrisés.

Les méthodes aux éléments discrets permettent une modélisation des interactions à l'échelle de la microstructure du matériau. Un des avantages de ces méthodes est que la fissure apparaît et se propage dans l'empilement de manière naturelle, sans qu'il soit nécessaire de la décrire par modèles de fissuration.

Un modèle aux éléments discrets permettant de représenter la cohésion au sein d'un matériau composé de particules de formes quelconques a été développé durant cette thèse. Des simulations numériques ont été effectuées pour deux types d'empilements représentant soit des matériaux cimentés, soit des matériaux "pleins". Les résultats obtenus ont permis de confirmer que ce modèle est capable de reproduire le comportement macroscopique de la rupture de matériau fragile.

Le modèle a été ensuite appliqué à l'étude de l'influence du positionnement de points de contact externes sur la résistance d'une particule cylindrique. Une étude expérimentale d'impact a été menée et a permis de confirmer ces résultats. Enfin, nous avons appliqué notre approche à la reconstruction de grains issus de données tomographiques.

#### Mots-clés

Fragmentation, matériaux granulaires, élément discret, concassage, fracture

#### Abstract

The fragmentation of materials is a phenomenon which arises in several natural and industrial systems, and for a wide range of scales. From an industrial point of view, the crushing process is very important in the production of aggregates, which are often required to meet high criteria in terms of size and shape. However, the phenomena behind fracture of materials are still not completely understood.

The discrete element methods allow to model interactions at the scale of the material micro-structure, by means of simple models. One of the advantages of this kind of methods is the natural way the crack initiates and propagates in the sample, without any need of a crack model.

A discrete element model allowing to describe cohesion inside the material composed of particles of arbitrary shapes has been developed in this work. Numerical simulations have been conducted for two kinds of samples describing both cemented and plain materials. The results obtained have shown the ability of the numerical model to reproduce the macroscopic behavior of the fracture of a brittle material.

The developed model has been applied to study the influence of the positioning of external contact points on the effective strength of a cylindrical shaped grain. The results have demonstrated an increase of the required force to break the grain depending on the position of the contacts. An experimental study has confirmed the numerical results. Finally, the model has been applied to the building of grains based on tomographic data.

#### **Key Words**

Fragmentation, granular materials, discrete element, crushing, fracture