



HAL
open science

Modélisation numérique et rhéologie des matériaux à particules déformables

Thanh Hai Nguyen

► **To cite this version:**

Thanh Hai Nguyen. Modélisation numérique et rhéologie des matériaux à particules déformables. Matériaux et structures en mécanique [physics.class-ph]. Université de Montpellier, 2016. Français. NNT: . tel-01540978v1

HAL Id: tel-01540978

<https://hal.science/tel-01540978v1>

Submitted on 16 Jun 2017 (v1), last revised 6 Jun 2018 (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

Pour obtenir le grade de
Docteur

Délivré par
UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

Préparée au sein de l'école doctorale
Information, Structures, Systèmes

Et de l'unité de recherche
Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC)

Spécialité: **Mécanique et Génie Civil**

Modélisation numérique et rhéologie des matériaux à particules déformables

par

Thanh Hai NGUYEN



Soutenue le 04/11/2016 devant le jury composé de

Pascale AUSSILLOUS	MCF HDR	Aix-Marseille Université	Rapporteur
Anthony WACHS	Pr	University of British Columbia	Rapporteur
Pierre BREUL	Pr	Université Blaise Pascal	Examinateur
Gaël COMBE	Pr	Université Grenoble Alpes	Examinateur
Serge MORA	Pr	Université de Montpellier	Examinateur
Farhang RADJAI	DR	CNRS - Université de Montpellier	Directeur
Saeid NEZAMABADI	MCF	Université de Montpellier	Co-encadrant



Remerciement

Ce travail a été réalisé pendant ces trois années de thèse au sein du laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC) avec un financement du gouvernement vietnamien.

En premier lieu, je souhaite d'abord remercier tout particulièrement mes deux encadrants de thèse, Farhang Radjaï et Saeid Nezamabadi pour la confiance qu'ils m'ont accordée, pour leur suivi de près durant ce travail. Merci à Farhang qui m'a proposé ce sujet de thèse, m'a donné ses conseils et idées scientifiques qui m'ont aidés à bien comprendre les milieux divisés. Je tiens aussi remercier Saeid pour son accueil et la confiance qu'il m'a accordée dès mon arrivée au laboratoire. Il m'a autant aidé pour le travail que pour la vie au quotidien, pour répondre à toutes mes interrogations... Quelques lignes ne suffisent peut être pour pas lui adresser toute ma reconnaissance. Si ce travail est une réussite, c'est en très grande partie grâce à lui.

Je voudrais adresser mes remerciements sincères à Gaël Combe qui m'a fait l'honneur d'être président du jury. Toute ma gratitude et mes remerciements vont à ceux qui ont accepté de rapporter ce travail de thèse : Pascale Ausillous et Anthony Wachs. Je remercie également Pierre Breul et Serge Mora pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie également des membres du laboratoire pour l'ambiance de travail qu'on a partagé, pour votre soutien et notamment le soutien de l'équipe PMMD (Physique et Mécanique des Milieux Divisés) : Emilien, Mathieu, Lo, Mahmoud, Chaoqun, Lhassan, mais aussi Kajetan, Cécile, Maria, etc. Merci à mes co-bureaux : Patrick, D.Hanh, Paul, Nicolas, Daniel et David.

Mes remerciements vont enfin à mes amis vietnamiens (Association des Etudiants Vietnamiens à Montpellier (AEVM)), qui m'ont aidé à me sentir bien ici, à mon arrivée. Je n'oublie pas la joie et le rire des gens m'ayant permis de surmonter les difficultés, ainsi que les fêtes pendant toute la nuit ... c'était très heureux pour moi.

Merci pour vos accueils chaleureux lors de mon séjour à Montpellier.

Enfin, je dois une grande reconnaissance à mes parents et à mes sœurs qui m'ont toujours écouté, encouragé et soutenu; et à ma femme qui est restée à mon côté pour m'aider de tout temps.

Je dédie à mes parents,

Cảm ơn Ba Mẹ đã sinh con ra trên cuộc đời này,

« Đi khắp thế gian không ai tốt bằng Mẹ,

Gánh nặng cuộc đời không ai khổ bằng Cha »

et ma femme,

« Sự thành công của anh có được ngày hôm nay

là tình yêu của em dành cho anh »

Anh yêu em nhiều

Table des matières

1	Introduction générale	3
2	Milieux granulaires et particules molles	7
2.1	Matériaux granulaires	8
2.1.1	Contact frottant	8
2.1.2	Rhéologie quasi-statique	12
2.1.3	Microstructure granulaire	17
2.1.4	Transmission des contraintes	19
2.2	Matériaux à particules molles (SPM)	21
2.2.1	Exemples des SPM	21
2.2.2	Déformation des particules molles	24
2.2.3	Assemblages denses de particules molles	25
2.3	Conclusions	30
3	Modélisation des particules molles	31
3.1	Particules molles et méthodes numériques	32
3.1.1	Lattice Element Method	32
3.1.2	Approches variationnelles	33
3.1.3	Material Point Method	34
3.2	Modèle de particules liées (BPM)	38
3.2.1	Interactions des particules primaires	38
3.2.2	Paramètres numériques	40
3.3	Algorithme MPM implicite	41
3.3.1	Formulation de la MPM	41
3.3.2	Résolution implicite	44

3.3.3	Traitement des contacts frottants	45
3.4	Compression diamétrale d'une particule	48
3.4.1	Les simulations	48
3.4.2	Relation force-déplacement	49
3.4.3	Origines du comportement élasto-plastique des particules BPM	51
3.5	Conclusions	54
4	Compression uniaxiale d'un assemblage de particules molles	57
4.1	Le système simulé	58
4.2	Relations déformation-contrainte	58
4.3	Evolution de la microstructure	62
4.3.1	Connectivité des particules	62
4.3.2	Evolution des formes des particules	66
4.4	Distribution des efforts de contact	69
4.5	Conclusions	70
5	Compression biaxiale d'un assemblage de particules molles	73
5.1	Compaction isotrope	74
5.1.1	Procédures numériques	74
5.1.2	Relation contrainte-compacité	75
5.2	Compaction biaxiale	78
5.2.1	Procédures numériques	78
5.2.2	Relations déformation-contrainte	80
5.2.3	Analyse de la microstructure	87
5.3	Déchargement biaxial	92
5.4	Conclusions	93
6	Conclusion générale	95
	Bibliographie	98

Introduction générale

Les matériaux composés de particules molles constituent une classe importante mais peu étudiée des milieux particuliers. Outre les matériaux granulaires tels que les poudres métalliques, dont les particules peuvent se déformer plastiquement, on peut inclure un grand nombre de produits cosmétiques et alimentaires, les émulsions et les cellules biologiques dans cette classe. Ces matériaux comportent des particules microscopiques hautement déformables de tailles allant de 10 à 1000 μm . Les grains d'amidon utilisés dans les aliments et les particules d'hydrogel pour la prescription des médicaments sont des exemples connus. Ces particules ont des formes quasi-sphériques et elles présentent des modules élastiques relativement faibles.

La déformation des micro-particules a fait l'objet des études expérimentales et théoriques aux faibles déformations et plus récemment pour les grandes déformations. Dans le cas des émulsions (mayonnaise, lait, sang...), la déformabilité des particules est liée à leur caractère visqueux, à leur tension surfacique et à l'extensibilité de leurs parois. Bien que le comportement des particules individuelles ait fait l'objet d'études expérimentales avec des appareils conçus à cet effet ou dans un écoulement cisailé, le régime dense avec des interactions multiples entre particules reste peu exploré.

A la différence des matériaux composés de particules faiblement déformables (élastique fragile, très dure ou soumis à de faibles pressions de confinement), le comportement mécanique d'un assemblage de particules molles, que nous allons désigner dans la suite de ce mémoire sous le terme générique de *Soft Particle Materials (SPM)*, est régi à la fois par les *réarrangements* de particules, par leur *changement de forme* et en partie par leur compressibilité. Les changements de forme peuvent être purement élastiques (granules d'amidon), plastiques (particules métalliques) ou visqueuses (vésicules) (voir la figure 1.1). Mais dans tous les cas, ils

modifient profondément le comportement collectif des particules. En particulier, la compacité peut dépasser celle d'un assemblage aléatoire compact (*Random Close packing* : RCP) et les particules peuvent se réarranger tout en changeant de forme.

Sur le plan mécanique, contrairement aux milieux granulaires à particules dures, la pression de confinement joue un rôle déterminant pour les SPM dans la mesure où la déformabilité des particules est régie par une *contrainte caractéristique* (module d'élasticité dans le cas des particules élastiques, le seuil plastique dans le cas des particules plastiques et la contrainte visqueuse et tension de surface dans le cas des émulsions). Lorsque la pression de confinement est faible devant cette contrainte, les particules se déforment peu et le comportement reste proche de celui d'un assemblage de particules dures. Dans le cas contraire, le comportement est fortement dépendant de la pression de confinement.

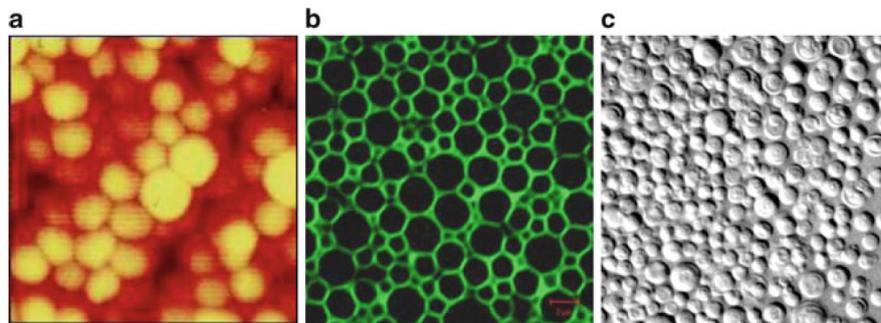


FIGURE 1.1 – Structure des SPM avec des compacités supérieures à la compacité RCP. (a) Microgels ($d \simeq 0,2 \mu\text{m}$); (b) émulsion d'huile dans l'eau $d \simeq 2 \mu\text{m}$; (c) Vésicules multilamellaires ($d \simeq 5 \mu\text{m}$); *Bonnecaze et Cloitre (2010)*.

L'un des obstacles devant l'étude des SPM a été l'absence d'une modélisation discrète propre aux particules molles. La méthode des Eléments Discrets (*Discrete Element Method* : DEM), utilisée pour les particules dures, est fondée sur l'approximation des petites déformations de contact entre particules. Ainsi, les seuls degrés de liberté pris en compte dans cette méthode sont ceux des particules (déplacements et rotations). Pour les particules molles, il est nécessaire de prendre en compte les *degrés de liberté internes* des particules. Le développement des méthodes de simulation des milieux continus pour les grandes déformations depuis une vingtaine d'années permet aujourd'hui de considérer des méthodes couplant la déformation des particules au traitement de leurs contacts. Parmi ces approches, la méthode la plus efficace sur le plan numérique est la méthode des Points Matériels (*Material Point Method* : MPM) qui a déjà été appliquée à l'étude des problèmes de mécanique, y compris des milieux granulaires à particules molles. Néanmoins, cette méthode n'a jamais été vraiment utilisée pour l'étude de la rhéologie des SPM. On peut aussi considérer une approche de Particules liées (*Bonded Particle Method* : BPM) pour représenter chaque particule comme un agrégat de particules primaires rigides. L'avantage de cette méthode est de permettre l'application de la DEM aux particules primaires. Cette approche a été surtout utilisée pour la simulation des particules sécables. Son application aux SPM implique l'introduction des forces d'attraction à distance entre particules

primaires de manière à permettre aux particules de se déformer sans rupture ou dispersion des particules primaires.

L'objectif des travaux menés dans le cadre de cette thèse a été de développer une approche numérique pour la simulation des SPM et de l'appliquer pour l'étude de leurs propriétés de compaction et de cisaillement. Nous allons négliger les forces colloïdales pour nous focaliser uniquement sur les contacts mécaniques. En ce sens, nos particules, bien que fortement déformables, sont des particules solides macroscopiques. Nous avons largement utilisé la MPM pour la compaction des SPM à particules élastiques. Le code développé couple la MPM pour la déformation des particules à la méthode de Dynamique des Contacts (*Contact Dynamics* : CD) pour le traitement des contacts entre particules. Nous avons également développé pour la première fois une approche BPM pour les particules molles composées de particules primaires. Ces dernières interagissent par des forces d'attraction de type Lennard-Jones et par des contacts inélastique non-frottants. Même en l'absence de frottement entre particules, ces particules présentent un comportement élasto-plastique.

Nous avons appliqué ces méthodes pour une étude systématique de la compaction uniaxiale des assemblages de particules dans une boîte en partant d'un gaz de grains et en poursuivant la compression jusqu'à atteindre une compacité proche de 1. Nos études ont permis de caractériser ce processus en différents régimes et de montrer la différence de comportement des assemblages entre les particules élastiques et plastiques. Nous avons également analysé la microstructure en termes du nombre de coordination, de la surface spécifique, de l'anisotropie et des distributions des forces. Nous avons ensuite étudié la rhéologie des assemblages en géométrie de cisaillement simple en utilisant la BPM et en partant d'un état isotrope obtenu pour différentes valeurs de la pression de confinement. Nous avons mis en évidence l'influence de la pression de confinement sur les relations déformation-contrainte, sur la dilatance et sur l'état critique (état stationnaire atteint au terme d'un cisaillement long). Nous avons aussi caractérisé les formes des particules, leur orientations et les surfaces de contact au cours du cisaillement.

Ce mémoire est organisé en 5 chapitres. Le premier chapitre est consacré à une brève introduction aux milieux granulaires et aux concepts et outils pour leur analyses ainsi qu'aux particules molles dans différents domaines. Le deuxième chapitre décrit en détail les approches numériques développées et l'étude de la déformation d'une seule particule. Le troisième chapitre présente nos résultats sur la compaction uniaxiale. Le quatrième chapitre est consacré à la rhéologie quasi-statique des assemblages cisailés. Le mémoire se termine par des conclusions générales sur l'ensemble de ces travaux les perspectives possibles pour leur poursuite.

Milieux granulaires et particules molles

Sommaire

2.1	Matériaux granulaires	8
2.1.1	Contact frottant	8
2.1.2	Rhéologie quasi-statique	12
2.1.3	Microstructure granulaire	17
2.1.4	Transmission des contraintes	19
2.2	Matériaux à particules molles (SPM)	21
2.2.1	Exemples des SPM	21
2.2.2	Déformation des particules molles	24
2.2.3	Assemblages denses de particules molles	25
2.3	Conclusions	30

Les travaux de cette thèse s’inscrivent dans le contexte des recherches actuelles sur les milieux granulaires. Nous allons brièvement rappeler les propriétés génériques de ces milieux et certains concepts et outils d’analyse dont nous aurons besoin dans les chapitres qui suivent. On s’intéresse ensuite aux matériaux à particule molles et certains enjeux scientifiques associés. Nous allons décrire des études expérimentales réalisées pour mieux comprendre les déformations des particules molles dans divers domaines (émulsions, mousses, poudres). Les aspects numériques seront plus amplement discutés dans le chapitre suivant en rapport avec la présentation de nos modèles numériques.

2.1 Matériaux granulaires

Les matériaux granulaires sont des assemblages de particules solides qui interagissent par des forces de surface. Ces forces font dépendre leur comportement mécanique de la pression, de la densité et du temps (Wood (1990); Nedderman (1992); Radjai et al. (2004b); GDR-MiDi (2004)). Les milieux granulaires se présente sous une multitudes de formes avec des particules de formes, tailles et propriétés très variées qui peuvent évoluer sous l'effet des actions mécaniques (déformation ou fragmentation) ou chimiques (Herrmann et al. (2003); Donev et al. (2004); Antony et Kuhn (2004); Voivret et al. (2007); Azéma et al. (2009b); Azéma et Radjai (2010); CEGEO et al. (2012)). Les systèmes granulaires sont également caractérisés par une microstructure désordonnée et une transmission très hétérogènes des contraintes (Radjai et al. (1996, 1998); Krut (2003); Majmudar et Behringer (2005); Agnolin et Roux (2007b); Richefeu et al. (2009)). Nous allons brièvement discutés ces aspects dans la suite de cette section.

2.1.1 Contact frottant

Les interactions de contact entre particules dans un milieu granulaire dépendent de la nature des matériaux et de leurs états de surface. Mais d'une manière générale, ces interactions peuvent être décrites en termes de forces élastiques, frictionnelles et cohésives, ainsi que par la dissipation d'énergie due au comportement plastique ou visqueux au contact.

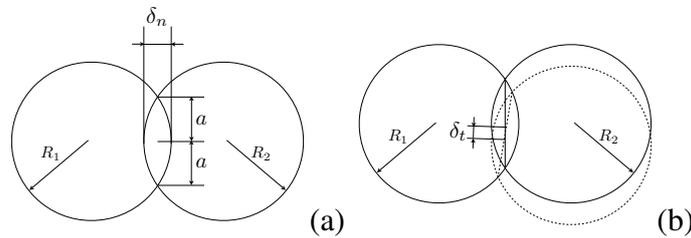


FIGURE 2.1 – Géométrie de contact entre deux particules. Déflexions normale (a) et tangentielle (b).

Le cas le plus classique de contact élastique est celui de Hertz (Johnson (1985); Makse et al. (1999); Agnolin et Roux (2007c)) pour deux sphères lisses de même matériau. La déflexion élastique δ_n au contact (figure 2.1(a)) est reliée à la force normale f_n par une loi non-linéaire :

$$f_n = \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{E}{1 - \nu_p^2} R^{1/2} \delta_n^{3/2}, \quad (2.1)$$

où $R^{-1} = R_1^{-1} + R_2^{-1}$ est le rayon réduit des deux sphères de rayons R_1 et R_2 , et E et ν sont respectivement le module de Young et le coefficient de Poisson. Le caractère non-linéaire de la loi de Hertz est une conséquence de la courbure de l'interface. La relation 2.1 peut être également mise sous la forme $f_n = k_n \delta_n$, où k_n est la raideur de contact qui dépend elle-même

de la déflexion et, d'une manière équivalente, de la force normale : $k_n = \frac{E}{1-\nu^2} \frac{\sqrt{d}}{3} \delta_n^{1/2}$. Loi de Herz obtenue par un calcul analytique suppose que la déformation au contact est petite (< 0.05).

La force de frottement constitue un ingrédient essentiel de contact mécanique entre particules dans les milieux granulaires. Sous sa forme la plus classique et la plus simple, elle est régie par la loi de frottement sec de Coulomb. Cette loi stipule que la force de frottement s'oppose au déplacement relatif entre deux corps au contact et que celle-ci est proportionnelle à la force normale et indépendante de la surface de contact :

$$f_t = -\mu_s f_n \operatorname{sgn}(\mathbf{v}_t), \quad (2.2)$$

où \mathbf{v}_t est la vitesse de glissement et μ_s est le coefficient de frottement solide. Les processus physiques à l'origine du frottement et de la valeur de μ_s sont complexes et relèvent de la tribologie. Mais d'une manière générale, on peut considérer que la loi de Coulomb est une conséquence de la déformation plastique des aspérités dans la zone de contact (Bowden et Tabor (1950)). La valeur du coefficient de frottement est donc liée à la fois au seuil plastique et à la distribution de ces aspérités. Cette origine microscopique du frottement explique aussi pourquoi celui-ci est une grandeur souvent très variable et fluctuante.

La force de frottement au glissement donnée par l'équation (2.2) correspond à la force seuil atteinte pendant le glissement. La loi de Coulomb n'informe en rien sur la valeur de cette force sans déplacement relatif au contact. Dans ce cas, la force de frottement se trouve être juste mobilisée pour équilibrer les autres forces agissant sur les deux corps. En d'autres termes, la force de frottement au repos est une simple force de réaction. Mais, cette *mobilisation* du frottement implique une déflexion élastique tangentielle δ_t entre les deux corps dans la zone de contact ; voir figure 2.1(b). Sous sa forme simple, cette dépendance est décrite par une loi élastique linéaire :

$$f_t = k_t \delta_t, \quad (2.3)$$

où

$$k_t \simeq \alpha k_n \quad \text{avec} \quad \alpha = 2 \frac{1-\nu}{2-\nu}, \quad (2.4)$$

où le glissement se déclenche lorsque cette force atteint sa valeur limite μf_n en valeur absolue (Agnolin et Roux (2007c)).

Très souvent les contacts secs présentent un caractère non-cohésif et ne peuvent donc pas résister à un effort de traction. Des forces d'adhésion peuvent apparaître, soit sous forme de forces de surface pour les particules de très petites tailles, soit par la présence d'un liant solide (ponts solides) ou liquide (ponts liquides). Les forces de surface dépendent de la taille des particules. En dessous de $100 \mu\text{m}$, les interactions dominantes sont d'origine physico-chimiques (forces de van der Waals, forces électrostatiques ...). La cohésion des poudres fines et des suspensions colloïdales résulte de ce type de forces. Dans la gamme millimétrique, les forces d'adhésion peuvent provenir de l'énergie de surface γ_s .

Il existe deux modèles principaux de contact élastique avec adhésion. Le modèle JKR (Johnson, Kendall et Roberts) (Johnson et al. (1971)) est une correction du contact élastique

de Hertz. En considérant le contact entre deux sphères lisses et en adoptant les hypothèses de la théorie de Hertz, le modèle JKR donne l'expression suivante pour le rayon de la zone de contact :

$$a^3 = \frac{R}{k_n} \left[f_n + 3\gamma_s \pi R + \sqrt{6\gamma_s \pi R f_n + (3\gamma_s \pi R)^2} \right]. \quad (2.5)$$

Dans cette expression, les deux derniers termes du membre de droite intègrent la correction par rapport à la théorie de Hertz. Comme $a^2 = 2\delta R$, cette relation correspond en fait à une relation implicite entre la force et le déplacement.

La séparation des deux sphères a lieu pour un effort de traction maximale donné par :

$$f_c^{JKR} = \frac{3}{2} \pi \gamma_s R. \quad (2.6)$$

On remarque que la force de séparation ou d'adhésion ne dépend pas du module élastique. Un modèle alternatif pour le contact adhésif est le modèle DMT (Derjaguin, Müller et Toporov) (Derjaguin et al. (1975)). L'essence de ce modèle est de négliger la déformation au contact qui est indirectement prise en compte en calculant la force d'attraction par l'intégration des forces intermoléculaires. La force d'attraction est alors simplement donnée par

$$f_c^{DMT} = 2\pi \gamma_s R. \quad (2.7)$$

Ce modèle constitue une bonne approximation dans la limite des faibles adhésions et petites particules tandis que l'approximation JKR est plus correcte pour les grandes énergies d'adhésion et des particules de plus grande taille mais de faible module d'élasticité.

En présence des forces d'adhésion, la force de frottement de Coulomb croît en raison de l'augmentation de la surface de contact. L'approximation la plus simple consiste à ajouter la force d'adhésion maximale f_c à la force normale f_n (Preechawuttipong (2001); Radjai et Dubois (2011)) :

$$f_t = \mu_s (f_n + f_c) \operatorname{sgn}(\mathbf{v}_t). \quad (2.8)$$

La valeur maximale de f_n en traction étant $-f_c$, la somme $f_n + f_c$ est toujours définie positive de telle sorte que le signe de f_t est toujours donné par celui de la vitesse relative \mathbf{v}_t . Il est clair que cette écriture constitue une simple extrapolation linéaire de la loi de Coulomb et que la force de frottement est en fait contrôlée par l'aire réelle de contact à tout instant.

Le caractère dissipatif des milieux granulaires résulte du frottement ou de la rupture des contacts cohésifs (lorsqu'il y a cohésion) mais aussi des collisions inélastiques entre particules. La dissipation se traduit par le fait que l'énergie élastique emmagasinée dans les particules (zones de contact) lors des collisions n'est pas complètement restituée après la séparation (Walton (1993); Hart et al. (1988); Luding (2008)). On définit ainsi un coefficient de restitution normale e_n par le rapport des vitesses relatives après et avant une collision :

$$e_n = -\frac{v_n^+}{v_n^-}, \quad (2.9)$$

où v_n^- est la vitesse avant et v_n^+ est la vitesse après la collision. Le signe négatif indique que la direction de la vitesse change, de telle sorte que e_n est toujours positif avec une valeur qui varie entre 0, pour une collision parfaitement inélastique, et 1 pour une collision élastique. Lorsque $e_n = 0$, les deux particules restent en contact après la collision. Le coefficient de restitution normale peut être lié au comportement visqueux, plastique ou bien à la cohésion. La viscosité du matériau peut être prise en compte par un amortissement visqueux au niveau du contact :

$$f_n = k_n \delta_n - \gamma_n \dot{\delta}_n, \quad (2.10)$$

où γ_n est la viscosité effective au contact. Avec la loi de Hertz, qui implique une dépendance de k_n par rapport à la force normale f_n , on peut montrer que le coefficient de restitution normale dépend de la vitesse de collision (Hertzsch et al. (1995); Brilliantov et al. (2007)). Enfin, l'adhésion au contact entraîne un coefficient de restitution < 1 en raison de la perte de contact.

Même si le frottement pendant un glissement entre deux particules dissipe de l'énergie, les trois facteurs énumérés plus haut pour la force normale peuvent conduire également à une dissipation d'énergie par les forces tangentielles dans un contact non-glissants. Pour cela, on définit un coefficient de restitution tangentielle :

$$e_t = \frac{v_t^+}{v_t^-}. \quad (2.11)$$

A la différence de e_n , e_t peut prendre à la fois des valeurs positives et négatives dans l'intervalle $[-1, +1]$. La valeur 1 correspond à une collision dans laquelle la composante tangentielle de la vitesse relative ne change pas pendant la collision. La valeur $e_t = -1$ correspond à un rebondissement tangentiel.

Une autre source de dissipation possible est la résistance au roulement ou au pivotement entre deux particules (Taboada et al. (2006); Estrada et al. (2008, 2011)). En règle générale, les moments associés sont nettement plus faibles que les forces de frottement lors du glissement. Mais cette dissipation existe et peut jouer un rôle sachant que lors d'un cisaillement lent d'un matériau granulaire, la grande majorité des contacts sont en roulement. Le couple qui résiste au déplacement par roulement d'un cylindre sur un plan est proportionnel à la force normale au contact de telle sorte qu'il est possible de définir un coefficient de frottement de roulement μ_r :

$$M = \mu_r R f_n. \quad (2.12)$$

Avec cette définition, μ_r est une grandeur sans dimension, tout comme le coefficient de frottement de glissement μ_s . Si l'on place un disque sur un plan, celui-ci peut être incliné jusqu'à un angle θ tel que $\tan \theta = \mu_r$ sans que le cylindre ne tourne. La résistance au pivotement est spécifique au cas 3D (Johnson (1999)). Il s'agit d'une résistance à une rotation relative entre particules autour du vecteur normal. La résistance au pivotement s'exprime par un couple de rotation C qui peut être proportionnel à la force normale au contact de telle sorte que, de la même manière qu'il est possible pour le frottement de roulement, de définir un frottement de pivotement μ_p :

$$C = \mu_p R f_n. \quad (2.13)$$

2.1.2 Rhéologie quasi-statique

Le comportement mécanique des matériaux granulaires a fait l'objet des études expérimentales plus particulièrement en mécanique des sols et en technologie des poudres. En mécanique des sols, on s'intéresse plus particulièrement aux petites déformations que peut subir un sol sous l'effet de son propre poids ou par les contraintes exercées par un ouvrage. On distingue les sols grossiers, qui se caractérisent souvent par des particules non-cohésives et des sols fins qui contiennent des particules fines avec des interactions colloïdales (Mitchell et Soga (2005)). En technologie des poudres, les matériaux granulaires interviennent dans divers procédés qui mettent en jeu des grandes déformations du matériau ou de l'écoulement des particules.

Dans la limite des faibles taux de cisaillement, le matériau granulaire présente une compacité Φ (le rapport du volume occupé par les particules sur le volume total) élevée et un caractère "solide" décrit par un comportement élasto-plastique. Pour des taux de cisaillement élevés, un matériau granulaire présente une compacité faible et un caractère "fluide" avec des propriétés non-newtoniennes (Jaeger et al. (1996)). Pendant longtemps, les liens entre ces deux groupes de propriétés (solide et fluide) sont restés obscurs. Par ailleurs, les études réalisées dans différentes géométries d'écoulement (silos, cisaillement simple, plan incliné ...) étaient souvent difficiles à comparer.

Des études expérimentales et numériques récentes ont permis de montrer que ces comportements peuvent être classifiés en termes de deux paramètres sans dimension (GDR-MiDi (2004); da Cruz et al. (2005); Agnolin et Roux (2007a); Andreotti et al. (2011)). Le premier paramètre est le rapport entre le module élastique E des particules et la pression de confinement p_c :

$$\kappa = \frac{E}{p_c} . \quad (2.14)$$

Ce paramètre caractérise la rigidité relative du système granulaire. Ainsi, un système granulaire composé des particules de faible module de Young se comporte comme un matériau dur lorsqu'il est soumis à une faible pression de confinement (Roux (1997); Agnolin et Roux (2008)).

Le deuxième paramètre sans dimension est défini à partir du rapport des forces inertielles induites par le cisaillement et des forces statiques dues à la pression de confinement (GDR-MiDi (2004); da Cruz et al. (2005)). Pour un taux de cisaillement $\dot{\epsilon}$, l'ordre de grandeur de la quantité de mouvement échangée entre particules est $m \dot{\epsilon} d$, où m et d sont respectivement la masse et le diamètre moyen. Les échanges de quantité de mouvement ont lieu sur un temps typique de $\sim 1/\dot{\epsilon}$. La force impulsionnelle moyenne, définie comme la quantité de mouvement échangée par unité de temps, est donnée par :

$$F_d = m d \dot{\epsilon}^2 . \quad (2.15)$$

Ainsi, on définit un nombre *inertiel* à partir du rapport de F_d et de la force statique $F_s = p_c d^{D-1}$:

$$I_s = \sqrt{\frac{F_d}{F_s}} = \dot{\epsilon} \sqrt{\frac{m}{p_c d^{D-2}}} . \quad (2.16)$$

On peut également raisonner en termes de temps caractéristiques. Le premier temps est le temps de cisaillement $t^{cis} = \dot{\epsilon}^{-1}$. C'est le temps caractéristique imposé globalement au système et qu'on peut qualifier de temps de déséquilibre puisque le cisaillement perturbe en permanence l'assemblage des particules. L'autre temps est précisément le temps de retour à l'équilibre que l'on peut assimiler à un déplacement accéléré sur une faible distance de l'ordre d'un interstice entre particules sous l'effet de la pression de confinement imposée. L'ordre de grandeur de la force moyenne subie par une particule étant $p_c d^{D-1}$, on peut évaluer ce temps t^{is} de retour à l'équilibre en considérant le temps de déplacement d'une particule sur une distance égale à sa propre taille d (qui est nettement plus grande qu'un gap entre les particules voisins, mais d a l'avantage de correspondre à une longueur interne bien définie) en intégrant l'équation de la dynamique :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = p_c d^{D-1}, \quad (2.17)$$

ce qui donne

$$t^{is} \simeq \sqrt{\frac{m}{p_c d}} \simeq d \sqrt{\frac{\rho_s}{p_c}}, \quad (2.18)$$

où ρ_s est la densité de la particule et où nous avons utilisé la relation $m \simeq \rho_s d^D$. Le nombre I_s n'est alors rien d'autre que le rapport donné par :

$$I_s = \frac{t^{is}}{t^{cis}} = \dot{\epsilon} d \sqrt{\frac{\rho_s}{p_c}}. \quad (2.19)$$

Une déformation quasi-statique correspond aux faibles valeurs de I_s . Les effets inertiels augmentent avec I_s et dominent le comportement aux grandes valeurs de I_s . Pour étudier le comportement quasi-statique, on soumet un échantillon granulaire soit à une compaction lente pour l'étude de la compressibilité du matériau, soit à un cisaillement lent pour l'étude de la résistance au cisaillement. Dans ce dernier cas, l'échantillon est confiné par une contrainte extérieure (Hicher (2000)). Cette rhéométrie propre à l'étude des matériaux granulaires s'appuie sur un confinement en contrainte permettant à l'échantillon de changer de volume alors que, pour les fluides complexes, les tests mécaniques sont souvent réalisés à volume constant. En mécanique des sols, on s'intéresse également aux tests à volume constant pour modéliser les déformations dites "non-drainés" des sols.

Les appareils d'essai modernes permettent de contrôler les différentes composantes de déformation ou de contrainte dans différentes directions de l'espace. Mais une géométrie communément utilisée en mécanique des sols est la compression triaxiale pour laquelle les directions principales de déformation et de contrainte sont imposées. Une autre géométrie classique pour l'étude des écoulements granulaires est la géométrie annulaire où le matériau est cisailé entre deux cylindres. Indépendamment de la géométrie, la réponse mécanique est analysée en termes des invariants des tenseurs de déformation $\varepsilon_{\alpha\beta}$ et de contrainte $\sigma_{\alpha\beta}$. Pour fixer les idées, considérons le cisaillement d'un matériau granulaire dans la direction x par l'application d'un taux $\dot{\epsilon}_{zx}$ avec une contrainte de confinement σ_{zz} appliquée dans la direction z . Pour simplifier l'analyse, les déformations d'allongement suivant les directions x et y sont nulles : $\dot{\epsilon}_{yy} = \dot{\epsilon}_{xx} = 0$

(cisaillement plan). Dans ces conditions, le système peut être analysé dans le plan xz . Sous l'effet du cisaillement $\dot{\varepsilon}_{zx}$, la contrainte σ_{zx} et le volume V de l'échantillon évoluent avec la déformation de cisaillement cumulée $\varepsilon_{zx} = \int_0^t \dot{\varepsilon}_{zx} dt$; voir figure 2.2.

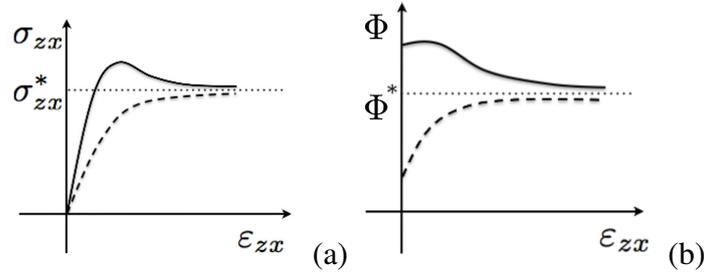


FIGURE 2.2 – Comportement d'un milieu granulaire dense (ligne continue) et lâche (traits). (a) Variation de la contrainte de cisaillement σ_{zx} et (b) de la compacité Φ en fonction de la déformation de cisaillement cumulée ε_{zx} .

Pour une rigidité relative κ élevée, une faible partie de la déformation est élastique. Les modules d'élasticité peuvent être mesurés à partir du début de la courbe de variation de V et de σ_{zx} en fonction de ε_{zx} . Comme nous l'avons discuté plus haut, d'après la loi de Hertz, la raideur k_n au contact dépend de la force normale. A l'échelle macroscopique, cet effet se traduit par un module élastique effective E qui, pour un système assez dense, doit augmenter avec la pression moyenne comme $p_c^{1/3}$. Pour la plupart des matériaux, le domaine élastique correspond à de très faibles déformations. Lors d'une déformation élastique, aucun glissement n'a lieu dans le matériau, mais des nouveaux contacts peuvent se former et des contacts existants peuvent disparaître. Cette évolution du réseau des contacts avec la pression de confinement conduit cependant à une évolution des modules d'élasticité qui diffèrent de la loi en $p_c^{1/3}$ (Agnolin et Roux (2007c)). C'est en particulier le cas aux faibles valeurs de la compacité.

Au-delà des déformations élastiques, la déformation devient irréversible et s'accompagne des réarrangements importants des particules. Les glissements de celles-ci les unes par rapport aux autres se traduisent par une dissipation d'énergie par frottement. Les simulations par la méthode en éléments discrets (DEM) montrent que le frottement n'est mobilisé qu'au niveau d'une faible fraction des contacts (inférieure à 10%) qui portent des forces normales très faibles (Radjai et al. (1998)). Durant cette déformation plastique, la microstructure (l'organisation des particules dans l'espace) évolue et devient de plus en plus anisotrope. Par conséquent, la résistance au cisaillement augmente. Si le matériau est initialement lâche, avec une compacité Φ_0 inférieure à une compacité critique Φ^* , σ_{zx} tend asymptotiquement vers une valeur constante σ_{zx}^* . Si le matériau est dense avec $\Phi_0 > \Phi^*$, alors σ_{zx} passe par un pic avant de diminuer vers la même valeur stationnaire σ_{zx}^* que dans le cas lâche. Par ailleurs, dans le cas dense, la compacité Φ diminue et tend asymptotiquement vers Φ^* tandis que dans le cas lâche, elle augmente pour tendre asymptotiquement également vers Φ^* .

Les valeurs stationnaires σ_{zx}^* et Φ^* dépendent de la contrainte de confinement σ_{zz} et donc ne constituent pas des propriétés intrinsèques d'un milieu granulaire sauf si les particules sont

parfaitement rigides. Les expériences montrent que cette dépendance peut être exprimée sous la forme suivante (Wood (1990)) :

$$\sigma_{zx}^* = \sigma_{zz} \tan \varphi^* \quad (2.20)$$

$$\Phi^* = \Phi^*(\sigma_{zz}^r) + C \ln(\sigma_{zz}/\sigma_{zz}^r) \quad (2.21)$$

où σ_{zz}^r est une contrainte de référence, C représente la compressibilité du matériau et φ^* est l'angle de *frottement interne* du matériau. Une propriété essentielle des milieux granulaires à particules dures est le fait que φ^* est à la fois indépendant de la compacité initiale Φ_0 et de la contrainte de confinement σ_{zz} , et constitue à ce titre une propriété du matériau.

Suivant l'école de mécanique des sols de Cambridge, l'état quasi-statique stationnaire avec son angle de frottement interne φ est appelé *état critique* (Roscoe et al. (1958); Roscoe (1970); Wood (1990)). Cet état est indépendant de l'état initial et il est atteint lorsque le matériau est cisailé suffisamment longtemps pour lui faire perdre la mémoire de l'état initial. Notons que la relation linéaire (2.20) entre la contrainte de cisaillement et la contrainte de confinement signifie simplement que l'échelle des contraintes internes est imposée par la contrainte de confinement appliquée. Ceci reflète le fait que la loi de frottement ne comporte aucune échelle de contrainte particulière, ce qui est en contradiction avec la présence d'une contrainte de référence dans l'équation (2.21). En effet, la théorie des états critiques a été initialement développée pour les argiles où le matériau comporte une contrainte caractéristique interne liée aux interactions colloïdales entre les plaquettes d'argile. Pour beaucoup de matériaux granulaires à particules peu déformables, l'influence de l'élasticité des particules sur la compacité est négligeable devant celle des réarrangements de telle sorte que la dépendance logarithmique de Φ^* par rapport à la contrainte de confinement peut être négligée et, en pratique, l'état critique peut être également caractérisé par sa compacité Φ^* . Les expériences et simulations numériques donnent $\Phi^* \simeq 0.58$ pour un assemblage des particules sphériques de même taille (GDR-MiDi (2004); Azéma et al. (2009a)). Cette valeur est bien inférieure à celle d'un assemblage RCP avec $\Phi \simeq 0.64$.

Comme les argiles, les matériaux granulaires peuvent aussi présenter une contrainte interne. Par exemple, si les contraintes appliquées sont élevées, les particules peuvent se fracturer. Dans ces conditions, la contrainte de référence est le seuil de rupture des particules en compression ou en cisaillement et donc la compacité critique peut dépendre de la pression de confinement.

Par rapport à l'état critique, on distingue deux transitoires : 1) le durcissement (hardening) qui correspond à la montée de σ_{zx} avec la déformation, 2) l'adoucissement (softening) qui correspond à la réduction de σ_{zx} après un pic de contrainte. En normalisant les contraintes par la contrainte de confinement, on peut décrire ces transitoires par l'évolution de $\tan \varphi = \sigma_{zx}/\sigma_{zz}$. L'angle φ caractérise l'angle de frottement interne pour un état donné du matériau. Pour un matériau préparé par compression isotrope, elle a une valeur initialement nulle. Sa valeur au pic φ^+ (pour $\Phi_0 > \Phi^*$) augmente avec Φ_0 . Comme Φ_0 ne peut pas dépasser la valeur RCP de la compacité, l'angle φ^+ pour $\Phi_0 = \Phi^{RCP}$ peut être considéré comme une grandeur matérielle (caractérisant le matériau).

La relation (2.20) écrite dans la configuration de cisaillement est une loi de frottement pour

les contraintes exercées sur le plan xy (perpendiculaire à l'axe z). Par rapport à ce plan, σ_{zz} est la contrainte normale et σ_{zx} est la contrainte tangente suivant la direction x de l'écoulement. Etant donné que l'état critique est un état sans mémoire dont les propriétés reflètent les caractéristiques des particules, la même relation doit se vérifier sur tous les plans orientés dans différentes directions d'espace \mathbf{n} :

$$\sigma_t^*(\mathbf{n}) = \tan \varphi^* \sigma_n(\mathbf{n}), \quad (2.22)$$

où σ_t^* et σ_n sont respectivement la contrainte tangente et la contrainte normale sur le plan \mathbf{n} dans l'état critique. Cette relation exprime le *critère de Coulomb*. Elle peut être reformulée en termes des invariants du tenseur de contrainte dans le plan xz . Nous considérons différentes orientations $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta)$ dans ce plan. Nous avons (Radjai et al. (2004a)) :

$$\sigma_n(\theta) = p + q \cos 2(\theta - \theta_\sigma) \quad (2.23)$$

$$\sigma_t(\theta) = q \sin 2(\theta - \theta_\sigma) \quad (2.24)$$

où $p = (\sigma_1 + \sigma_3)/2$ est la pression moyenne dans le plan xz et $q = (\sigma_1 - \sigma_3)/2$ est le déviateur. σ_1 et σ_3 sont les valeurs propres du tenseur de contrainte dans le plan xz et θ_σ est sa direction principale majeure. En utilisant le cercle de Mohr, il est facile à montrer que $\sin \varphi^* = q/p$ et $\theta_\sigma = \pi/2 - \varphi/2$ dans la configuration de cisaillement simple où le plan de cisaillement (en fait, sa normale) est orienté à $\theta = \pi/2$. En d'autres termes, contrairement aux fluides et solides habituels, la contrainte principale majeure n'est pas orientée à 45 degrés par rapport à la verticale.

De la même manière que la contrainte de cisaillement est proportionnelle à la contrainte de confinement, la déformation d'allongement $\dot{\varepsilon}_{zz}$ suivant z dans l'état quasi-statique est induite par la déformation de cisaillement $\dot{\varepsilon}_{zx}$ et donc la grandeur pertinente est leur rapport :

$$\tan \psi = -\frac{\dot{\varepsilon}_{zz}}{\dot{\varepsilon}_{zx}}, \quad (2.25)$$

où ψ est l'angle de *dilatance de Reynolds*. Rappelons que dans les milieux granulaires, il est commun de compter positivement les contraintes compressives et les contractions. Une expansion suivant z est donc négative et le signe négative dans la définition ψ permet de caractériser une dilatation par un angle positif. Un angle négatif correspond à une contraction ou "dilatance négative". L'angle de dilatance peut être exprimé d'une manière générale en termes des invariants du tenseur des taux de déformation, ce qui permet de le généraliser à d'autres géométries. En 2D ou pour les déformations planes, on obtient (Radjai et al. (2004a)) :

$$\sin \psi = -\frac{\dot{\varepsilon}_p}{\dot{\varepsilon}_q}, \quad (2.26)$$

où $\dot{\varepsilon}_p$ est le taux de déformation volumétrique et $\dot{\varepsilon}_q$ est le taux de cisaillement. L'angle ψ a une valeur positive dans un matériau granulaire initialement dense et tend avec le cisaillement asymptotiquement vers zéro dans l'état critique. Il a une valeur négative dans un matériau lâche, mais tend également vers zéro dans l'état critique.

De la même manière que l'angle de frottement interne caractérise la surface de charge dans un milieu granulaire, l'angle de dilatance caractérise la règle d'écoulement, c'est-à-dire, la direction de la déformation plastique. Le comportement plastique des matériaux granulaires serait *associé* si ces deux angles étaient égaux : $\varphi = q/p = \psi = -\dot{\epsilon}_p/\dot{\epsilon}_q$. Or, si cette égalité était vérifiée à tout instant de l'évolution d'un matériau granulaire, alors la puissance dissipée par les déformations $p\dot{\epsilon}_p + q\dot{\epsilon}_q$ serait nulle ! En supposant que la puissance est positive (énergie dissipée), on obtient $\varphi > \psi$, ce qui est généralement observé et reflète ainsi le caractère non-associé de la plasticité des sols.

2.1.3 Microstructure granulaire

La rhéologie des matériaux granulaires reflète les contacts frottants, le désordre géométrique et le comportement collectif des particules. Le lien entre ces deux niveaux de description n'est pas trivial et reste l'un des objectifs de la recherche actuelle sur les milieux granulaires. Pour le comportement plastique, tel qu'il est décrit par le critère de Mohr-Coulomb et la dilatance, les paramètres décrivant la microstructure granulaire peuvent être considérés comme des paramètres internes qui déterminent l'angle de frottement interne (en tant que surface de charge) et l'angle de dilatance (en tant que règle d'écoulement) (Roux (1997); Radjai et al. (2004b)).

La texture granulaire est généralement décrite par des paramètres liés à la distribution de trois vecteurs :

- vecteur normal au contact \mathbf{n} défini comme vecteur unitaire normal au plan de contact,
- vecteur branche $\mathbf{n}l$ reliant les centres des particules en contact, avec \mathbf{n}' vecteur unitaire d'orientation du vecteur branche reliant les centres des particules,
- le vecteur de contact \mathbf{c} reliant les centres des particules aux points de contact.

A l'ordre le plus bas, la texture est décrite par des grandeurs scalaires relatives à la *connectivité* des particules par le réseau des contacts *actifs* entre particules. Les contacts actifs sont les contacts où la force est non nulle. Les contacts *inactifs* et les particules *flottantes* (sans contacts actifs) ne contribuent pas à la transmission des contraintes. Comme les contacts sont ponctuels, la connectivité moyenne est caractérisée par le nombre de coordination Z . La connectivité peut être caractérisée d'une manière plus fine en considérant les proportions $P_c(c)$ des particules possédant exactement c voisins de contact. Le nombre de coordination est donné par $Z = \sum_c c P_c(c)$. La figure 2.3 montre le réseau des contacts actifs dans un assemblage granulaire à l'équilibre.

Les variables de connectivité sont de simples scalaires et ne nous renseignent pas sur l'anisotropie du milieu qui est "encodée" dans les distributions des orientations des trois vecteurs \mathbf{n} , $\mathbf{n}l$ et \mathbf{c} . Généralement, la résistance au cisaillement des milieux granulaires est attribuée au développement de la texture anisotrope sous l'effet d'une sollicitation en cisaillement (Rothenburg et Bathurst (1989); Radjai et Roux (2004a); Radjaï et Azéma (2009); Azéma et al. (2009a)). Considérons l'anisotropie liée au vecteur normal unitaire au contact. Il est possible de définir un *tenseur de texture* pour décrire la distribution des orientations de ce vecteur à l'ordre

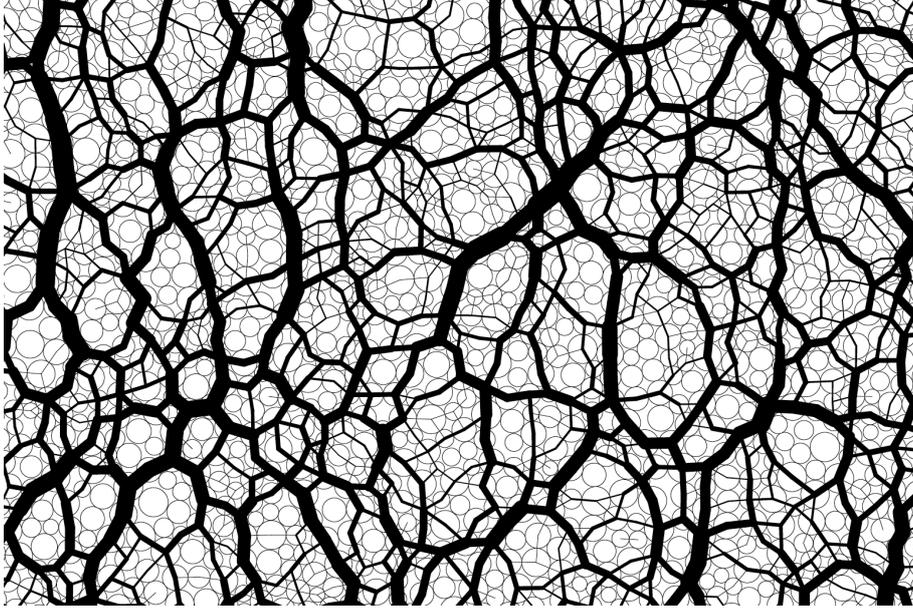


FIGURE 2.3 – Réseau des forces dans un assemblage de particules rigides. L'épaisseur des traits entre particules est proportionnelle à la grandeur de la force.

le plus bas (Satake (1982); Kanatani (1984); Radjai et al. (1998)) :

$$F_{\alpha\beta}^c = \frac{1}{N_c} \sum_{c \in V} n_\alpha^c n_\beta^c, \quad (2.27)$$

où N_c est le nombre des contacts dans le volume de contrôle V , et α et β indiquent les composantes des vecteurs (1 à 2 en 2D et de 1 à 3 en 3D). L'anisotropie est donnée par les différences des valeurs propres F_1^c , F_2^c et F_3^c . En 2D, on définit l'anisotropie a_c par

$$a_c = 2(F_1^c - F_2^c). \quad (2.28)$$

D'une manière équivalente, on peut considérer la probabilité $P_c(\mathbf{n}) d\theta$ d'avoir un contact dont le vecteur \mathbf{n} est dans un secteur angulaire compris entre $\theta - d\theta/2$ et $\theta + d\theta/2$. Comme les vecteurs \mathbf{n} n'ont pas d'orientation intrinsèque, la fonction $P_c(\mathbf{n})$ est périodique de période π . Un développement de Fourier tronqué en fonction de \mathbf{n} donne (Rothenburg et Bathurst (1989)) :

$$P_c(\theta) = \frac{1}{2\pi} \{1 + a_c \cos [2(\theta - \theta_c)]\}, \quad (2.29)$$

où θ_c est la direction privilégiée des contacts et a_c est définie par la relation (2.28).

De la même manière qu'on peut définir le tenseur de texture F^c avec son anisotropie a_c , on peut également définir des tenseurs décrivant les anisotropies des orientations des vecteurs branches et des forces normales et tangentiels en pondérant les produits tensoriels $n_\alpha n_\beta$ dans l'équation (2.27) par la longueur du vecteur branche ou la grandeur de la force normale ou tangentielle (Rothenburg et Bathurst (1989); Radjai et al. (1998)).

Ces relations sont établies à partir de l'expression micromécanique du tenseur des contraintes et en négligeant les corrélations entre les vecteurs branches et les forces de contact ainsi que les produits croisés des anisotropies. Si dans un milieu continu, il n'y a pas d'ambiguïté dans la définition du tenseur de contrainte, il n'est pas de même dans les milieux granulaires où le désordre et la distribution hétérogène des forces impliquent une moyenne sur un ensemble de contacts. Pour un volume de contrôle bien supérieur à l'échelle de la particule, on peut ainsi définir une densité surfacique (en 3D et linéique en 2D) de forces exercées par les particules extérieur au volume de contrôle. Par contre, lorsque ce volume tend vers la taille d'une particule, cette densité perd son sens. A cette échelle, il semble plus pertinent de travailler avec les moments tensoriels internes introduits par (Moreau (1997)). Ce moment pour une particule i est donné par :

$$M_{\alpha\beta}^i = \sum_{c \in i} f_{\alpha}^c r_{\beta}^c, \quad (2.30)$$

où f_{α}^c est la composante α de la force exercée sur la particule i au contact c et r_{β}^c est la composante β du vecteur position du point de contact. Ce moment a la particularité d'être additif en vertu du principe d'égalité des actions et des réactions entre deux particules à leur point de contact. Il est aussi indépendant de la position d'origine du vecteur position r^i . Pour un volume de contrôle V , on peut calculer la densité volumique du moment tensoriel :

$$\langle M_{\alpha\beta}^i \rangle_V = \frac{1}{V} \sum_{i \in V} M_{\alpha\beta}^i. \quad (2.31)$$

On peut montrer que cette expression tend vers le tenseur de Cauchy lorsque le volume augmente (c'est-à-dire, lorsque le nombre de particules dans le volume de contrôle augmente).

2.1.4 Transmission des contraintes

La distribution très large et hétérogène des forces de contact est une propriété remarquable des milieux granulaires. Les expériences et simulations numériques par la DEM montrent que les forces sont bien mises à l'échelles par la force moyenne et leur densité de probabilité est bien approximée par une loi exponentielle décroissante pour les forces supérieures à la force moyenne et par une distribution uniforme avec un pic de faible amplitude ou une loi de puissance pour les forces plus faibles (Radjai et al. (1996); Mueth et al. (1998)). La figure 2.4 montre un exemple de densité de probabilité des forces obtenue par simulations en utilisant la méthode de dynamique des contacts (CD) (Radjai (2015)) et à partir des expériences (Mueth et al. (1998)). On observe un très bon accord entre les données numérique et expérimentale.

Un aspect intrigant de la distribution est le fait que le nombre des forces ne tend pas vers zéro lorsque la force tend vers zéro. En d'autres termes, alors que les forces supérieures à la force moyenne correspondent aux chaînes de forces observées sur les clichés photo-élastiques et qui représentent les forces majeures qui équilibrent les contraintes déviatoriques appliquées sur le système, les forces inférieures à la force moyenne constituent une population particulière des forces qui reflètent l'équilibre interne des particules. Cette *dualité* des forces a été

rigoureusement mise en évidence par l'analyse de l'anisotropie du réseau des contacts pour différentes classes de forces (Radjai et al. (1998); Radjai (1999)).

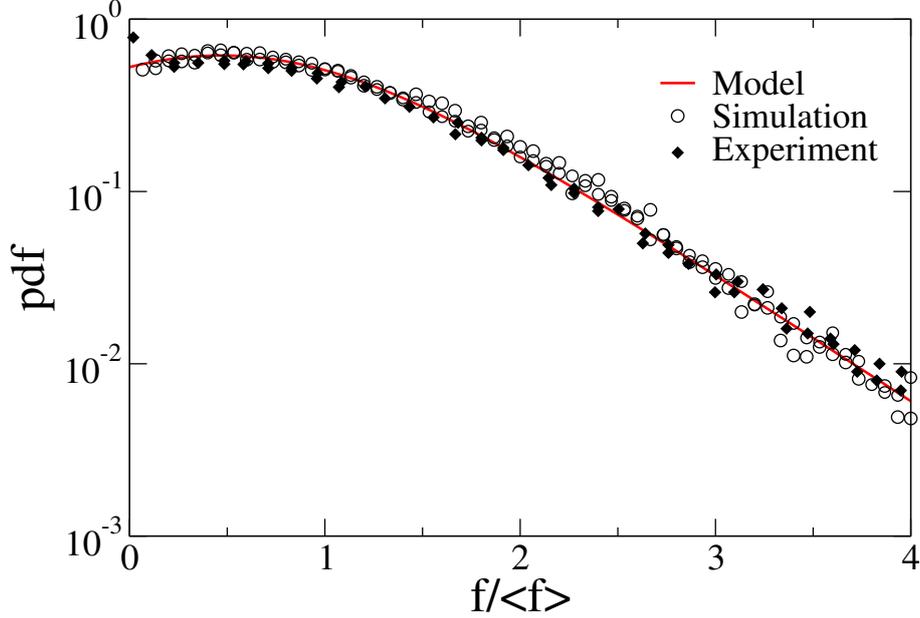


FIGURE 2.4 – La densité de probabilité des forces normales obtenues par expériences en utilisant l’empreinte des forces sur papier carboné (Mueth et al. (1998)) et dans un milieu granulaire à l’équilibre statique, simulé par la méthode CD. La fonction d’ajustement est la prédiction par un modèle théorique (Radjai (2015)).

Des modèles ont été proposés pour expliquer l’origine des distributions observées des forces et les ajuster. Le q-modèle était le premier modèle proposé en considérant la “propagation” des forces, représentées par une grandeur scalaire, d’une couche granulaire à une couche en respectant l’équilibre des particules (Coppersmith et al. (1996)). Ce modèle diffusif conduit à une distribution purement exponentielle des forces. Récemment, un modèle simple de “cascade” des forces à partir de la population des forces supérieures a été proposé (Radjai (2015)). La figure 2.4 montre le très bon ajustement par ce modèle des densités de probabilité des forces obtenues par simulations et expériences. L’expression prédite par le modèle est la suivante :

$$P(f) = \beta(1 + \gamma) \frac{\gamma e^{\beta f}}{(1 + \gamma e^{\beta f})^2} . \quad (2.32)$$

Sous cette forme, $P(f)$ est une force normalisée avec deux paramètres. Mais en imposant, de plus, que la force moyenne est 1, on obtient la relation suivante entre ces deux paramètres :

$$\beta = (1 + \gamma) \ln \left(\frac{1 + \gamma}{\gamma} \right) . \quad (2.33)$$

La courbe d’ajustement de la figure 2.4 est obtenue avec $\beta \simeq 1,7$ ou $\gamma \simeq 0,45$. Dans ce modèle, la densité de probabilité des forces proches de zéro est donnée par $P(0) = \gamma \ln[(1 + \gamma)/\gamma]$. Cette

fonction présente un pic pour $f = -\ln \gamma / \{(1 + \gamma) \ln[(1 + \gamma)/\gamma]\}$ lorsque $\gamma \leq 1$. On notera aussi que P tend vers une fonction exponentielle $\beta[(1 + \gamma)/\gamma]e^{-\beta f}$ pour les grandes valeurs de la force f .

2.2 Matériaux à particules molles (SPM)

Le comportement mécanique et les propriétés de texture, brièvement présentés ci-haut, reflètent en partie le caractère faiblement déformable des particules dans les milieux granulaires étudiés. Par exemple, les distributions hétérogènes des forces sont liées aux faibles aires de contact entre particules (ce qui permet de les assimiler à des contacts *ponctuels*) et aux exclusions stériques. De même, le comportement plastique et la perte de mémoire de l'état initial dans l'état critique résultent des réarrangements des particules et de la dissipation d'énergie par frottement et collisions inélastiques. Or, il existe une large classe de matériaux avec la particularité d'être composés de particules *molles*, définies comme des particules qui peuvent subir des grandes déformations sans se fracturer. Etant données les propriétés connues des milieux granulaires à particules dures, le problème central dans l'étude de ces matériaux, que nous allons appeler Soft Particle Materials (SPM), est de comprendre dans quelle mesure leurs propriétés dépendent de la déformabilité des particules surtout dans la limite des grandes déformations des particules et compacités élevées. Il n'y a pas encore une littérature consolidée sur ces aspects et le sujet reste encore largement ouverte. Néanmoins, nous allons tenter de présenter ici certaines études liées aux travaux réalisés dans cette thèse.

2.2.1 Exemples des SPM

Il est utile de passer d'abord en revue des exemples des SPM dans divers domaines même si tous ces matériaux ne sont pas nécessairement régis par les mêmes lois d'interaction entre particules. Ce qui nous intéresse est avant tout le caractère discret ou divisé de ces matériaux. Les SPM comprennent certaines pâtes colloïdales, de nombreuses poudres, les émulsions et les tissus biologiques. De nombreux exemples de ces matériaux se trouvent plus particulièrement dans les industries agroalimentaire et pharmaceutique. Les produits en poudre alimentaire, tels que le café instantané et le lait séché, ont généralement un comportement très dépendant de l'humidité et de la température. De leur production à leur utilisation, ils sont soumis à différentes étapes d'hydratation, de séchage et de cuisson, qui modifient le comportement mécanique des particules, plus ou moins molles, et leurs interactions. Les gels et les hydrogels avec les particules très déformables, qui sont présentes dans les denrées alimentaires, dictent en grande partie leur comportement rhéologique (Lorenzo et al. (2013)). On peut aussi placer les argiles dans la classe des SPM dans la mesure où à l'échelle nanoscopique les argiles sont constitués des agrégats de plaquettes qui peuvent être souples ou changer de forme par glissement les unes sur les autres (Ebrahimi et al. (2014)).

Les gels à base de protéines sont des matériaux idéaux pour l'encapsulation de composés

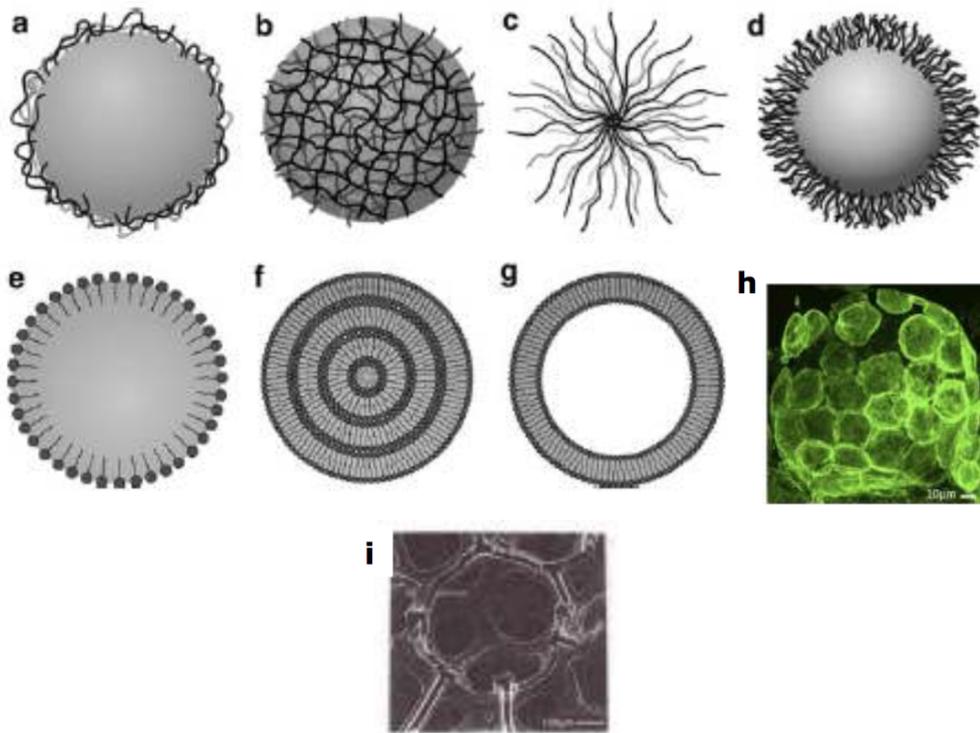


FIGURE 2.5 – Différents types de particules molles : (a) particules solides recouvertes de polymères absorbés ou greffés ; (b) particules de microgel ; (c) polymères en étoile ; (d) micelle de copolymères à bloc ; (e) émulsion de gouttelettes ; (f) vésicule multi-lamellaire ; (g) liposome ; (h) cellules biologiques ; (i) poudres métalliques.

bioactifs, tels que les vitamines, les peptides bioactifs, les probiotiques et les antioxydants. Ils soutiennent des nouveaux aliments fonctionnels qui peuvent avoir des avantages physiologiques ou réduire les risques de maladie (Chen et al. (2006)). Les phénomènes d'auto-assemblage tels que auto-assemblage de monoglycérides sont recherchés pour encapsuler la rétention d'arôme, de la drogue ... (Sagalowicz et al. (2006)). Les hydrogels peuvent également être ajoutés au sol pour améliorer ses caractéristiques de rétention d'eau, ce qui permet de créer des conditions d'eau optimales pour la croissance des plantes dans les régions où l'eau est rare. En effet, les hydrogels sont super-absorbants en ce sens qu'ils absorbent et emmagasinent l'eau des centaines de fois leur propre poids (Koupai et al. (2008)).

La circulation du sang, les dispositifs micro-fluidiques et le traitement des émulsions mettent en jeu des particules molles de taille du micron, comme les cellules, les vésicules et les gouttes dans les écoulements. La déformabilité de ces particules joue un rôle essentiel dans leurs propriétés rhéologiques. Par exemple, les globules rouges du sang prennent des formes non-sphériques et s'adaptent à la taille des veines dans la plus grande échelle des artères et dans la microcirculation à travers de très petits capillaires. En outre, les vésicules étant des membranes fermées, constituent des particules molles en raison du caractère visqueux de leur fluide interne

et la souplesse de leur membrane lipidique visqueuse (Mader et al. (2006); Abkarian et Viallat (2008)).

Les particules constitutives de tous ces matériaux sont des agrégats macro-moléculaires ou granulaires, de tailles comprises entre 1 nm et 1 mm. Sur la base de leur composition et architecture, elles peuvent être regroupées en quatre catégories (Bonnecaze et Cloitre (2010)) : particules de type colloïdal, particules de réseau, systèmes polymère-colloïdes et particules tensioactives (Fig. 2.5). Bien que toutes ces particules soient molles et élastiques, l'origine de leur élasticité et déformabilité dépend de leur composition et structure. Dans les particules de type colloïdal, la souplesse est une conséquence des modifications physiques et/ou chimique de la surface des particules (Fig. 2.5a). Les particules de réseau telles que celles de microgel (Fig. 2.5b) sont des objets colloïdaux constitués de chaînes polymères réticulées et/ou enchevêtrées. En raison de ce réseau polymère, elles sont partiellement impénétrables et intrinsèquement souples et déformables comme polymères. Les particules de polymère-colloïdes sont constituées d'un noyau solide entouré de chaînes polymères. Cette couronne polymère rend ces particules souple et déformable. Les polymères en étoile, les micelles de copolymères à blocs et les particules greffées sont classés dans cette catégorie de particules (Fig. 2.5c-d). Les surfactants permettent la dispersion de deux phases liquides. Par conséquent, les particules avec une membrane mince (les surfactants) et un fluide interne présentent un caractère déformable. Les émulsions, les vésicules et les liposomes sont des exemples des particules de surfactant (Fig. 2.5e-g).

Cette liste peut être davantage enrichie en incluant les cellules biologiques (Fig. 2.5h), les mousses et les poudres métalliques (Fig. 2.5i), les matériaux granulaires composés d'agrégats lâches, et les particules d'usure métalliques produites par le frottement entre les corps solides (appelées "troisième corps" en tribologie) au processus de formage à chaud (Lepesant et al. (2013)). La compaction de poudres molles est devenue un procédé de fabrication bien établie pour les métaux et polymères monolithiques, ce qui permet de produire des composants avec des tolérances dimensionnelles appropriées (Martin et Bouvard (2003)). Les cellules biologiques appartiennent à la classe des particules molles car elles sont généralement des mélanges de liquides et matériaux solides encapsulés dans une membrane avec la spécificité d'exécution de fonctions vitales telles que le flux d'entrée/sortie de la masse, la croissance, la division et la mort (Fig. 2.5h). La morphogenèse implique des cellules qui se développent et se déforment individuellement et se réarrangent collectivement (Blanchard et al. (2009); Kabla (2012)).

Tous ces exemples montrent l'immense importance des SPM. Elles partagent la caractéristique commune d'être composées de particules bien définies qui peuvent subir des déformations importantes sans rupture et d'interagir grâce à des potentiels faibles qui peuvent être réglées par le biais de leur composition chimique. Nous allons discuter plus bas des caractéristiques des particules dans certains de ces matériaux.

2.2.2 Déformation des particules molles

Les grandes déformations d'une seule particule molle et les interactions entre deux particules dépendent de la nature du matériau et de la forme de la particule. Les particules étudiées sont essentiellement de forme sphérique. Différentes approches expérimentales ont été utilisées pour ces études notamment la compression diamétrale, micro-compression et microscopie à force atomique (AFM) pour les micro- et nano-particules telles que les particules biologiques et les vésicules (Shull (2002); Liu (2006)).

On notera que les forces d'adhésion deviennent importantes lorsque les tailles des particules et leurs raideurs diminuent. Pour avoir une idée de l'effet de taille, il faut considérer l'énergie d'adhésion G_c et le module élastique E . Le rapport $\ell_c = G_c/E$ a la dimension d'une longueur qu'il faut comparer à la taille des particules. L'ordre de grandeur de G_c est $0,1 \text{ Jm}^2$ pour les forces d'adhésion des matériaux organiques et matériaux inorganiques de faible énergie. Par conséquent, pour les métaux et céramiques la longueur ℓ_c est très petite et ne devient significative que pour les particules de taille nano-métrique. Pour les élastomères, elle est de l'ordre de $0,1 \mu\text{m}$ et pour les cellules et tissus de l'ordre de $100 \mu\text{m}$ (Shull (2002)). En l'absence de forces extérieures, ces particules molles se déforment considérablement lorsqu'elles sont en contact les unes avec les autres sous l'effet même de leur propre force d'adhésion. Les modèles JKR et DMT, brièvement rappelés plus haut, s'appliquent à ces contacts adhésifs seulement dans la limite de faibles déformations, c'est à dire lorsque ℓ_c/d , où d est le diamètre typique des particules, n'excède pas 5%. C'est pourquoi des nouveaux modèles ont été développés pour l'adhésion entre particules avec grandes surfaces de contact. Par exemple, le modèle de Maugis constitue une extension du modèle JKR pour prendre en compte les grandes surfaces de contact (Maugis (2000)). Comme nous nous intéressons dans cette thèse aux contacts non-cohésifs, nous n'allons pas considérer ces modèles d'adhésion. Nous sommes plus particulièrement intéressés par les déformations sous l'effet des forces indépendamment de leurs origines.

Il existe maintenant plusieurs modèles pour les grandes déformations des particules solides simples tels que sphères solides homogènes, membranes sphériques remplies par un fluide incompressible et les coques sphériques élastiques. Par exemple, le modèle de Tataru pour les sphères homogènes prédit qu'au-delà d'un rapprochement δ/d de 10% entre deux particules, la force varie comme δ^3 et pour les rapprochements encore plus élevés comme δ^5 (Tataru et al. (1991)). Ce modèle a été validé expérimentalement pour les sphères d'élastomère (Afrin et al. (2005)). Le cas des coques et des membranes sphériques est plus complexe dans la mesure où la déformation dépend des modules de compression et de flexion et donc, de l'épaisseur de la paroi (Wan et al. (2002)). Dans le cas des sphères élasto-plastiques, la déformation plastique est initiée aux bords de la zone de contact et la déformation continue avec la contrainte dans ces zones restant égale au seuil plastique.

En ce qui concerne les formes des particules élastiques, il y a eu quelques études dans des cas simples. Par exemple, Lin et al. (2008) ont étudié la déformation des particules compressibles et incompressibles en compression diamétrale ; voir Figure 2.6. Ils trouvent que la forme

des particules hors la zone de contact peut être bien approximée par un ellipse et que l'extension latérale de la particule est plus grande dans le cas incompressible. Ceci indique que dans un assemblage de particules incompressibles, les vides sont mieux remplis.

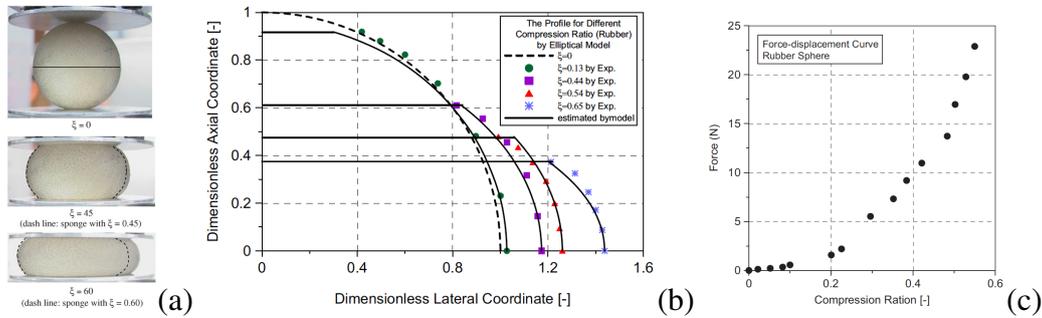


FIGURE 2.6 – (a) Une particule de caoutchouc soumise à la compression axiale ; (b) La forme de la particule comparée à un profil elliptique à différentes étapes de compression ; (c) La relation force-déformation ; *Lin et al. (2008)*.

2.2.3 Assemblages denses de particules molles

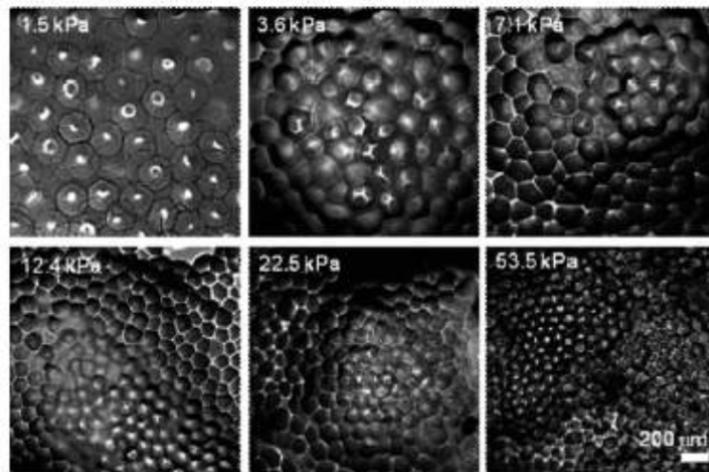


FIGURE 2.7 – Les micrographies optiques des particules de microgel pAAm sous différentes pressions osmotiques à la température ambiante ; *Menut et al. (2012)*.

Les propriétés géométriques et mécaniques des assemblages de particules molles ont été plus particulièrement étudiées dans le cas des émulsions et microgels. Par exemple, en utilisant la technique micro-fluidique et d'autres méthodes, *Menut et al. (2012)* ont étudié la rhéologie des microgels colloïdaux et granulaires (macro-gels). La micrographie de la Fig. 2.7 montre les particules déformées sous l'effet de la pression osmotique. Ces auteurs ont montré que pour les compacités supérieures à une compacité critique, qui correspond à la compacité de blocage

(jamming), le mouvement brownien est sans effet pour le comportement élastique de particules colloïdales, et qu'elles se comportent essentiellement comme des particules granulaires (microgels de grandes tailles). Aux compacités très élevées, leur nature polymérique fixe la pression osmotique et le module de cisaillement est égal à celui d'un gel continu de polymères. En revanche, la nature particulaire des microgels se manifeste pendant l'écoulement. Les microgels restent séparés les uns des autres à cause de leurs mouvements thermiques et une couche de solvant tandis que les macrogels s'interpénètrent partiellement et développent ainsi une force de frottement qui domine leur rhéologie.

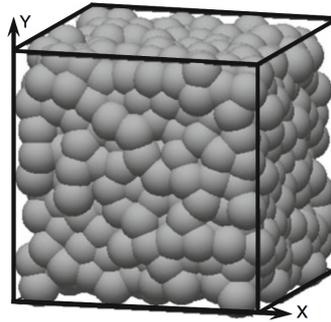


FIGURE 2.8 – *Modèle de sphères molles avec des contacts de Hertz mais grands recouvrements entre particules ; Bonnecaze et Cloitre (2010).*

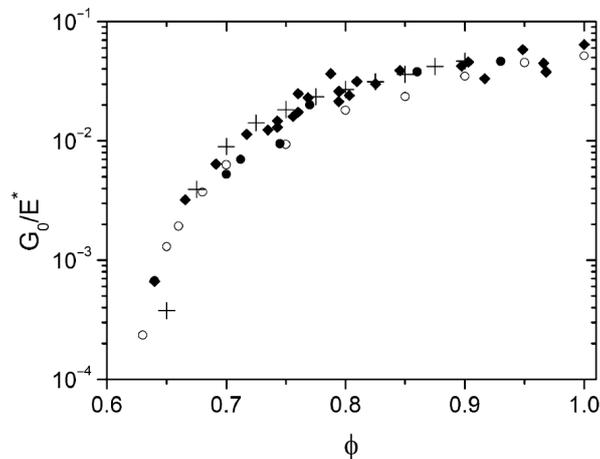


FIGURE 2.9 – *Module de cisaillement G_0 en fonction de la concentration par simulations des sphères élastiques en permettant l'interpénétration des sphères (symboles +) en comparaison des données expérimentales pour les gouttes d'huile de silicone dans l'eau (cercles fermés) et une autre émulsion (cercles ouverts). Les données pour les pâtes de microgel sont également présentées (diamants) ; Bonnecaze et Cloitre (2010).*

Bonnecaze se réfère aux assemblages des particules molles comme des modèles de Verres Mous (Soft Glasses), ce qui est équivalent au terme SPM (le mot verre étant utilisé au sens large

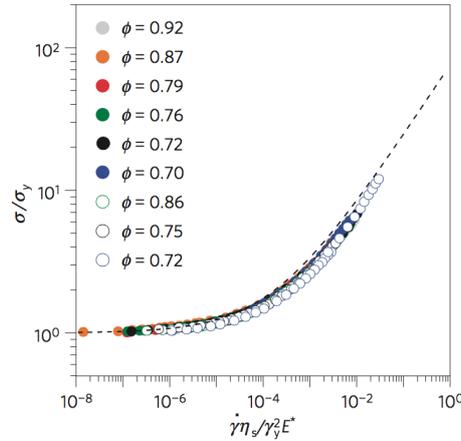


FIGURE 2.10 – La résistance au cisaillement des émulsions concentrées (huile dans l’eau) normalisée par la résistance au seuil d’écoulement pour différentes valeurs de la concentration en fonction du taux de cisaillement normalisée ; *Seth et al. (2011)*.

des matériaux amorphes) (*Bonnecaze et Cloitre (2010)*). Le modèle micromécanique proposé par *Bonnecaze* est simplement la DEM sans frottement et avec des interactions de Hertz (et particules rigides), mais pour des recouvrements entre particules plus grands que le domaine de Hertz (voir la figure 2.8). Malgré le fait que ce modèle correspond de fait à un système très compressible, les résultats obtenus semblent en bon accord avec les expériences. En particulier, le module de cisaillement G_0 à faible fréquence normalisé par le module élastique des particules augmente rapidement avec la concentration et tend vers une valeur constante, comme dans les mesures réalisées sur les émulsions (voir la figure 2.9). En ce qui concerne le comportement en écoulement, ces mêmes simulations reproduisent bien la dépendance de la contrainte de cisaillement par rapport au taux de cisaillement d’après la loi de Herschel-Bulkley (*Seth et al. (2011)*) :

$$\frac{\sigma}{\sigma_y} = 1 + K \left(\frac{\eta \dot{\gamma}}{G_0} \right)^m, \quad (2.34)$$

où σ_y est la contrainte seuil, K dépend du matériau et m est proche de 0,5 ; voir figure 2.10.

Des modèles similaires ont été utilisés dans d’autres contextes. Par exemple, on obtient un comportement similaire pour les mousses en modélisant les bulles comme des sphères élastiques sans frottement avec une raideur qui dépend de la tension de surface (*Durian (1995)*). Ces simulations mettent en évidence une compacité critique ϕ_c qui correspond à la compacité en-dessous de laquelle le module de cisaillement s’annule. Le nombre de coordination est $Z_c = 4$ pour cette compacité critique, ce qui correspond à un assemblage isostatique de sphères. Mais elle augmente comme $Z - Z_c \propto (\phi - \phi_c)^\theta$ pour les valeurs plus élevées de la compacité avec $\theta \simeq 0,5$.

La rhéologie des mousses a été plus amplement étudiée par expériences dans une géométrie de Taylor-Couette (*Katgert (2008)*). La relation entre le nombre de coordination Z et la compacité Φ est similaire à celle obtenue par *Durian (1995)*, comme on peut le voir sur la fi-

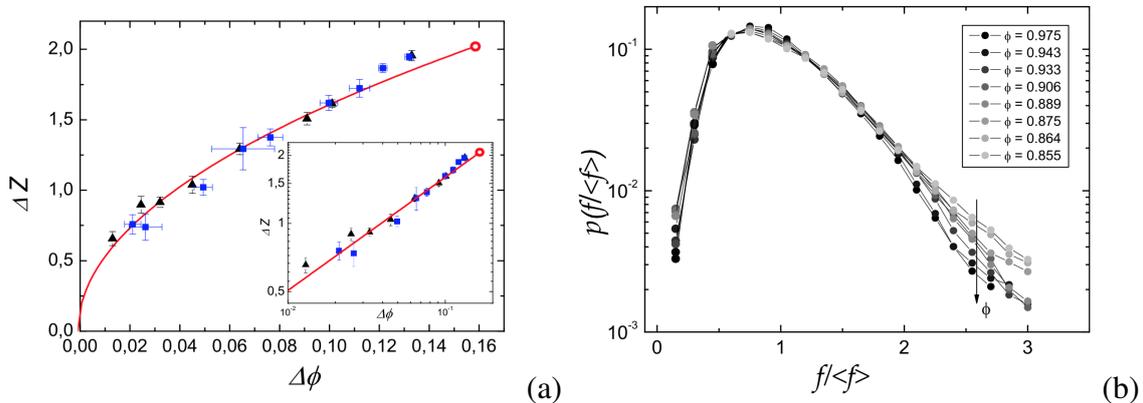


FIGURE 2.11 – (a) La relation entre le nombre de coordination Z et la compacité ϕ dans une mousse 2D; (b) La distribution mesurée des forces pour différentes valeurs de la compacité; *Katger* (2008).

gure 2.11(a). Par ailleurs, la distribution des forces mesurées entre les bulles présente une forme proche de celle observées dans les milieux granulaires (avec une distribution exponentielle décroissante pour les grandes forces); voir figure 2.11(b). L'effet de la compacité est de diminuer la largeur de la distribution. En d'autres termes, la distribution des forces est plus homogène dans le cas dense et elle comporte, en particulier, moins de chaînes de force importantes.

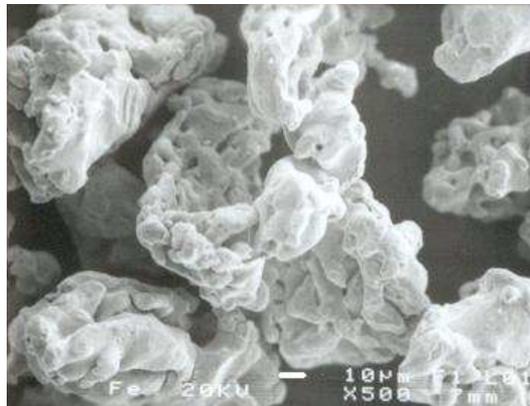


FIGURE 2.12 – Photo d'une poudre de fer obtenue par Microscopie Electronique à Balayage; *Olmos* (2009).

Les poudres métalliques constituent un autre exemple important des SPM avec des particules qui se déforment plastiquement sous l'effet des contraintes mécaniques. La métallurgie de poudres est de utiliser un ensemble de techniques pour la fabrication de pièces à partir de poudres de divers types de métal ou de leurs mélanges. Le procédé de fabrication comprend les trois étapes de préparation de la poudre, son mélange avec des adjuvants (lubrifiant, élément d'alliage ...) pour faciliter le procédé ou les propriétés finales du matériau, mise en forme par compactage et frittage. La figure 2.12 montre une micrographie d'une poudre de fer avec des particules irrégulières et poreuses.

La compression à froid en matrice est l'une des principales méthodes utilisées pour la mise en forme. Elle sert à créer un compact de résistance suffisante pour qu'il soit manipulable (appelé résistance à vert) et avec une porosité réduite par rapport à la poudre initiale. La densification durant le compactage est produite par différents phénomènes. Aux faibles contraintes (inférieure à quelques dizaines de MPa), les réarrangements des particules sont responsables de la densification. Les particules bougent, ce qui réduit les plus grosses porosités. Une granulométrie étalée et une forme sphérique favorisent cette étape de compaction. Lorsque les contraintes appliquées deviennent suffisamment importantes, les particules commencent à se déformer plastiquement si elles sont ductiles. Dans certains cas, les particules sont fragiles et se fragmentent. La déformation plastique permet le rapprochement entre les particules et l'augmentation du nombre de contacts et des surfaces de contact. Les déformations plastiques permettent de parvenir à une densité relative de 1. Par contre, la fragmentation ne permet pas en général d'atteindre des densités relatives supérieures à 0,7 (Olmos (2009)).

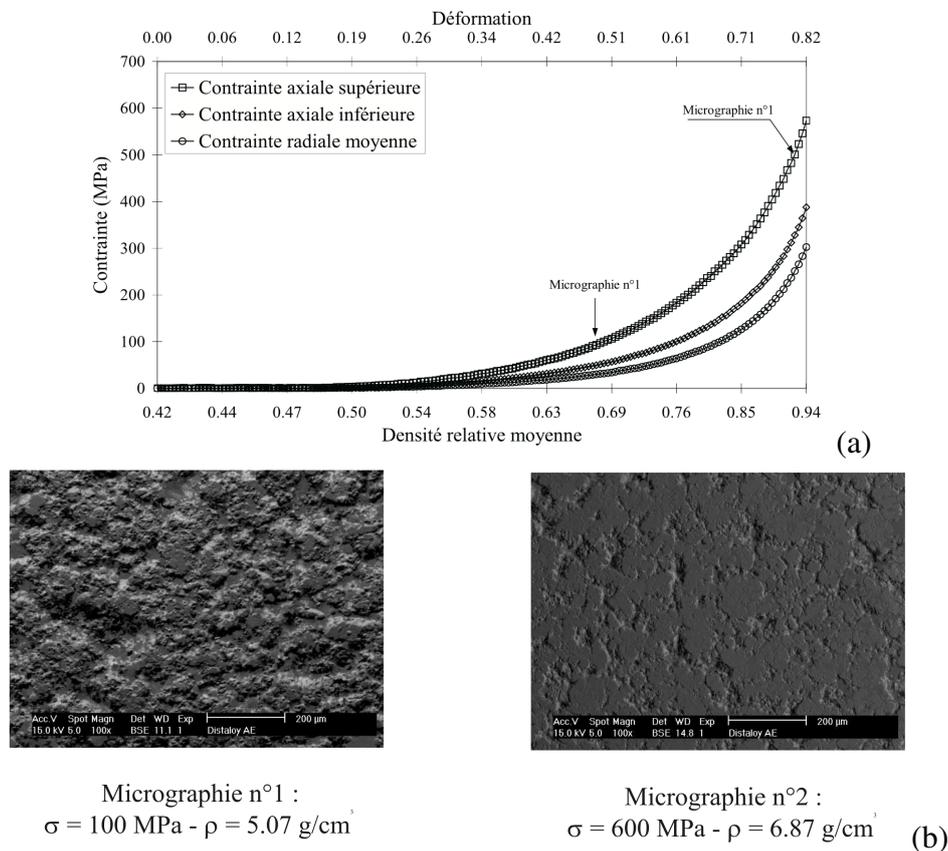


FIGURE 2.13 – (a) Evolution des contraintes axiales supérieure, inférieure et radiale moyenne en fonction de la densité relative moyenne et de la déformation d'une poudre Distaloy AE ; (b) Micrographies MEB de la surface supérieure de deux échantillons comprimés respectivement à 100 et 600 MPa. ; Toussaint (2001).

La figure 2.13 montre l'évolution des contraintes axiale (haut et bas) et radiale en fonction de la déformation axiale d'une poudre Distaloy AE et des micrographies de la surface supérieure

de l'échantillon à deux pressions différentes (Toussaint (2001)). On voit que la déformation subie par la poudre est très importante, 82% à la fin de la compression, ce qui correspond à une densité relative moyenne de 94%. L'écart entre les courbes de contraintes axiales supérieure et inférieure est une conséquence du frottement poudre/paroi de la matrice.

Dans de nombreuses applications de pointe telle que la fabrication des crayons de combustible nucléaire, on cherche à améliorer la qualité du produit final avec un contrôle intime de la microstructure (et pas seulement de la densité relative) ; Saint-Cyr et al. (2011). Il est alors important de comprendre le processus de compactage à l'échelle des particules. Il est en particulier important de comprendre comment les surfaces de contact entre particules, leurs formes et leurs arrangements évoluent au cours de la déformation plastique des particules.

2.3 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons décrit quelques enjeux industriels et scientifiques de la recherche sur les matériaux à particules molles. Même si les matériaux évoqués, leurs comportements et leurs domaines d'application sont très variés, ils présentent le dénominateur commun d'être des matériaux divisés avec des particules molles. Pour ces matériaux, la déformation et la compressibilité des particules constituent un mécanisme important de déformation et d'écoulement, et l'existence d'une contrainte caractéristique fait leur rhéologie dépendre de la pression de confinement.

A travers plusieurs exemples brièvement discutés, nous avons montré qu'un progrès substantiel est encore nécessaire pour atteindre une approche numérique fiable pour modéliser ces matériaux. Dans pratiquement tous les cas, les modèles discrets utilisés sont ceux des particules rigides. Nous allons présenter les aspects liés à la modélisation numérique dans le chapitre suivant, où nous allons aussi détailler les méthodes que nous avons développées pendant cette thèse.

Modélisation des particules molles

Sommaire

3.1	Particules molles et méthodes numériques	32
3.1.1	Lattice Element Method	32
3.1.2	Approches variationnelles	33
3.1.3	Material Point Method	34
3.2	Modèle de particules liées (BPM)	38
3.2.1	Interactions des particules primaires	38
3.2.2	Paramètres numériques	40
3.3	Algorithme MPM implicite	41
3.3.1	Formulation de la MPM	41
3.3.2	Résolution implicite	44
3.3.3	Traitement des contacts frottants	45
3.4	Compression diamétrale d'une particule	48
3.4.1	Les simulations	48
3.4.2	Relation force-déplacement	49
3.4.3	Origines du comportement élasto-plastique des particules BPM	51
3.5	Conclusions	54

Les particules molles ont souvent été simulées par l'approche DEM (Discrete Element Method) en autorisant un recouvrement important entre particules mais en modifiant les lois d'interaction. En gardant la forme sphérique des particules comme géométrie de référence pour définir la déformation locale, ce type de modèles impliquent une forte compressibilité des particules. Les vraies déformations des particules molles ne peuvent être traitées qu'en introduisant des degrés de liberté internes des particules soit dans le cadre de la mécanique des milieux continus soit en représentant les particules comme des agrégats de particules primaires en interactions mutuelles. Nous décrivons dans ce chapitre deux algorithmes basés sur ces idées et qui seront appliqués au processus de compaction et de cisaillement d'une collection de particules molles dans les chapitres suivants.

3.1 Particules molles et méthodes numériques

3.1.1 Lattice Element Method

La simulation des particules molles nécessite l'introduction des degrés de liberté internes des particules avec un traitement approprié de l'impénétrabilité des particules et du frottement dans les zones de contact. Une approche possible en ce sens consiste à représenter chaque particule par un ensemble de points reliés par des ressorts linéaires. Le réseau de ressorts est équivalent à un milieu élastique avec des modules qui dépendent de la raideur des ressorts. Une formulation plus avancée de cette approche est la méthode de discrétisation sur réseau (Lattice Element Method : LEM) (Topin et al. (2009)). Les simples ressorts peuvent être remplacés par des éléments qui peuvent transférer aussi bien les forces radiales que les forces de cisaillement ou des moments de flexion entre les noeuds. Il est également possible d'introduire des seuils de rupture en force ou en déplacement pour représenter la cohésion d'une phase ou de son interface avec une autre phase. Chaque phase (particules, matrices continues) et ses bords sont matérialisés par les liens partageant les mêmes modules et les mêmes seuils de rupture. Cette méthode a été appliquée avec succès pour étudier les propriétés élastiques et la rupture de textures complexes telles que les granules d'amidon dans une matrice protéique (continu) (Topin et al. (2007)) et les bétons (Affes et al. (2012)). La figure 3.1 montre une carte des contraintes dans un assemblage de particules molles en présence d'une matrice de ciment simulé par la LEM.

Les études réalisées montrent à la fois la grande souplesse et l'efficacité de cette méthode pour la prise en compte des microstructures complexes. Mais son utilisation pour la simulation d'un assemblage de particules molles implique un traitement approprié des contacts (par couplage avec une méthode dynamique comme nous allons le faire dans ce travail de thèse) et se limite actuellement au comportement élastique fragile. Pour les grandes déformations, qui sont au centre de nos études dans ce mémoire, l'utilisation de la LEM implique des précautions numériques importantes liées aux déplacements des noeuds et possibles enchevêtrements des liens entre noeuds. C'est pourquoi, comme on verra plus bas, nous avons privilégié une ap-

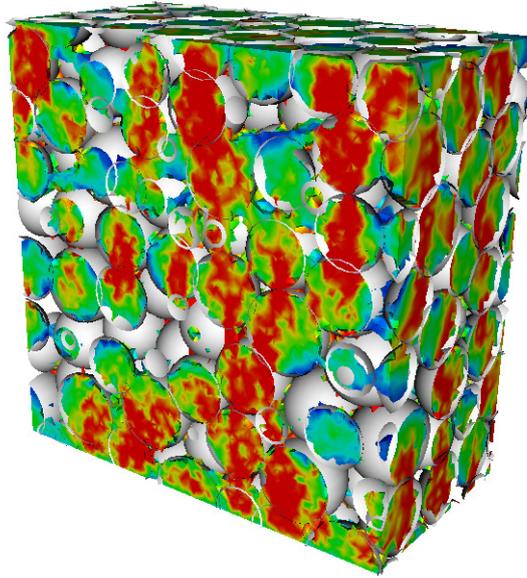


FIGURE 3.1 – La carte des contraintes verticales dans un assemblage de particules collées par une matrice de ciment poreuse ; *Affes et al. (2012)*.

proche dans laquelle les noeuds sont remplacés par des particules primaires (Bonded-Particle Method) ; voir plus bas.

3.1.2 Approches variationnelles

Pour prendre en compte les propriétés matérielles des particules d'une manière générale, ainsi que leurs interactions mutuelles, des approches variationnelles basées sur les descriptions Eulérienne ([Benson \(1997\)](#)) et Lagrangienne ([Munjiza et al. \(1995\)](#); [Bardenhagen et al. \(2000\)](#)) ont été développées. Ces méthodes consistent à mailler les particules et résoudre les équations continues en prenant en compte des formes régularisées des interactions de contact et de frottement. Dans ce cadre, la première approche peut être de combiner la méthode des éléments finis (Finite Element Method : FEM) et la méthode des éléments discrets (DEM) ([Munjiza et al. \(1995\)](#); [Munjiza \(2004\)](#)). Dans la FEM-DEM, chaque particule est discrétisée par la FEM et des interactions entre particules sont modélisées par la DEM. Par exemple, [Gethin et al. \(2001\)](#) ont appliqué cette technique au compactage de poudres métalliques ; voir la figure 3.2. D'autres exemples d'application de la FEM-DEM peuvent être trouvés dans [Munjiza \(2004\)](#). L'inconvénient majeur de cette méthode est le coût élevé du traitement de contact entre particules discrétisées par la FEM.

Dans le cadre des modèles Eulériens, une approche intéressante est la méthode Eulérienne multi-matériaux des éléments finis ([Benson \(1997, 2000\)](#)). Les formulations Eulériennes multi-matériaux ont été initialement développées pour résoudre les problèmes à haute pression ($P > 1$ Mbar). A pressions élevées et aux petites échelles de temps, la pression est beaucoup plus

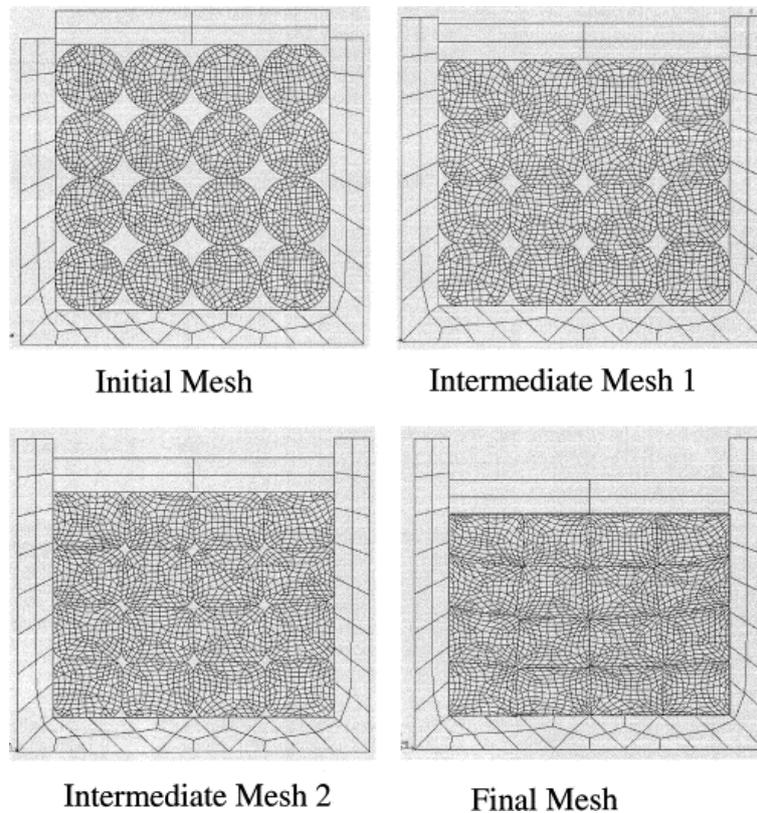


FIGURE 3.2 – (a) Compactage d'une poudre métallique utilisant l'approche FEM-DEM ;Gethin et al. (2001).

grande que les contraintes déviatoriques, qui sont parfois négligées.

Dans le contexte des systèmes granulaires, une théorie de mélange décrivant les contacts entre particules, appelé Lagrangien-Eulérien Arbitraire, a été développée par Benson (2000). Cette théorie permet d'assurer les conditions aux limites et les contacts entre particules. Sa mise en oeuvre nécessite la résolution simultanée des équations algébriques non linéaires dans chaque cellule occupée par plus d'un matériau. Benson note qu'il y a des erreurs dans le transport et le développement d'une couche limite à l'interface. Celles-ci semblent être une conséquence de l'incapacité du modèle à prendre en compte les glissements entre les zones à déplacement rigide. La figure 3.3 montre un exemple de compactage d'une poudre d'acier en utilisant cette approche (Benson (2000)).

3.1.3 Material Point Method

La méthode de points matériels (Material Point Method : MPM) est un modèle Lagrangien (Sulsky et al. (1994, 1995)) et constitue une extension d'une méthode de particules-en-cellule (Particle-In-Cell ou PIC), initialement développée pour traiter les fluides (Brackbill et Ruppel (1986); Brackbill et al. (1988)), à la mécanique des solides. Il s'agit d'une méthode mixte basée

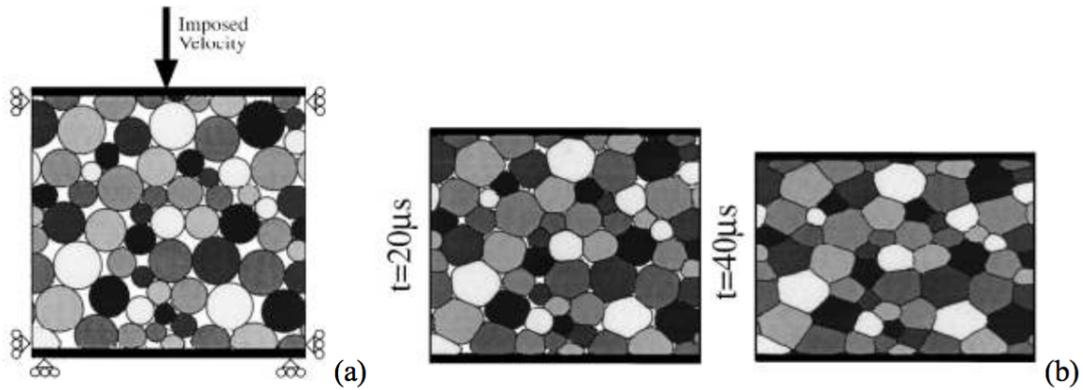


FIGURE 3.3 – (a) Compactage d'une poudre d'acier; (b) les morphologies intermédiaires et finales de la poudre; [Benson \(2000\)](#).

sur la combinaison des descriptions Eulérienne et Lagrangienne du matériau. La description Lagrangienne consiste à discrétiser chaque corps en un ensemble de points matériels, et la description Eulérienne est basée sur un maillage de l'espace. Des masses constantes sont attribuées aux points matériels, ce qui permet de satisfaire implicitement la conservation de la masse. L'information transportée par les points matériels est projetée sur le maillage de fond, où les équations du mouvement sont résolues. La solution du maillage est alors utilisée pour mettre à jour les positions et les informations portées par les points matériels. La MPM combine ainsi les avantages des méthodes Eulérienne et Lagrangienne, ce qui limite la distorsion du maillage Lagrangien et permet de suivre correctement les bords des corps. Elle a été appliquée aux problèmes en grandes déformations ([Wieckowski \(2004\)](#); [Beuth et al. \(2011\)](#)), en mécanique de la rupture ([Guo et Narin \(2006\)](#)) et en rupture dynamique ([Chen et al. \(2003\)](#)). Elle a été aussi appliquée aux matériaux granulaires ([Bardenhagen et al. \(2000, 2001\)](#); [Cummins et Brackbill \(2002\)](#)). L'avantage majeure de la MPM est son efficacité numérique et la possibilité de simuler de très grandes déformations.

Traitement des contacts frottants

Dans le contexte de la MPM, différentes procédures de contact/glisement/séparation ont été proposées. Il est intéressant de noter que, dans la MPM, l'utilisation du même ensemble de fonctions de forme continues dans les deux configurations de mapping (le mapping des points matériels aux nœuds du maillage et le mapping des nœuds du maillage aux points matériels) se solde par un schéma naturel de contact non-glissant de telle sorte qu'aucune interpénétration se peut produire. Pour cette raison, et pour l'utilisation d'une valeur unique de vitesse pour mettre à jour les positions des points matériels, le contact non-glissant entre deux corps différents peut être traité automatiquement, sans aucun coût supplémentaire par rapport à la MPM classique, et la surface de contact n'a pas besoin d'être détectée. Il est donc impossible de distinguer ou séparer les objets en contact avec la MPM classique.

Cependant, la séparation et/ou le glissement peuvent se produire au cours de l'évolution des corps en contact. Pour cela, [Bardenhagen et al. \(2000\)](#) ont étendu la MPM classique aux contacts frottants entre corps solides déformables permettant de prendre en compte le frottement de Coulomb et le glissement au niveau des nœuds de contact. Dans cet algorithme, le contact peut se produire si les points matériels des différents corps sont projetés sur les mêmes nœuds du maillage de fond, et si la force de contact est associée à la vitesse du centre de masse central. L'algorithme de Bardenhagen permet alors la séparation, le glissement et le roulement entre particules. Une combinaison de cet algorithme de contact et la MPM classique a été appliquée pour simuler les déformations en cisaillement dans les matériaux granulaires. Pour améliorer l'algorithme de contact, [Bardenhagen et al. \(2001\)](#) ont pris en compte la tension normale comme critère de séparation libre. Cet algorithme leur a permis d'étudier la propagation des contraintes dans un matériau granulaire. Notons que, contrairement à la MPM, dans les méthodes traditionnelles d'éléments finis, nous avons besoin d'une recherche coûteuse des surfaces de contact sur un maillage régulier.

Pour mettre en œuvre l'algorithme de contact non-glissant dans la MPM, [Hu et Chen \(2003\)](#) ont proposé un système du mapping multi-maillage ; c'est-à-dire, pour chaque corp, un maillage de fond individuel est défini plutôt qu'un maillage commun. Dans cette procédure, la vitesse normale de tout point matériel à la surface de contact est calculée dans le maillage de fond commun, alors que la vitesse tangentielle est recherchée sur la base de l'information correspondante dans le maillage individuel respectif. Dans leur algorithme, l'accélération normale s'annule si les points matériels des différents corps sont projetés sur le même nœud. Cependant, dans certains cas, les corps peuvent se séparer bien que leurs points matériels ne soient pas projetés sur les mêmes nœuds, ce qui conduit à la dissipation d'énergie lors d'un contact. De plus, dans leur algorithme, le frottement entre les différents corps est complètement ignoré car les vitesses tangentielles des différents corps sont supposées indépendantes.

Un algorithme de contact multi-maillage amélioré pour MPM a été proposé par [Pan et al. \(2008\)](#). Dans cette approche, le critère de la condition de contact est similaire à Bardenhagen, ce qui garantit une recherche rapide du contact entre différents corps. Mais, contrairement aux algorithmes de contact de Bardenhagen et de Hu et Chen, les vitesses normales et tangentielles de chaque point matériel à la surface de contact sont calculées dans les maillages individuelles respectifs. Afin d'éviter une interpénétration, la force de contact normale est calculée à la surface de contact et le frottement de Coulomb est appliqué dans la direction tangentielle.

Dans le cas de particules rigides, il existe deux méthodes pour le traitement des contacts frottants. La méthode la plus populaire est la méthode des éléments discrètes (DEM) introduite par [Cundall et Strack \(1979\)](#) à partir de la méthode de Dynamique Moléculaire (Molecular Dynamics ou MD). Les particules sont traitées comme des corps rigides, mais les contacts entre les particules sont considérés comme étant déformables et ils obéissent à un comportement élastique dans lequel la variable de déformation au contact est déduite des positions et déplacements relatifs des particules. Pour prendre en compte le caractère inélastique du contact et des chocs entre particules, une force visqueuse est également introduite. Les lois de force permettent d'appliquer les méthodes d'intégration classique avec un pas de temps faible devant le

temps de réponse élastique du contact.

Une autre variante de l'approche discrète est la méthode de Dynamique des Contacts (Contact Dynamics : CD) développée par J.J. Moreau et M. Jean au LMGC (Moreau (1977, 1983, 1988b,a, 1993, 1994); Jean et Pratt (1985); Jean (1988, 1995, 1999); Jean et Moreau (1992); Jean et al. (1994)). Pour la distinguer de la DEM basée sur la MD, nous nous y référons ici par l'acronyme CD-DEM. Elle est ressorti d'une formulation mathématique de dynamique non-régulière et des développements algorithmiques par J.J. Moreau et M. Jean . La différence essentielle entre cette approche et la DEM classique (MD-DEM) réside dans le traitement des interactions de contact. Dans la méthode CD-DEM, les interactions de contact sont traitées sans introduire des lois de force spécifiques. Les équations du mouvement de corps rigide sont intégrées en prenant en compte les contraintes cinématiques résultant des interactions de contact. Ces interactions sont caractérisées par trois paramètres : le coefficient de frottement et, les coefficients de restitution normale et tangentielle qui contrôlent le taux de dissipation. Un schéma d'intégration temporelle implicite rend la méthode inconditionnellement stable. Pour cette raison, la méthode CD-DEM admet des pas de temps bien plus grands que l'approche MD-DEM. Un algorithme itératif similaire à la méthode non-linéaire de Gauss-Seidel est souvent utilisé pour déterminer simultanément les forces de contact et les vitesses des particules à tous les contacts admissibles entre les particules. Il faut noter que, bien que la méthode CD-DEM soit basée sur une intégration temporelle implicite des vitesses, elle nécessite une détermination explicite du réseau de contacts au début de chaque intervalle de temps.

La méthode CD-DEM a été largement appliquée pour étudier les matériaux granulaires (Moreau (1997); Radjai et al. (1996); Radjai (1998); Bratberg et al. (2002); Radjai et Roux (2002); Staron et al. (2002); Nouguier-Lehon et al. (2003); Renouf et al. (2004); McNamara et Herrmann (2004); Taboada et al. (2005); Saussine et al. (2006); Azéma et al. (2007); Ries et al. (2007); Estrada et al. (2008); Azéma et Radjai (2010); Saint-Cyr et al. (2011); Quezada et al. (2012); Nguyen et al. (2015)), ainsi que d'autres systèmes mécaniques composés des corps rigides avec des interactions de contact frottant tels que la maçonnerie et la structure de tenségrité (Acary et Jean (1998); Nineb et al. (2006)). Les résultats se révèlent souvent être en bon accord avec l'observation expérimentale et pour les propriétés de cisaillement statique et plastique avec des simulations MD-DEM (Radjai et al. (1995, 1997); Radjai (1999); Moreau (1997); Lanier et Jean (2000); Radjai et Roux (2004b)). Les différences entre les deux méthodes résultent principalement des échelles de description et de la présence de paramètres élastiques dans la méthode DEM classique (Radjai et al. (1997); McNamara et Herrmann (2004, 2006)). Un avantage important de la méthode CD-DEM est le traitement des contacts frottants sans régularisation. C'est la raison pour laquelle elle peut être directement appliquée au problème de contact entre particules molles.

Récemment, une procédure numérique basée sur une approche implicite de la MPM en association avec la méthode CD-DEM a été développée (Nezamabadi et al. (2015)); voir la figure 3.4. La formulation implicite permet la stabilité numérique et un couplage efficace avec la modélisation implicite des contacts unilatéraux et le frottement entre les particules comme dans la méthode CD-DEM. Les détails de cette technique, utilisée pour certaines simulations

dans cette thèse, sont présentés plus bas.

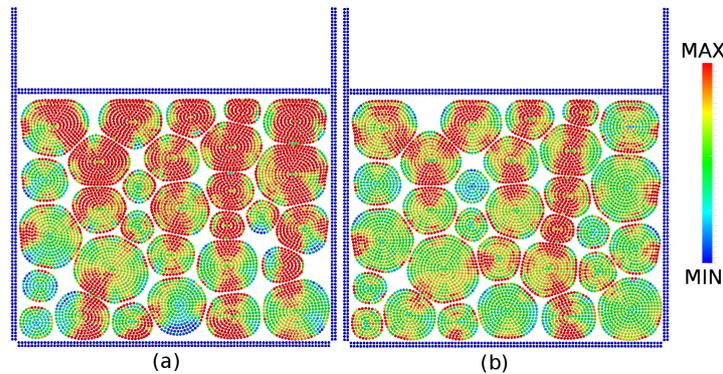


FIGURE 3.4 – Les états déformés au même niveau de déformation pour un exemple de la compaction d'un assemblage de particules élastiques (le module de Young de 10 MPa et le coefficient de Poisson de 0,45) avec (a) et sans (b) frottement, utilisant un algorithme de MPM implicite en association avec un traitement implicite des contacts unilatéraux basée sur la méthode CD-DEM. Les champs de contraintes de Von Mises sont représentés avec la même échelle de couleurs ; *Nezamabadi et al. (2015)*

3.2 Modèle de particules liées (BPM)

Nous avons vu que, parmi différentes représentations des particules molles, il existe deux approches *générales* possibles : 1) comme un agrégat de particules primaires rigides, que nous allons appeler Bonded Particle Method (BPM) et 2) comme un ensemble de points matériels ou Material Point Method (MPM). Remarquons que la LEM peut être considérée comme un cas particulier de la BPM avec des interactions élastiques. Le point important pour le traitement des particules molles avec la BPM est la modélisation des interactions entre particules primaires. En ce qui concerne la MPM, il est nécessaire de la coupler avec la CD pour un traitement rigoureux des contacts frottants. Nous allons décrire ces deux approches en commençant par la BPM qui a été plus souvent utilisée pour les simulations et les analyses présentées dans les chapitres suivants.

3.2.1 Interactions des particules primaires

Les particules primaires rigides dans un agrégat doivent pouvoir se déplacer et se réarranger selon les forces extérieures exercées sur ses bords par d'autres agrégats. Ces interactions doivent comporter une partie d'attraction pour empêcher la dispersion des particules primaires tout en permettant leurs déplacements et réarrangements. Les interactions entre particules primaires appartenant au même agrégat peuvent être différentes de celles avec d'autres agrégats. Lorsque les interactions entre les particules primaires sont gouvernées par une loi de contact

cohésive qui peut être rompue à un certain seuil, ce modèle peut être utilisé pour la simulation des particules sécables (Sator et al. (2008); Wang et Yan (2013); Ma et al. (2014); Nguyen et al. (2015)). Dans ce cas, les particules subissent une rupture irréversible et peuvent casser en plusieurs morceaux lorsque le seuil de rupture est atteint pour plusieurs points de contact entre les particules primaires. Afin d'éviter la fragmentation et de permettre des déformations réversibles entre particules primaires, il est nécessaire de remplacer l'interaction de contact (qui est toujours courte-distance) par une force centrale de longue portée comme dans les systèmes colloïdaux, conjointement avec une force repulsive courte-distance (Israelachvili (1993)).

Pour la partie attractive de la force, nous avons utilisé une loi de puissance. Considérons deux disques rigides aux rayons a_1 et a_2 séparées d'une distance δ . La force d'attraction s'exprime sous la forme :

$$F_a = -F_0 \left(1 + \frac{\delta}{a_0} \right)^{-\gamma}, \quad (3.1)$$

où $a_0 = a_1 + a_2$, et F_0 est la valeur maximale de la force d'attraction pour une distance nulle entre particules ($\delta = 0$). Avec $\gamma = 7$, cette expression est simplement la partie attractive de la force de Lennard-Jones (LJ) (Israelachvili (1993); Ioannidou et al. (2014)). Le choix de l'exposant γ n'est pas crucial pour le problème qui nous intéresse dans cette thèse, mais il a été montré que cette loi avec différentes valeurs de cet exposant peut représenter le potentiel de la force moyenne dans des matériaux complexes tels que le ciment et l'argile (Ioannidou et al. (2014)).

La partie répulsive de l'interaction entre particules primaires peut être définie de différentes façons. Mais, comme nous avons utilisé la méthode CD pour la simulation des particules primaires, nous considérons que les particules sont parfaitement rigides de sorte que la force répulsive F_r est activée uniquement lorsque les deux particules se touchent, à savoir pour un gap $\delta = 0$ (Moreau (1988b); Radjai et Richefeu (2009b)). Par conséquent, la force d'interaction $F = F_a + F_r$ en fonction de δ se réduit au terme d'attraction à une distance arbitraire $\delta > 0$ et prend une valeur $\in [-F_0, +\infty]$ au contact ($\delta = 0$). Le graphe de cette loi d'interaction est présenté sur la figure 3.5 pour $\gamma = 2$ et $\gamma = 7$.

Pour une mise en œuvre efficace de cette loi, une coupure à une certaine distance est nécessaire. Pour $\gamma = 7$, la force d'attraction est négligeable au-delà de $\delta \simeq a_0$, auquel cas seuls les premières et secondes voisines de chaque particule sont impliqués dans les interactions avec chaque particule. Cette distance est courte, mais suffisante pour permettre aux particules primaires appartenant à une particule de rester ensemble pendant les déformations quasi-statiques.

Afin d'éviter des effets de localisation des déformation et des variations de volume, le coefficient de frottement entre les particules primaires appartenant à une particule est fixé à zéro. En effet, en l'absence de frottement entre particules primaires, le volume de chaque particule est presque constante car les réarrangements ne produisent pas de dilatance (Peyneau et Roux (2008)). Par conséquent, la compacité interne des particules reste proche de celle d'un assemblage aléatoire désordonné. Par ailleurs, les rotations des particules primaires à l'intérieur d'une particule ne sont plus matérielles et aucune dissipation d'énergie à l'intérieur des particules ne se produit par frottement. Cependant, nous avons fixé les coefficients de restitution normale et

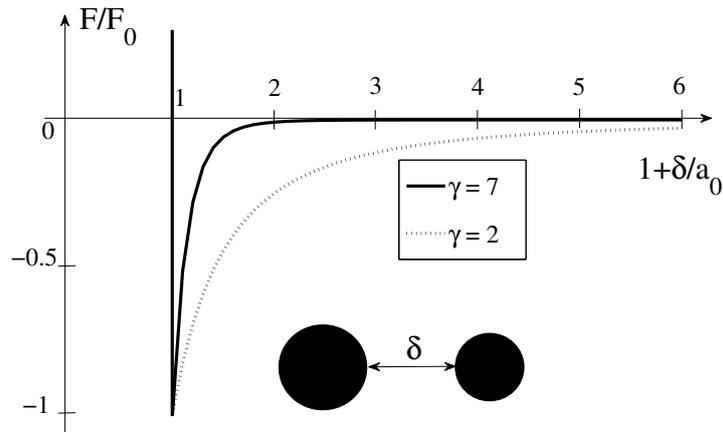


FIGURE 3.5 – La loi de force d’attraction entre deux particules pour les deux valeurs de l’exposant γ ; voir l’équation (3.1).

tangentielle à zéro de manière à permettre la dissipation d’énergie pendant les réarrangements des particules primaires. Cette dissipation confère indirectement un caractère frottant aux particules car la dissipation sous l’effet des chocs est proportionnelle à la vitesse relative est donc à la contrainte qui s’exerce sur la particule.

En outre, en raison des exclusions stériques mutuelles des particules primaires, une particule peut être en équilibre statique avec des configurations variables des particules primaires. En d’autres termes, une particule BPM peut prendre des formes variées et la conserver lorsque les forces extérieures sont supprimées. La déformation de chaque particule contient à la fois une faible partie réversible due à l’action des forces d’attraction et une partie plastique provenant de réarrangements de particules primaires.

Notons que, comme les particules primaires interagissent sans frottement, il est inutile d’ajouter une force de frottement entre les particules primaires appartenant à deux particules distinctes. La force de frottement n’est jamais mobilisée à de tels contacts frottants car les rotations des particules primaires aux points de contact ne sont pas couplées à la rotation globale de chaque particule. Un tel effet ne peut être mécaniquement matériel que si on ajoute une résistance au roulement entre particules primaires.

3.2.2 Paramètres numériques

Pour un choix de l’exposant γ , la loi d’interaction entre particules primaires comporte les deux paramètres F_0 et a_0 , ou d’une manière générale, les distributions des tailles des particules primaires. Le choix de F_0 n’est pas critique dans la mesure où la déformation des particules est déterminée par le rapport entre les forces extérieures et F_0 . Il est plus commode d’introduire la contrainte caractéristique $p_I = F_0/\langle a_0 \rangle$. Si la pression de confinement p d’un assemblage de

particules BPM est inférieure à p_I , alors les particules se déforment peu et le système peut être considéré comme régi par les réarrangements des particules. Si, au contraire, $p/p_I \gg 1$, alors les particules sont fortement déformées et les déformations sont régies par celles des particules. Le comportement mécanique dépend donc du rapport p/p_I . Cet effet de pression de confinement est l'effet recherché dans cette thèse. Il est absent du comportement d'un assemblage de particules indéformables et insécables. En ce sens, p_I correspond au *seuil plastique* des particules BPM, comme on le verra plus bas ; voir figure 3.11.

La distribution des tailles des particules primaires modifie seulement la compacité internes des particules. Nous avons testé l'écrasement des particules avec différentes granulométries. Les déformations des particules sont un peu plus lisses dans le cas des distributions polydisperses des tailles. C'est pourquoi, dans la plupart de simulations nous avons introduit un facteur deux entre les tailles maximale et minimale des particules primaires. Notons aussi que la valeur absolue de a_0 n'est pas cruciale et ne modifie que la valeur de p_I . Enfin, la précision du modèle naturellement augmente avec le nombre de particules primaires par particule. En 2D, un nombre de particules primaires supérieur à 1000 permet, même dans un état très déformée, d'obtenir une bonne représentation des formes des particules molles. Nous en verrons des exemples plus bas.

3.3 Algorithme MPM implicite

Dans cette section, nous présentons la formulation de base de la méthode des points matériels. Ensuite, une procédure MPM implicite est développée pour la simulation de particules déformables en association avec la méthode CD pour le traitement des contacts frottants entre particules. Notre procédure est implantée de telle sorte que des variables de contact (la vitesse, la force...) sont calculées simultanément avec des variables de volume (les contraintes, les déformations...).

3.3.1 Formulation de la MPM

Equations principales

Considérons un domaine Ω dans \mathbb{R}^D , D étant la dimension du domaine, désignant un corps avec un bord extérieur $\partial\Omega$. La conservation de la masse est décrit par l'équation de continuité suivante :

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.2)$$

où $\rho(\mathbf{x}, t)$ est la densité du matériau et $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ représente la vitesse à la position \mathbf{x} et le temp t .

Dans le contexte de la théorie des déformations infinitésimales, la conservation de la quantité de mouvement est donnée par :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.3)$$

où $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ est le tenseur des contraintes de Cauchy, $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ indique la force volumique du corps et $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$ désigne l'accélération à la position \mathbf{x} et le temps t .

Ce corps est soumis aux déplacements et efforts imposés sur les parties complémentaires disjointes du bord $\partial\Omega_u$ (conditions aux limites de type Dirichlet) et $\partial\Omega_f$ (conditions aux limites de type Neumann), respectivement ($\partial\Omega = \partial\Omega_u \cup \partial\Omega_f$ et $\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_f = \mathbf{0}$). Les conditions aux limites sont alors données par :

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{u}}(t) & \text{sur } \partial\Omega_u, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}(t) & \text{sur } \partial\Omega_f, \end{cases} \quad (3.4)$$

où $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ est le champ de déplacement et $\hat{\mathbf{u}}(t)$ et $\mathbf{f}(t)$ sont les déplacements et efforts imposés, respectivement. \mathbf{n} représente est la normale unitaire sortante à $\partial\Omega$.

L'équation de la conservation de la masse (3.2) et l'équation du mouvement (3.3) doivent être complétées par une loi de comportement qui est supposée ici d'être linéaire, homogène, isotrope et élastique :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t), \quad (3.5)$$

où \mathbb{C} représente le tenseur d'ordre quatre des constantes d'élasticité et $\boldsymbol{\varepsilon}$ est le tenseur des déformations ($\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$). Notons que, ici, on se limite à une loi de comportement linéaire pour simplifier la formulation et que des lois de comportement non-linéaires (y compris les comportements inélastiques tels que la plasticité) peuvent être également appliqués dans ce contexte.

Formes variationnelles et discrétisées

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, le corps est divisé en éléments de masse infinitésimale à laquelle une quantité de masse constante est allouée pendant le calcul. Dans la MPM, ces éléments sont représentés par des points matériels avec masses fixes. Cela implique que la relation de conservation de la masse (3.2) est automatiquement satisfaite. Par ailleurs, la forme faible associée à l'équation du mouvement (3.3) et les conditions aux limites (3.4) peut être écrite comme suit :

Trouver $\mathbf{u} \in S(\Omega)$, $\forall \delta \mathbf{u} \in S_0(\Omega)$ et satisfaisant $\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}}$ sur $\partial\Omega_u$, tel que :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega + \int_{\Omega} \rho \mathbf{a} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\partial\Omega_f} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma, \quad (3.6)$$

où $S(\Omega)$ désigne l'espace des fonctions suffisamment régulières et cinématiquement admissibles et $S_0(\Omega)$, $S_0(\Omega) = \{\delta \mathbf{u} \in S(\Omega), \delta \mathbf{u} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_u\}$ est l'espace des fonctions suffisamment régulières et nulles sur le bord Dirichlet.

La MPM peut être considérée comme une extension de la méthode des éléments finis classique. Les intégrales classiques de la force nodale et de la matrice de masse sont définies de la

même façon qu'en FEM. La forme faible (3.6) peut donc se réécrire sous la forme suivante :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega + \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega} \rho \mathbf{a} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\delta\Omega_f} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma, \quad (3.7)$$

où Ω^e représente le domaine occupé par e -ième élément et N_e est le nombre d'éléments. Dans le contexte de la MPM, les points matériels servent comme points d'intégration pour calculer les intégrales dans la FEM. Cependant, dans la FEM standard, les positions des points d'intégration et leurs masses sont choisies de façon à optimiser la précision d'intégration pour un ensemble donné de fonctions d'interpolation. La MPM discrétise ces intégrales à l'aide d'une fonction de Dirac. Par exemple, la densité peut alors être discrétisée pour un élément comme suit :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=1}^{N_p^e} \rho_p \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p(t)), \quad (3.8)$$

où ρ_p et $\mathbf{X}_p(t)$ sont la densité et la position d'un point matériel, respectivement. δ est la fonction de Dirac et N_p^e est le nombre des points matériels dans un élément. Notez que la densité de point matériel est égale à $\rho_p = m_p/V_p$ avec la masse m_p et la volume V_p de point matériel

Le déplacement \mathbf{u}_p et la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_p$ au point matériel \mathbf{X}_p s'expriment en fonction des déplacements aux nœuds d'un élément $\mathbf{u}_{\text{node}}^e$ appelés des déplacements nodaux. \mathbf{u}_p et $\mathbf{u}_{\text{node}}^e$ sont liés par une matrice \mathbf{N}_p appelée matrice d'interpolation ou matrice des fonctions de forme au point \mathbf{X}_p ($\mathbf{u}_p = \mathbf{N}_p \mathbf{u}_{\text{node}}^e$). A partir de ces matrices, on définit facilement la matrice \mathbf{G}_p qui relie le gradient du déplacement aux déplacements nodaux $\mathbf{u}_{\text{node}}^e$ ($\boldsymbol{\varepsilon}_p = \mathbf{G}_p \mathbf{u}_{\text{node}}^e$). Bien entendu, chaque terme de \mathbf{G}_p est une dérivée d'une fonction de forme. Le déplacement virtuel $\delta \mathbf{u}_p$ et la déformation virtuelle $\delta \boldsymbol{\varepsilon}_p$ au point matériel \mathbf{X}_p peuvent donc être définis de la même manière ($\delta \mathbf{u}_p = \mathbf{N}_p \delta \mathbf{u}_{\text{node}}^e$ et $\delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = \mathbf{G}_p \delta \mathbf{u}_{\text{node}}^e$). Par conséquent, la forme discrétisée du problème (3.7) est donnée sous la forme suivante en tenant compte des interactions de contact entre plusieurs corps :

$$\mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{node}}(t) = \mathbf{F}^{\text{int}}(t) + \mathbf{F}^{\text{ext}}(t) + \mathbf{F}^{\text{C}}(t), \quad (3.9)$$

où \mathbf{a}_{node} est le vecteur des accélérations nodales et \mathbf{F}^{C} désigne le vecteur des forces nodales de contact (voir la section 3.3.3). \mathbf{M} est la matrice de masse nodale définie par :

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} m_p \mathbf{N}_p, \quad (3.10)$$

\mathbf{F}^{int} donne le vecteur des forces internes :

$$\mathbf{F}^{\text{int}} = - \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{G}_p \boldsymbol{\sigma}_p V_p \quad (3.11)$$

et \mathbf{F}^{ext} représente le vecteur des forces extérieures appliquées :

$$\mathbf{F}^{\text{ext}} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{N}_p \mathbf{b}_p + \mathbf{F}^{\text{S}} \quad (3.12)$$

avec \mathbf{F}^S comme le vecteur des forces surfaciques.

Enfin, puisqu'il y a généralement plus des points matériels que les nœuds du maillage, une approche des moindres carrées est utilisée afin de déterminer les vitesses nodales \mathbf{v}_{node} à partir des vitesses aux points matériels \mathbf{v}_p . Les vitesses nodales sont donc obtenues en résolvant la relation suivante :

$$\mathbf{P}_{\text{node}} = \mathbf{M} \mathbf{v}_{\text{node}} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} m_p \mathbf{N}_p \mathbf{v}_p. \quad (3.13)$$

où \mathbf{P}_{node} est le vecteur des quantités nodales de mouvement.

3.3.2 Résolution implicite

Nous proposons ici une approche MPM avec une intégration temporelle implicite comme celle de [Guilkey et Weiss \(2003\)](#). Dans le contexte de la résolution implicite, pour avancer la solution dans le temps de (3.9) de t à $t + \Delta t$, on considère que $\mathbf{F}^{\text{ext}}(t + \Delta t)$ sont connus. En outre, la règle trapézoïdale est utilisée pour faire avancer la grille cinématique :

$$\mathbf{u}_{\text{node}}(t + \Delta t) = \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{v}_{\text{node}}(t) + \mathbf{v}_{\text{node}}(t + \Delta t)), \quad (3.14)$$

$$\mathbf{v}_{\text{node}}(t + \Delta t) = \mathbf{v}_{\text{node}}(t) + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{a}_{\text{node}}(t) + \mathbf{a}_{\text{node}}(t + \Delta t)), \quad (3.15)$$

Notons que $\mathbf{u}_{\text{node}}(t) = 0$ car $\mathbf{u}_{\text{node}}(t + \Delta t)$ est en fait le vecteur des déplacements nodaux à partir de t à $t + \Delta t$. A partir des équations (3.14) et (3.15), le vecteur des accélérations nodales en temps $t + \Delta t$ peut être donné par :

$$\mathbf{a}_{\text{node}}(t + \Delta t) = \frac{4}{\Delta t^2} \mathbf{u}_{\text{node}}(t + \Delta t) - \frac{4}{\Delta t} \mathbf{v}_{\text{node}}(t) - \mathbf{a}_{\text{node}}(t). \quad (3.16)$$

Afin d'évaluer le volume de point matériel V_p à partir de t à $t + \Delta t$, en considérant la relation de la conservation de masse (3.2), la règle trapézoïdale et le fait que la masse de point matériel (m_p) est fixe, nous obtenons :

$$V_p(t + \Delta t) = V_p(t) \frac{1 + \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}_p(t)}{1 + \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}_p(t) - \nabla \cdot \mathbf{u}_p(t + \Delta t)} \quad (3.17)$$

Dans le cadre d'un algorithme de résolution incrémental-itératif, une nouvelle estimation de \mathbf{u}_{node} à l'itération k , $\mathbf{u}_{\text{node}}^k(t + \Delta t)$, est obtenue en ajoutant $\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k$, le déplacement incrémental, au déplacement estimé précédemment :

$$\mathbf{u}_{\text{node}}^k(t + \Delta t) = \mathbf{u}_{\text{node}}^{k-1}(t + \Delta t) + \Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k \quad (3.18)$$

Afin d'obtenir $\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k$, à l'itération k nous résolvons l'équation linéarisée suivante qui est la forme incrémentale de la relation (3.9) :

$$\mathbf{K}^{k-1} \Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k = \mathbf{R}^k \quad (3.19)$$

où \mathbf{K}^{k-1} est la matrice de rigidité :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{k-1} = & \frac{4}{\Delta t^2} \mathbf{M} - \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} V_p^{k-1}(t + \Delta t) \mathbf{G}_p \mathbb{C} \mathbf{G}_p \\ & - \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p^e} \frac{V_p^{k-1}(t + \Delta t)}{1 + \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}_p(t) - \nabla \cdot \mathbf{u}_p^{k-1}(t + \Delta t)} \mathbf{G}_p \boldsymbol{\sigma}_p^{k-1}(t + \Delta t) \mathbf{B} \mathbf{G}_p \end{aligned} \quad (3.20)$$

et \mathbf{R}^k représente le terme résiduel :

$$\mathbf{R}^k = \mathbf{F}^{\text{ext}}(t + \Delta t) + \mathbf{F}^{\text{int}(k-1)}(t + \Delta t) + \mathbf{F}^{\text{C}(k-1)}(t + \Delta t) - \mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{node}}^{k-1}(t + \Delta t). \quad (3.21)$$

L'objectif de cet algorithme incrémental est de trouver d'un vecteur des déplacements nodaux $\mathbf{u}_{\text{node}}(t + \Delta t)$ qui minimise le terme résiduel, \mathbf{R} . Ainsi, comme [Guilkey et Weiss \(2003\)](#), nous introduisons deux critères de convergence :

$$C_1 = \frac{\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k\|}{\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^1\|} < \epsilon_1 \quad \text{et} \quad C_2 = \frac{\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^k \mathbf{R}^k\|}{\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^1 \mathbf{R}^1\|} < \epsilon_2, \quad (3.22)$$

où ϵ_1 et ϵ_2 sont des paramètres de précision sur des vitesses et l'énergie, respectivement, $\|\cdot\|$ est la norme du vecteur, $\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^{\text{max}}\|$ désigne la valeur maximale de la norme du vecteur des déplacements incrémentaux et $\|\Delta \mathbf{u}_{\text{node}}^1 \mathbf{R}^1\|$ indique la valeur initiale du produit scalaire des vecteurs des déplacements incrémentaux et du terme résiduel. Après l'obtention des solutions nodales, elles sont projetées sur les points matériels, ce qui permet de mettre à jour l'information portée par ces points.

3.3.3 Traitement des contacts frottants

Pour étudier un assemblage de particules molles, les forces de contact \mathbf{F}^{C} entre les particules nécessitent d'être calculées à l'aide d'un algorithme de contact prenant en compte la condition de non-interpénétration de la matière ainsi que la loi de frottement de Coulomb. Comme nous utilisons un schéma implicite pour l'implémentation de la MPM, la méthode CD qui est une approche implicite, est un choix naturel pour le traitement des points de contact. Cependant, contrairement à des particules parfaitement rigides, la méthode de résolution doit être adaptée aux particules discrétisées en points matériels. De ce fait, dans la MPM, un algorithme de contact multi-maillage est développé pour implémenter des lois de contact tels que la loi de frottement de Coulomb ou des lois d'adhésion au niveau des points de contact ([Hu](#)

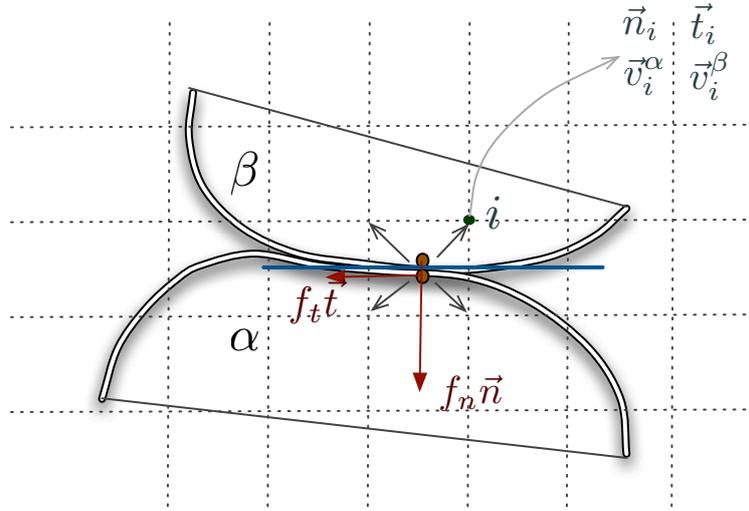


FIGURE 3.6 – Schéma de l'algorithme de contact multi-maillage de la MPM.

et Chen (2003)). Dans ce modèle, les variables de contact sont calculées en même temps que celles associées au comportement volumique.

Considérons deux corps déformables α et β ; voir figure 3.6. Dans le cadre de l'algorithme multi-maillage, un maillage de fond approprié à chaque corps est défini. Un point de contact à l'interface entre les deux corps peut être traité par l'introduction d'un maillage de fond commun avec le même type de grille pour le transfert de quantités nodales de maillages appropriés au maillage commun. Les points de contact entre les corps α et β sont traités au niveau des nœuds voisins appartenant au maillage de fond commun. Leurs valeurs nodales impliquent des contributions des deux corps. A un nœud de contact potentiel i , un vecteur normal unité \mathbf{n}_i , orienté du corps β vers le corps α , est défini par le gradient de la masse nodale dans le corps individuel (Bardhagen et al. (2001); Huang et al. (2011)) :

$$\mathbf{n}_i = \frac{\hat{\mathbf{n}}_i^\beta - \hat{\mathbf{n}}_i^\alpha}{|\hat{\mathbf{n}}_i^\beta - \hat{\mathbf{n}}_i^\alpha|} \quad (3.23)$$

avec

$$\hat{\mathbf{n}}_i^\alpha = \frac{\sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{G}_p m_p^\alpha}{|\sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{G}_p m_p^\alpha|} \quad \text{et} \quad \hat{\mathbf{n}}_i^\beta = \frac{\sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{G}_p m_p^\beta}{|\sum_{p=1}^{N_p^e} \mathbf{G}_p m_p^\beta|} \quad (3.24)$$

où m_p^α et m_p^β représentent la masse du point matériel p dans les corps α et β , respectivement. En outre, un vecteur tangentiel unité \mathbf{t}_i est défini par :

$$\mathbf{t}_i = \frac{(\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) - (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{n}_i \mathbf{n}_i}{|(\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) - (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{n}_i \mathbf{n}_i|} \quad (3.25)$$

Tant que la vitesse relative normale v_n reste positive,

$$v_n = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{n}_i > 0, \quad (3.26)$$

la force normale répulsive f_n est égale à zéro. Mais quand $v_n = 0$, une force non-négative normale répulsive f_n est mobilisée au niveau du nœud de contact. Ces conditions définissent la condition de Signorini en vitesse comme le montre la figure 3.7(a) (Jean (1995); Brogliato (1999)).

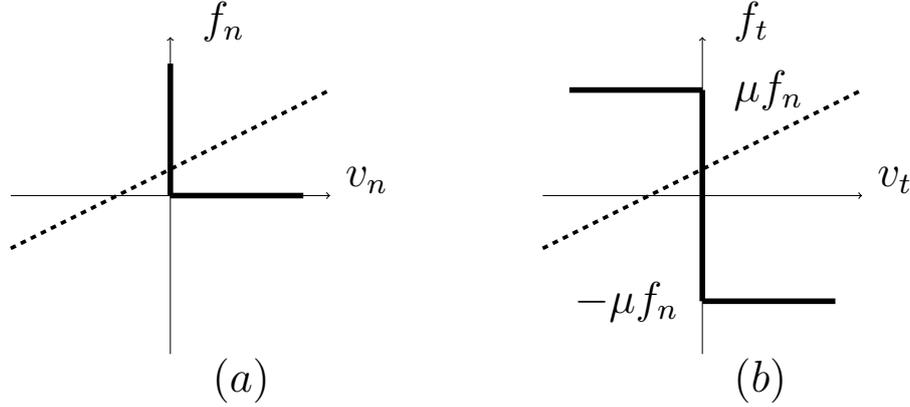


FIGURE 3.7 – Conditions de contact : (a) Condition de Signorini reliant la vitesse normale relative v_n et la force normale f_n ; (b) Loi de frottement de Coulomb reliant la vitesse de glissement v_t et la force de frottement f_t ; μ est le coefficient de frottement. Les lignes pointillées représentent des relations linéaires extraites des équations de la dynamique.

Afin de résoudre les équations du mouvement en même temps que la condition de Signorini en vitesse à tous les nœuds de contact potentiels, il est nécessaire d'exprimer les équations du mouvement en fonction des variables de contact f_n et v_n . Une telle relation peut être obtenue en combinant les équations du mouvement au niveau du nœud commun i :

$$m_i^\alpha \mathbf{a}_i^\alpha = \mathbf{F}_i^{\alpha, \text{int}} + \mathbf{F}_i^{\alpha, \text{ext}} + \mathbf{F}_i^{\text{C}, \alpha\beta} + \sum_{\gamma} \mathbf{F}_i^{\text{C}, \alpha\gamma}, \quad (3.27)$$

$$m_i^\beta \mathbf{a}_i^\beta = \mathbf{F}_i^{\beta, \text{int}} + \mathbf{F}_i^{\beta, \text{ext}} + \mathbf{F}_i^{\text{C}, \alpha\beta} - \sum_{\gamma} \mathbf{F}_i^{\text{C}, \gamma\beta}, \quad (3.28)$$

où $\sum_{\gamma} \mathbf{F}_i^{\text{C}, \alpha\gamma}$ et $\sum_{\gamma} \mathbf{F}_i^{\text{C}, \gamma\beta}$ sont des forces de contact des autres corps à ce nœud commun. A partir des équations ci-dessus, il est facile d'obtenir une relation linéaire entre f_n ($f_n = \mathbf{F}_i^{\text{C}, \alpha\beta} \cdot \mathbf{n}_i$) et v_n :

$$f_n = \frac{2}{\Delta t} \frac{m_i^\alpha m_i^\beta}{m_i^\alpha + m_i^\beta} v_n + k_n, \quad (3.29)$$

où k_n représente une force compensée dépendant d'autres forces de contact exercées par les corps voisins de α et β . Les forces normales à tous les nœuds de contact sont obtenues par une procédure itérative en intersectant cette relation linéaire avec le graphe de Signorini, comme le montre la figure 3.7(a).

Dans la même façon, la loi de frottement sec de Coulomb est une relation complémentaire entre la force de frottement f_t et la vitesse tangentielle v_t ($v_t = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{t}_i$) au nœud de contact ; voir figure 3.7(b). Comme le graphe de Signorini, la loi de Coulomb ne peut pas être réduite à une fonction à valeur unique. La force de frottement et la vitesse tangentielle peuvent être déterminées en exprimant les équations du mouvement en fonction des variables de contact f_t et v_t :

$$f_t = \frac{2}{\Delta t} \frac{m_i^\alpha m_i^\beta}{m_i^\alpha + m_i^\beta} v_t + k_t, \quad (3.30)$$

En intersectant cette dernière équation avec le graphe de Coulomb, la force de frottement f_t peut être calculée à tous les nœuds de contact simultanément dans la même procédure itérative utilisée pour calculer les forces normales. La convergence vers la solution à la fois pour les forces de contact et les contraintes internes est lisse, et une précision élevée peut être obtenue.

3.4 Compression diamétrale d'une particule

Nous étudions ici la précision et l'efficacité des modèles proposés en considérant le comportement d'une seule particule en utilisant les deux méthodes décrites plus haut. Nous allons aussi analyser les origines du comportement élasto-plastique de la particule BPM.

3.4.1 Les simulations

Nous avons réalisé des simulations BPM et MPM d'une particule de rayon $R = 5$ mm et comprimée entre deux parois rigides comme le montre la figure 3.8. La paroi inférieure est fixe et la paroi supérieure se déplace vers le bas à une vitesse constante de 0,2 m/s. Pour les simulations BPM, la particule est composée de 1750 particules primaires rigides. Les diamètres des particules primaires varient de 0,16 à 0,26 mm. Leurs interactions sont régies par l'équation (3.1) avec $F_0 = 100$ N, $\gamma = 7$.

Dans la MPM, les simulations ont été effectuées à deux dimensions dans le cadre des déformations planes. Le domaine de calcul est maillé avec des éléments quadrangulaires à quatre nœuds et une distribution initiale de quatre points matériels par élément a été utilisé. De plus, les points matériels ont été distribués de manière à répondre au mieux à la forme initialement circulaire de la particule comme le montre la figure 3.9b. Le module de Young, le coefficient de Poisson et la densité de la particule sont égales à $E = 10$ MPa, $\nu = 0,45$ et $\rho = 990$ kg/m³, respectivement. Le choix de la valeur de ν est motivé par la volonté de limiter les variations de volume comme pour les particules BPM. La faible compressibilité des particules implique que le changement de forme domine la déformation des particules. La résolution spatiale relative est $\xi = \frac{\Delta r}{R} = 0,029$, où Δr est la distance moyenne entre les points matériels.

Les particules déformées pour une déformation verticale $\varepsilon = 30$ % sont présentées sur les figures 3.9c et 3.9d avec des chaînes de force dans le premier cas et des contraintes von Mises

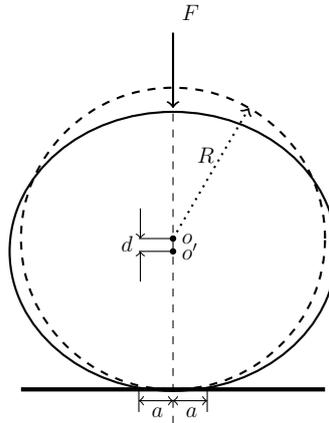


FIGURE 3.8 – Géométrie du problème de compression diamétrale d'une particule.

dans le second cas. Les courbures latérales pour les deux cas sont presque similaires à la rugosité de la surface de la particule BPM près. Une inspection de la zone de contact avec les parois révèle une ligne de contact parfaite de la particule BPM, reflétant un comportement plastique de cette particule, alors que la particule MPM ne touche les deux parois que sur un court segment au centre. Par conséquent, les contraintes à l'intérieur des particules sont différentes : presque homogène dans la particule BPM (aux inhomogénéités locales des chaînes de force près) et inhomogène avec des gradients le long de et perpendiculaire à l'axe vertical de la particule MPM. Dans ce cas, les contraintes les plus fortes sont localisées au centre de la particule déformée.

3.4.2 Relation force-déplacement

La figure 3.10 montre la contrainte verticale $\sigma = F/L$, où L est le diamètre horizontal de la particule à tout instant, en fonction de la déformation axiale cumulée $\varepsilon = \ln(1 + d/R)$; voir figure 3.8. La particule MPM montre un comportement élastique linéaire à faible déformation comme prédite par l'analyse d'Hertz pour un disque (Nezamabadi et al. (2015)) :

$$F = \frac{\pi}{4} \frac{E}{(1 - \nu^2)} R \varepsilon, \tag{3.31}$$

Une déviation du comportement linéaire est observée pour $\varepsilon > 0,05$. Cette faible gamme de déformation de Hertz (avec un exposant 3/2 en 3D et 1 en 2D) est généralement utilisée pour des simulations de dynamique moléculaire du comportement élastique des matériaux granulaires composés de particules sphériques (Thornton (1997); Makse et al. (2000); Silbert et al. (2007); Singh et al. (2015)). Une transition vers un régime linéaire avec une pente plus faible est observée au-delà de $\varepsilon = 0,15$.

La particule BPM se caractérise par une réponse linéaire aux petites déformations de l'ordre de 2% et un comportement plastique au-delà. La contrainte plastique seuil reste constante

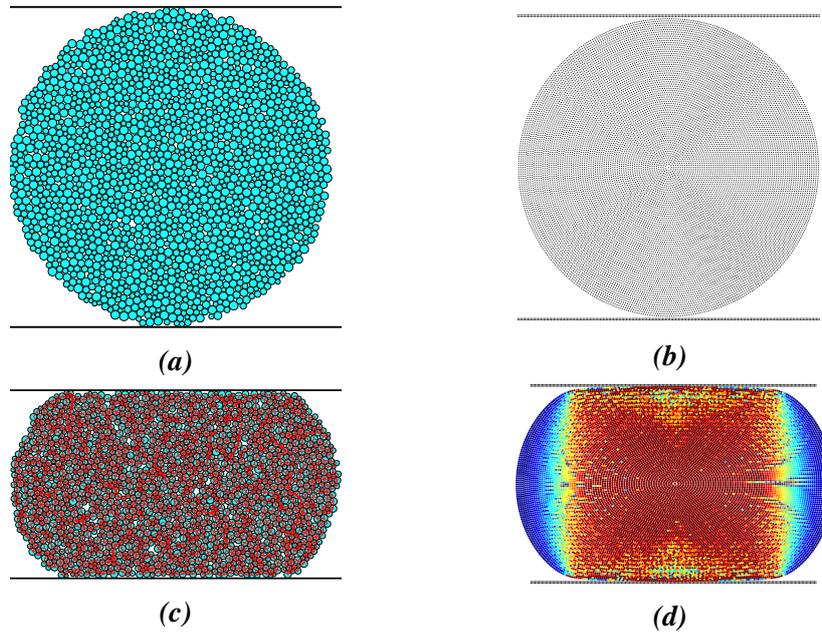


FIGURE 3.9 – La discrétisation d’une particule molle par le BPM (a) et la MPM (b) ; Les particules déformées pour la déformation verticale $\varepsilon = 30\%$ pour le BPM (c) et la MPM (d). En (c), l’épaisseur de la ligne rouge entre les particules primaires est proportionnelle à la valeur de la force répulsive normale. En (d), le code de couleur représente des contraintes von Mises aux points matériels variant de valeurs les plus faibles en bleu à des valeurs les plus grandes en rouge.

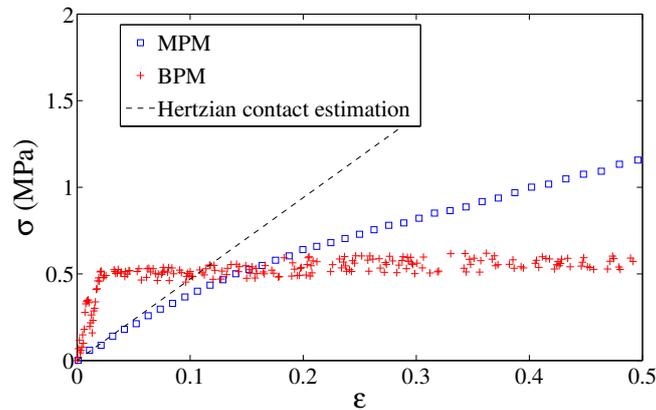


FIGURE 3.10 – La contrainte axiale en fonction de la déformation axiale cumulative pour une particule subissant une compression axiale à l’aide des simulations BPM et MPM.

et elle est presque égal à la contrainte caractéristique $p_I \simeq 0,5$ MPa. La déformation de la particule BPM dépend faiblement de la polydispersité de la taille des particules primaires. C’est ce que nous observons sur la figure 3.11 pour trois polydispersités de tailles différentes. Dans les

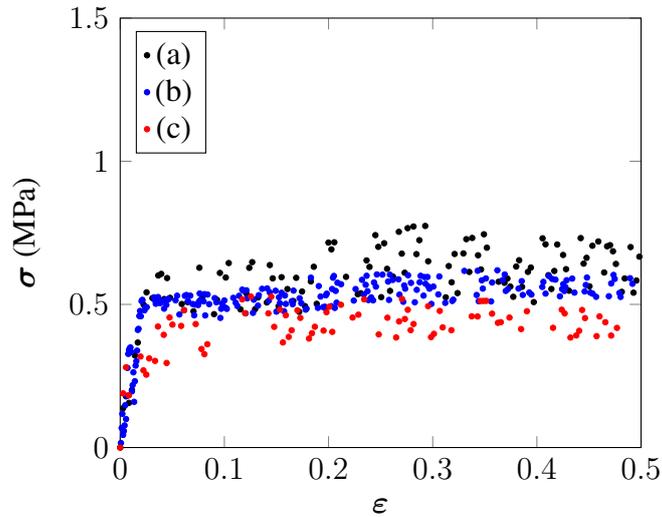


FIGURE 3.11 – La contrainte axiale en fonction de la déformation axiale cumulative pour trois particules BPM de même taille avec une distribution de tailles uniforme des particules primaires, mais avec différentes gammes de leurs diamètres : (a) 2400 particules primaires avec diamètres dans l'intervalle $[0, 1, 0, 24]$ mm, (b) 1750 particules primaires avec diamètres dans l'intervalle $[0, 16, 0, 26]$ mm et (c) 1300 particules primaires avec diamètres dans l'intervalle $[0, 22, 0, 28]$ mm.

trois exemples, les particules primaires ont une distribution uniforme de leur volumes, mais le rapport de taille entre les particules les plus grandes et les plus petites varie. La variation de la contrainte seuil reflète celle de $\langle a_0 \rangle$.

Pour illustrer la plasticité de la particule BPM, nous avons appliqué une décharge à deux niveaux de déformation (10% et 30%). La figure 3.12 montre que la contrainte diminue linéairement lors de la décharge avec une pente qui semble augmenter légèrement avec la déformation. La particule déformée après une décharge à partir de $\varepsilon = 30\%$ est présentée sur les figures 3.13 avec des chaînes de force. Notons que, malgré les chaînes de force présentes à l'intérieur de la particule, la contrainte macroscopique moyenne après décharge est nulle. Les chaînes, en effet, ne représentent que les forces de répulsion aux contacts entre particules primaires. A l'équilibre, ces forces sont compensées par les forces d'attraction mutuelles entre particules. La particule maintient sa forme à l'équilibre malgré l'annulation des contraintes appliquées.

3.4.3 Origines du comportement élasto-plastique des particules BPM

L'assemblage des particules primaires rigides sans frottement avec des forces d'attraction à distance, constitue un système caractérisé par une multitude d'états d'équilibre. Chaque état d'équilibre correspond à un minimum d'énergie potentiel du système et une configuration (une

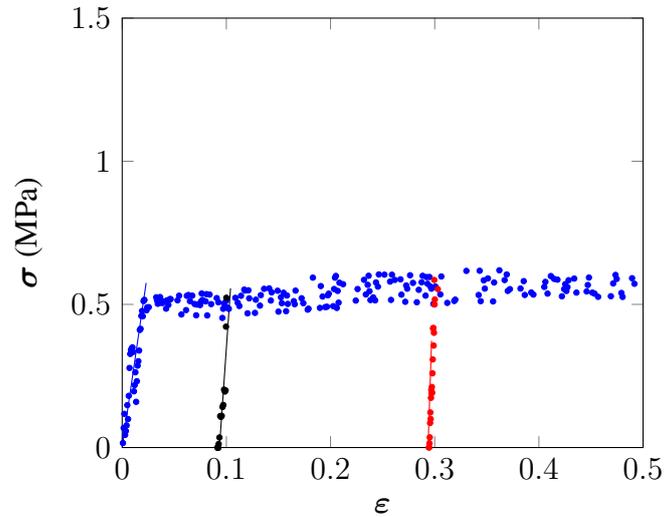


FIGURE 3.12 – La contrainte axiale en fonction de la déformation axiale cumulative pour une particule subissant une compression vertical suivi d’une décharge à partir de 10% et de 30% de déformation. Les simulations ont été réalisées par la BPM.

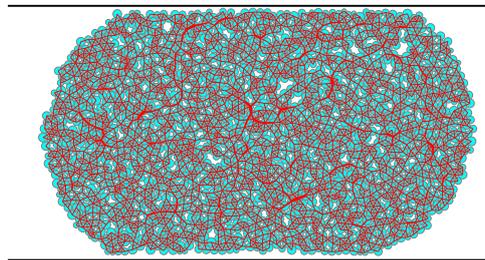


FIGURE 3.13 – Une image de la particule BPM après la décharge à partir d’une déformation verticale de $\epsilon = 30\%$. L’épaisseur des lignes rouges entre les particules primaires est proportionnelle à la valeur de la force de répulsion normale.

conformation dans le langage des polymères). Lorsque la particule est soumise à des forces extérieures, les particules primaires s’écartent de leur positions d’équilibre. Si l’écart est suffisamment faible, le système revient à sa configuration initiale après une décharge. Autrement, le système tend vers un état d’équilibre proche et la configuration change. La particule dans son ensemble présente donc un comportement élasto-plastique.

Le seuil plastique correspond à la contrainte nécessaire pour déplacer une particule primaire d’une distance nécessaire pour un changement de configuration. Cette distance est de l’ordre de la distance moyenne entre particules primaires $\langle a_0 \rangle$. Par ailleurs, la force nécessaire

pour ce déplacement est F_0 . Le seuil plastique est donc donnée par

$$\sigma_Y = \frac{F_0}{\langle a_0 \rangle} . \quad (3.32)$$

Ce seuil est égal à la contrainte caractéristique p_I introduit précédemment. Sur la figure 3.9, la valeur du seuil plastique 0,5 MPa est bien donnée par cette expression avec $F_0 = 100$ N et $\langle a_0 \rangle \simeq 0,2$ mm.

La première pente de la courbe de décharge sur la figure 3.12 correspond à un module élastique de $E' \simeq 25$ MPa. Comme le seuil plastique, ce module reflète les valeurs de F_0 et a_0 , mais aussi l'exposant γ . En effet, le module élastique pour la phase de décharge correspond à de très faibles déplacements de retour à l'équilibre des particules primaires, et dans cette limite la relation force-déplacement entre deux particules primaires se réduit à

$$F = \gamma F_0 \frac{\delta}{\langle a_0 \rangle} \simeq \gamma F_0 \varepsilon . \quad (3.33)$$

Dans l'hypothèse de déformations affines des particules primaires, le rapport $\delta/\langle a_0 \rangle$ est égal à la déformation macroscopique ε .

Par ailleurs, $F/\langle a_0 \rangle$ donne l'ordre de grandeur de la contrainte moyenne pour la force F . Pour être plus précis, il faut prendre en compte le réseau des contacts entre particules primaires pour le calcul de σ . L'expression du tenseur des contraintes permet en effet de montrer que la composante de la contrainte dans une direction donnée (ici verticale) est donnée par (Richefeu et al. (2007); Radjai et Richefeu (2009a)) :

$$\sigma = \frac{1}{2} n_c \ell \langle F \rangle , \quad (3.34)$$

où n_c est la densité numérique des contacts et ℓ est la longueur moyenne des vecteurs branches reliant les centres des particules (primaires). n_c peut être évalué à partir du nombre de coordination z' et de la taille moyenne des particules primaires, ce qui donne $n_c = z' \phi' / (\pi \langle a_0 \rangle^2)$, où ϕ' est la compacité interne (pour l'assemblage de particules primaires). En posant $\ell = \langle a_0 \rangle$, on obtient l'expression de la contrainte en fonction de la force F :

$$\sigma = \frac{z' \phi'}{\pi \langle a_0 \rangle} F . \quad (3.35)$$

En introduisant l'expression de F (3.33) dans la relation (3.35), on obtient une relation linéaire entre σ et ε :

$$\sigma = E' \varepsilon , \quad (3.36)$$

avec le module E' donné par

$$E' = \frac{\gamma z' \phi' F_0}{\pi \langle a_0 \rangle} = \frac{\gamma z' \phi'}{\pi} \sigma_Y . \quad (3.37)$$

Comme les particules primaires sont sans frottement, elles constituent un système isostatique avec $z' = 4$. Pour la même raison, leur compacité est de l'ordre de la compacité RCP $\phi' \simeq 0,8$ pour un ensemble légèrement polydisperse. On trouve donc un facteur $\gamma z' \phi' / \pi \simeq 7$ entre E' et σ_Y . Ce facteur est nettement (d'un facteur de 7) plus faible que la valeur mesurée sur la figure qui, pour la première décharge, donne $E' / \sigma_Y \simeq 25 / 0,5 = 50$. Cette différence suggère que les déplacements de retour à l'équilibre ne sont pas répartis de manière affine dans tout le volume. En considérant, par exemple, un fraction de 7% seulement de paires de particules primaires, on retrouve le bon rapport. En d'autres termes, les déplacements relatifs pendant la décharge sont localisés sur une fraction de 7% de paires de particules.

En raison de leurs interactions cohésives, les particules présentent aussi une *tension surfacique* ou énergie de surface γ_s . En 2D, l'unité de γ_s est celle d'une force. En effet, l'énergie nécessaire pour arracher une particule primaire de la surface d'une particule est approximativement donnée par $\gamma_s \simeq F_0 \langle a_0 \rangle / \langle a_0 \rangle = F_0$. L'effet de cette énergie de surface est de tendre à arrondir les angles. La longueur élasto-capillaire théorique correspondante est donnée par (Mora et al. (2013)) :

$$\frac{\gamma_s}{E'} \simeq \frac{\pi \langle a_0 \rangle}{\gamma z' \phi'} \simeq \frac{1}{7} \langle a_0 \rangle . \quad (3.38)$$

Comme E' est sous-évalué par son expression théorique, la valeur réelle de cette longueur est encore plus petite (d'un facteur 7) que cette valeur théorique. Elle est donc pratiquement négligeable devant la taille des particules.

3.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons proposé deux approches numériques pour modéliser le comportement des matériaux à particules molles. La première approche est le modèle des particules liées (BPM) qui repose sur la représentation des particules molles par des agrégats de particules primaires rigides interagissant via une force de répulsion aux points de contact et une force d'attraction entre les centres de particules jusqu'à une distance de coupure de l'ordre du diamètre d'une particule. Dans cette thèse, la force répulsive de contact est traitée en utilisant la méthode de dynamique des contacts (CD). Pour la force d'attraction, une loi de force de Lennard-Jones est introduite. La deuxième approche est la méthode des points matériels (MPM) qui consiste en une discrétisation des particules en points matériels. Nous avons développé une formulation implicite de la MPM combinée avec la méthode CD pour le traitement des contacts frottants.

Nous avons montré, par la compression diamétrale d'une particule, que les particules MPM se comportent comme les particules purement élastique (car un comportement élastique est considéré dans la formulation) alors que les particules BPM ont un comportement élasto-plastique avec un seuil qui peut être évalué à partir des interactions entre particules primaires. Notons que, dans le cadre de la MPM, nous nous sommes limités ici à une loi de comportement élastique linéaire dans cette thèse. Mais les lois de comportement inélastique et/ou non-linéaire (l'hyper-élasticité, la plasticité. . .) peuvent être mise en œuvre dans cette méthode. Pour cela, la

MPM offre une alternative plus fiable aux méthodes DEM avec l'avantage de permettre la prise en compte du comportement individuel réel des particules. Notre algorithme MPM-CD fournit donc un outil de simulation important pour les grandes déformations des particules.

Par ailleurs, la BPM avec des particules molles étend considérablement la portée de la DEM dans son application aux SPM. Le comportement des particules molles peut être calibré ou modifié en jouant sur les interactions entre les particules primaires ou en utilisant ces particules avec différentes formes et différentes distributions de tailles. En substance, les contacts entre les particules primaires représentent rien de plus que des potentiels répulsifs très durs qui se produisent entre les molécules. Pour cette raison, la BPM peut être appliquée à des entités colloïdales en interaction par un potentiel effectif attractif.

Compression uniaxiale d'un assemblage de particules molles

Sommaire

4.1	Le système simulé	58
4.2	Relations déformation-contrainte	58
4.3	Evolution de la microstructure	62
4.3.1	Connectivité des particules	62
4.3.2	Evolution des formes des particules	66
4.4	Distribution des efforts de contact	69
4.5	Conclusions	70

Dans le chapitre précédant, les deux approches MPM and BPM ont été proposées pour la modélisation des SPM. Dans ce chapitre, nous appliquons ces techniques au problème de compaction uniaxiale d'un assemblage de particules molles. Cet assemblage peut potentiellement atteindre des compacités élevées par changement de forme des particules. Nous allons montrer que la MPM et le BPM permettent de simuler la compaction au-delà de la compacité RCP. Nous étudions l'évolution de différentes variables de texture de l'assemblage (la compacité, la connectivité. . .) et leurs différences pour les deux méthodes. Comme nous le verrons, les deux méthodes conduisent à des textures similaires, mais la loi de comportement (élastique vs. plas-

tique) des particules individuelles affecte l'évolution de l'assemblage. Nous allons également considérer les contacts avec et sans frottement entre les particules. Mais on verra que ce frottement n'est pas effectif dans le cas des simulations BPM en raison de l'absence de frottement entre particules primaires.

4.1 Le système simulé

Nous considérons un assemblage de 300 particules circulaires en 2D, confinées dans une boîte rectangulaire de largeur L dont seule la paroi supérieure est mobile. Une faible polydispersité de taille (diamètres $\in [1, 4, 2, 4]$ mm) est introduite afin d'éviter la mise en ordre longue distance des particules. Dans configuration initiale, les particules sont réparties de manière assez dense dans la boîte. A partir de cette configuration initiale, on simule la compaction en déplaçant la paroi supérieure vers le bas à une vitesse constante de 5 m/s et un pas de temps de $\delta t = 0,1 \mu s$. La gravité est négligée afin d'éviter des gradients de contrainte supplémentaires. Deux cas sont étudiés : 1) sans frottement et 2) avec un coefficient de frottement $\mu = 0,5$ entre les particules (le frottement entre les particules et les parois, et entre particules primaires du BPM étant nul).

Dans les simulations BPM, les particules de l'assemblage sont discrétisées par 100 000 particules primaires rigides non-frottantes de densité 2000 kg/m^3 et de polydispersité de taille avec diamètres $\in [0,07, 0,13]$ mm. Ainsi, chaque particule est composée d'un minimum de 200 particules primaires ; voir figure 4.1a). La relation (3.1) définit les interactions entre les particules primaires dans chaque particule avec $F_0 = 100 \text{ N}$ et $\gamma = 7$.

Les simulations MPM ont été effectuées à deux dimensions dans le cadre de l'hypothèse des déformations planes. Le domaine de calcul est maillé par des éléments quadrangulaires à quatre nœuds et une distribution initiale de quatre points matériels par élément a été utilisée. Les parois de la boîte sont également modélisées en utilisant la MPM. Une loi de comportement élastique linéaire a été considérée pour chaque particule avec le module de Young $E = 10 \text{ MPa}$, coefficient de Poisson $\nu = 0,45$ et densité $\rho = 990 \text{ kg/m}^3$. La résolution spatiale relative pour chaque particule est $\xi = 0,17$; $\xi = \frac{\Delta r}{R}$, où Δr est la distance moyenne entre les points matériels et R indique le rayon d'une particule ; voir la figure 4.1d.

4.2 Relations déformation-contrainte

Les figures 4.1a-f montrent trois états de compaction au cours de la compression uniaxiale pour les simulations BPM 4.1a-c et MPM 4.1d-f. Dans ces simulations, le coefficient de frottement entre les particules et entre les particules et les parois est zéro. Etant donné que la compaction débute par un assemblage de particules non bloquées, au cours de la phase initiale de la compaction, des nouveaux contacts se forment entre les particules jusqu'à ce qu'elles se bloquent et la contrainte verticale commence à croître.

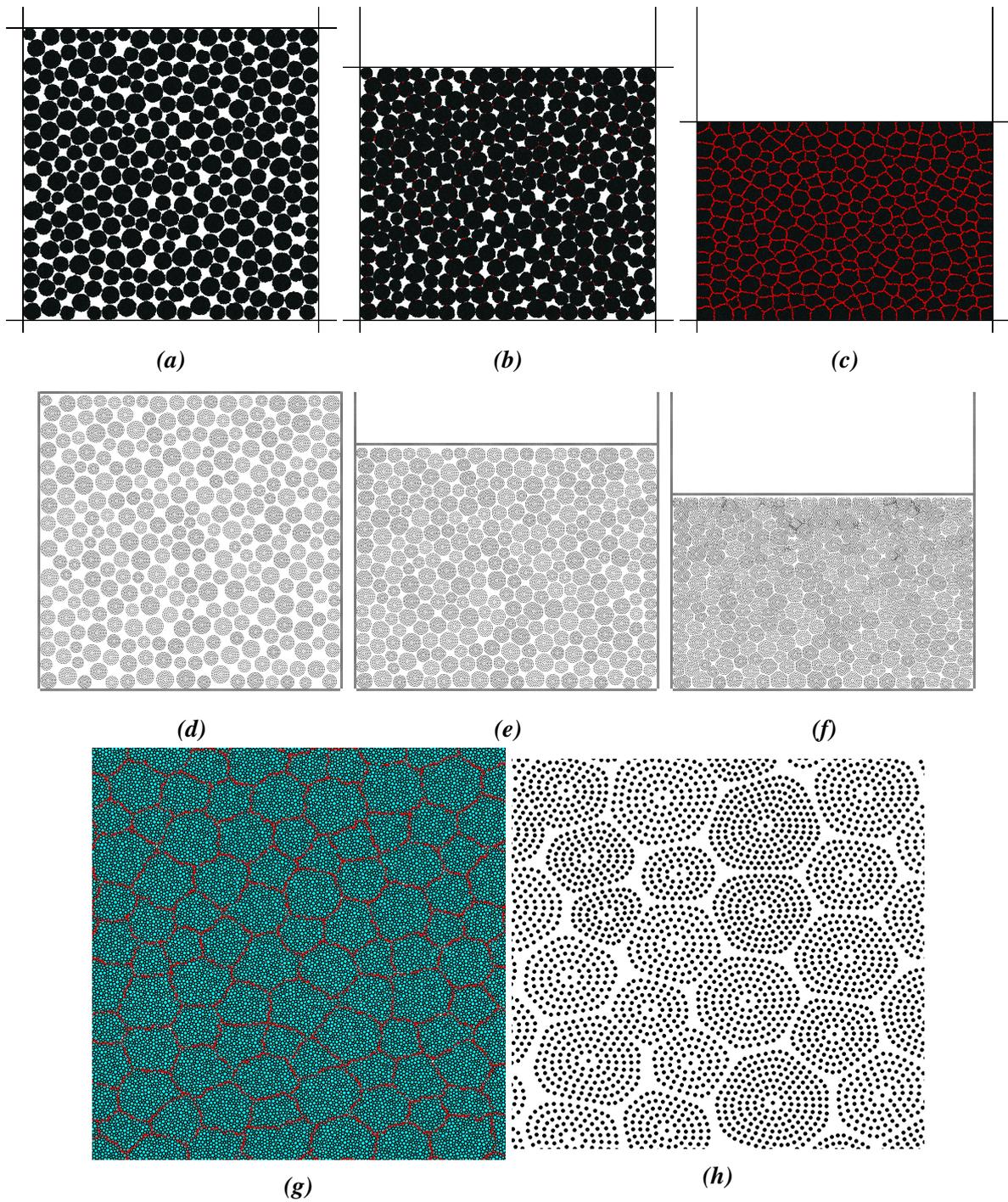


FIGURE 4.1 – Trois états de compaction au cours de la compression uniaxiale d'un assemblage de particules molles simulé par les approches BPM (a-c) et MPM (d-f); Zoom sur les images BPM (g) et MPM (h). Les cercles pleins sont des points matériels dans la MPM et les particules primaires rigides dans le BPM.

A partir de ce point, la compacité augmente à cause de la déformation des particules. A la fin de la compaction, tout l'espace est presque rempli par les particules déformées. Au cours de la compaction, des nouveaux contacts peuvent encore s'établir entre les particules et les surfaces de contact (longueurs en 2D) croissent avec la déformation. Les formes des particules changent graduellement d'une forme circulaire à une forme presque polygonale comme on peut voir sur la figure 4.1g-h. Notons que les gaps apparents observés sur les clichés des simulations MPM entre les particules sont liés à la résolution spatiale.

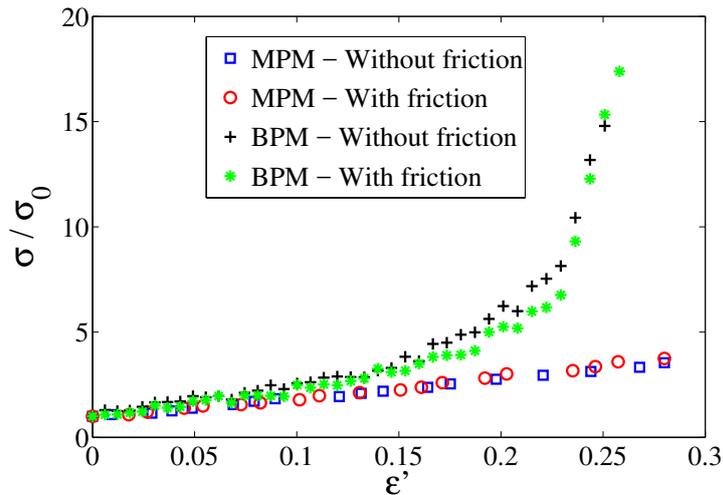


FIGURE 4.2 – La contrainte verticale σ normalisée par la contrainte de consolidation σ_0 en fonction de la déformation verticale cumulée ϵ' pour les assemblages des particules frottantes et non-frottantes par les simulations BPM et MPM.

La figure 4.2 montre la contrainte verticale σ , calculées à partir des forces agissant sur la paroi inférieure et normalisée par la contrainte de consolidation σ_0 , définie pour une compacité Φ_0 , en fonction de la déformation verticale cumulée $\epsilon' = \ln(1 + \Delta h/h_0)$. Le couple (σ_0, Φ_0) définit un état de référence. Nous avons choisi $\Phi_0 = 0,8$ qui correspond au début de blocage des particules (voir section 4.3.1). Dans les simulations MPM, la relation entre la contrainte et la déformation cumulée est linéaire, ce qui reflète, comme nous allons voir plus bas, le comportement linéaire de chaque particule et le fait que la déformation est liée au changement de forme des particules. En revanche, dans les simulations BPM, la contrainte verticale augmente à un taux croissant avec ϵ' comme dans la compaction des poudres métalliques (figure 2.13). Dans les deux cas, le frottement entre particules a peu d'effet sur la déformation.

La figure 4.3 montre l'évolution de la compacité Φ en fonction de la contrainte axiale. La compacité de l'échantillon BPM est calculée en considérant les volumes des particules définis à partir des particules primaires appartenant à leurs contours. Les micro-pores entre particules primaires ne sont pas comptées. Dans les simulations MPM, la compacité est une fonction linéaire de σ jusqu'à des niveaux très élevés de la compacité tandis que dans les simulations BPM une augmentation presque exponentielle de la compacité est observée. Trois facteurs contrôlent

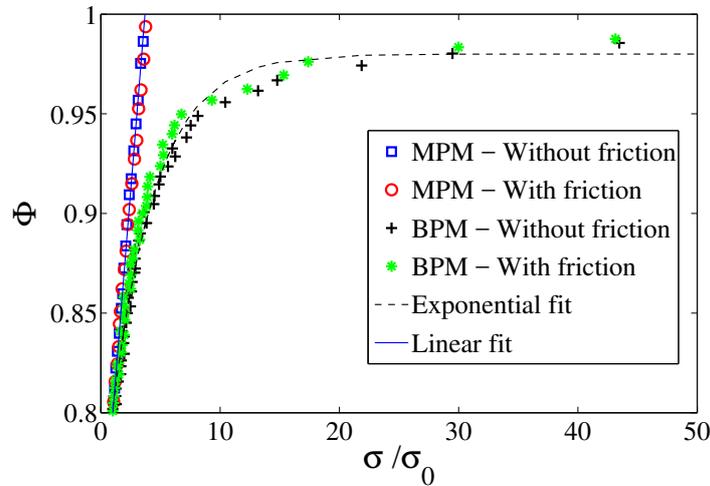


FIGURE 4.3 – La compacité en fonction de la contrainte axiale normalisée pour les assemblages de particules sans et avec frottement. Les lignes pointillée et solide indiquent les prédictions des modèles simples de compaction introduits dans ce chapitre ; voir les équations (4.1) et (??).

cette évolution : (1) le changement de volume élastique et/ou plastique des particules, (2) les réarrangements des particules et (3) les changements de forme des particules. Seul ce dernier permet à la compacité de dépasser considérablement la compacité RCP. La comparaison entre les deux figures 4.3 et 4.2 suggère que les particules ne changent pratiquement pas de volume et les réarrangements à partir du point de référence considéré ne sont pas significatifs. La déformation est donc liée au changement de forme des particules (la compacité varie linéairement avec la déformation axiale).

Pour décrire quantitativement l'évolution de la contrainte verticale dans le cas BPM, nous faisons l'hypothèse que toutes les particules sont au seuil plastique. La variation $d\sigma$ de la contrainte se traduit donc par une variation de la surface (longueur) de contact entre particules et donc par une variation $d\Phi$ de la compacité. On peut aussi faire l'hypothèse que l'effort nécessaire est proportionnelle au volume disponible et donc à la porosité $1 - \Phi$ de l'échantillon. Dans cette approximation linéaire, nous avons donc $d\Phi \propto (1 - \Phi)d\sigma$, ce qui conduit à une augmentation exponentielle de Φ en fonction de σ :

$$\Phi = 1 - (1 - \Phi_0)e^{-\alpha(\frac{\sigma}{\sigma_0} - 1)}, \quad (4.1)$$

où α est un paramètre qui caractérise la compressibilité de l'assemblage. La figure 4.3 montre qu'une forme exponentielle ajuste assez bien les données des simulations BPM jusqu'à une compacité $\Phi \simeq 0.98$ avec $\alpha \simeq 0.27$. Au-delà de cette limite, les pores entre les particules sont presque de même taille que les pores à l'intérieur des particules. Pour cette raison, l'évaluation de la compacité dans cette plage dépend de la convention utilisée pour la détermination de

l'interface entre les particules. En d'autres termes, la compacité peut varier d'une valeur qui est égale à la porosité le long de toutes interfaces particule-particule.

Dans le cas des simulations MPM, puisqu'un modèle élastique linéaire a été utilisé pour les particules déformables, l'assemblage se comporte comme un milieu élastique avec un module d'élasticité isostatique K reliant l'évolution du volume dV à l'incrément de la contrainte $d\sigma$:

$$K \frac{dV}{V} = -d\sigma . \quad (4.2)$$

Le signe négatif est dû à la convention que les contraintes compressives et les contractions sont comptées positivement. Il est plausible de considérer une déformation uniforme, les mêmes pour les particules et pour les pores, de sorte que la règle de mélange de Voigt s'applique (Torquato (2002)). Par conséquent, le module d'élasticité isostatique effectif augmente proportionnellement à la compacité : $K = \Phi K_P$, où K_P est le module d'élasticité isostatique d'une particule (en 2D, $K_P = E/2(1 - \nu)$). On notera que cette dernière relation n'est valable que pour les déformations n'excédant pas 15% de la déformation d'une particule, comme on l'avait vu sur la figure 3.10. Mais son extension jusqu'à 25% de déformation, nécessaire pour le remplissage complet des pores, paraît comme une bonne approximation. Donc, nous avons $d\sigma = -K_P V_p dV/V^2$ où V_p est le volume total des particules. En supposant de plus que la variation du volume des particules V_P est du second ordre par rapport au changement de forme des particules, on obtient

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{\sigma_0}{K_p} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} - 1 \right) \equiv \beta \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} - 1 \right) . \quad (4.3)$$

avec $\beta \simeq 0.08$. C'est une relation linéaire entre la compacité et la contrainte normalisée, comme observée sur la figure 4.3.

4.3 Evolution de la microstructure

La microstructure d'un assemblage de particules molles peut être caractérisée en termes de variables géométriques habituelles dans les milieux granulaires telles que le nombre de coordination et l'anisotropie du réseau des contacts. Mais elle présente aussi des aspects spécifiques aux particules déformées tels que l'aire de contact moyenne et l'anisométrie des particules. Nous allons analyser dans cette section ces propriétés pour nos assemblages simulés.

4.3.1 Connectivité des particules

La microstructure de l'assemblage peut être caractérisée à l'ordre le plus bas, comme dans le cas des particules rigides, par son nombre de coordination Z . Pour les déformations de l'assemblage au-dessus de 20%, les particules sont suffisamment déformées pour que les contacts ne puissent plus être décrits comme des contacts ponctuels. Dans ce régime, la forme des particules (même pour les particules plastiques de BPM) peut être bien approximée par des polygones, comme on peut voir sur la figure 4.1, et Z représente alors le nombre de côtés de ces

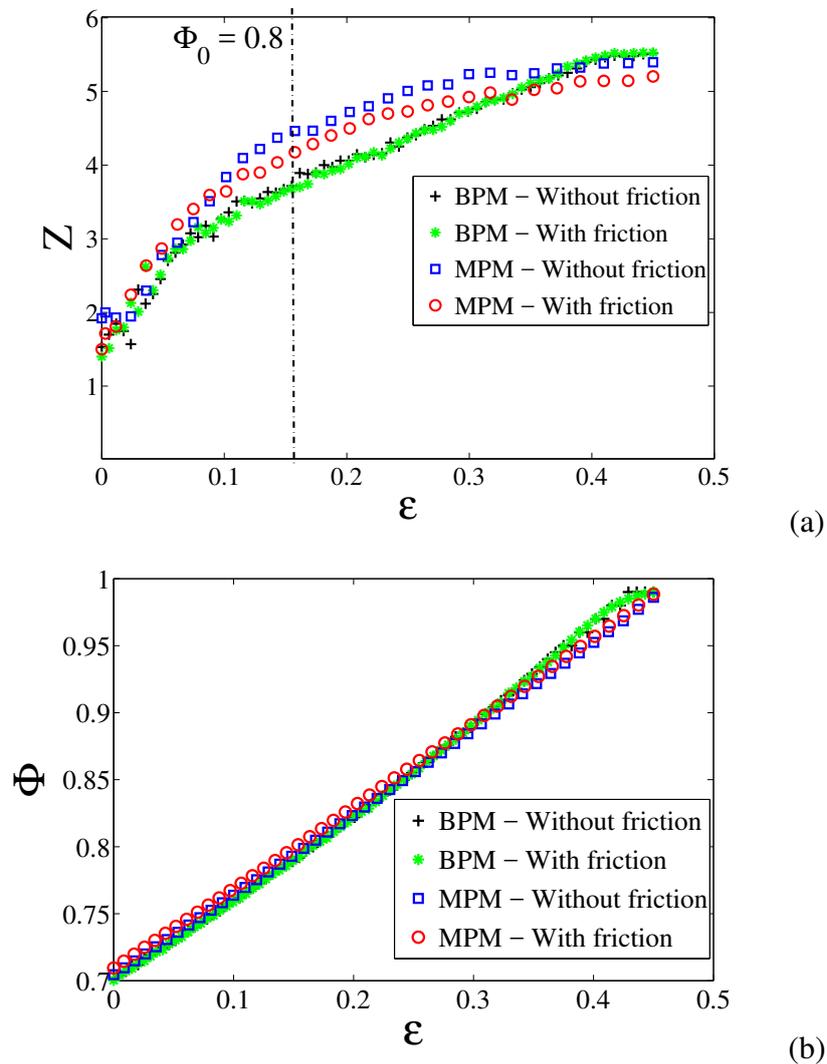


FIGURE 4.4 – Evolution du nombre de coordination Z (a) et de la compacité Φ (b) en fonction de la déformation verticale cumulée ε pour les assemblages de particules sans et avec frottement par les simulations BPM et MPM.

polygones. Les lignes de contact forment un réseau avec des vertex à trois branches, comme dans une mousse 2D, avec des angles souvent proches de 120° . Pour une faible polydispersité de tailles des particules, chaque particule est souvent entourée par 6 voisines, mais on y trouve aussi des particules avec 5 and 7 voisines.

La figure 4.4 montre Z et Φ en fonction de la déformation verticale cumulée ε définie à partir du début des simulations. La compacité Φ est une fonction presque linéaire de ε . En effet, comme le volume des particules ne varie pas, nous avons $\Phi = \Phi_0 e^\varepsilon \simeq \Phi_0(1 + \varepsilon)$. Ici, $\Phi_0 \simeq 0,7$. Dans le cas des particules MPM, le comportement est élastique linéaire, et donc

les petits pores qui restent pour les compacités élevées ne peuvent être remplis que pour des contraintes beaucoup plus élevées (impliquant des rayons de courbure de plus en plus petites). En revanche, dans les simulations BPM, les pores peuvent être remplis plus facilement par la déformation plastique des particules pour un niveau de contrainte beaucoup plus faible. Le processus de remplissage des pores est similaire dans les deux approches MPM et BPM tant que la taille des pores entre particules est supérieure à la taille des particules primaires. La limite où les tailles des pores internes des particules sont du même ordre que les pores à l'interface entre deux particules, correspond à la compacité de 0,93 dans les simulations BPM. La valeur de Z dans ce régime est $Z_1 \simeq 5,5$ dans toutes les simulations. Cette valeur reflète la faible polydispersité de taille des particules.

Le nombre de coordination moyen Z augmente avec ε . Dans les simulations BPM, nous n'observons pas de différence entre particules frottantes et non-frottantes et le nombre de coordination se stabilise pour une déformation de 40%. Dans les simulations MPM, nous observons des valeurs légèrement plus élevées de Z pour les particules non-frottantes. La transition de blocage a lieu pour $\varepsilon \simeq 0,08$ où $Z \simeq 3$ et $\Phi \simeq 0,75$. A partir de cet état, la contrainte verticale σ se met à augmenter. Cependant, l'assemblage reste fragile (réarrangements des particules) jusqu'à une compacité critique de $\Phi_0 \simeq 0,8$ pour une contrainte σ_0 que nous avons appelée *contrainte de consolidation* et que nous avons utilisée pour mettre à l'échelle les contraintes (voir la section 4.2).

Le fait que le frottement entre les particules n'ait aucun effet sur Z et Φ dans les simulations BPM est une simple conséquence de l'absence de frottement entre les particules primaires. En effet, la force de frottement au niveau du contact entre deux particules primaires aux frontières de deux particules en contact ne peut pas être mobilisée car ces particules primaires peuvent tourner librement sans dissipation. Afin de permettre au frottement de s'exprimer au niveau des contacts entre les particules, il est nécessaire d'introduire une résistance au roulement entre les particules primaires appartenant à chaque particule. Cette résistance doit être suffisamment grande pour empêcher les rotations relatives des particules primaires sous l'action des contraintes de cisaillement (Bratberg et al. (2002); Taboada et al. (2006); Estrada et al. (2008)). Il est intéressant de noter que, comme le montre la figure 4.4, dans les simulations MPM, la compacité est la même dans les cas avec ou sans frottement à tous les niveaux de déformation alors que Z est plus élevé dans le cas sans frottement. Cet effet est observable à partir du point de blocage $\Phi \simeq 0,75$.

La figure 4.5 montre l'évolution de Z en fonction de la compacité pour les deux approches et les deux cas avec ou sans frottement. On voit qu'en normalisant $Z - Z_0$ par $Z_1 - Z_0$, où Z_0 est le nombre de coordination correspondant à $\Phi \simeq 0,8$ et Z_1 à $\Phi \simeq 1$, tous les points de données se superposent et une loi de puissance ajuste bien la courbe. Au-delà de Φ_0 , le nombre de coordination Z augmente comme une loi de puissance en $(\Phi - \Phi_0)^{0.5}$ comme dans le cas des émulsions et des mousses (O'Hern et al. (2003); van Hecke (2010); Zhang et al. (2010)); voir figure 2.11. Cette dépendance du nombre de coordination par rapport à la compacité est assez robuste et pratiquement indépendante du potentiel d'interaction, de la polydispersité ou du frottement (O'Hern et al. (2003)).

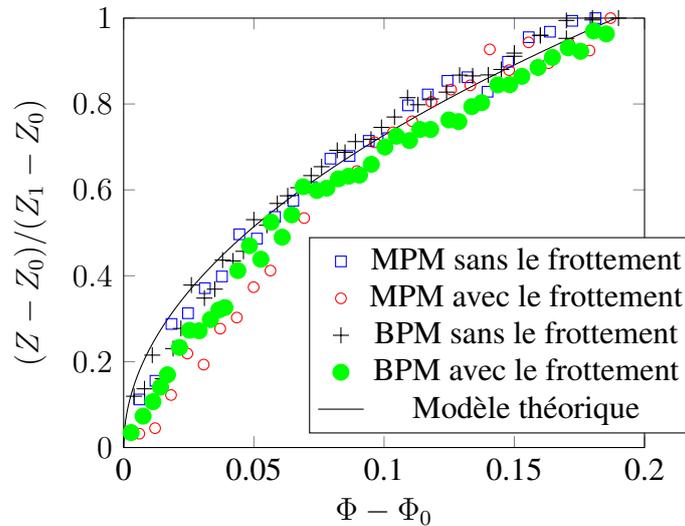


FIGURE 4.5 – Evolution du nombre de coordination moyen Z en fonction de la compacité Φ . La ligne est une loi de puissance en $(\Phi - \Phi_0)^{0.5}$.

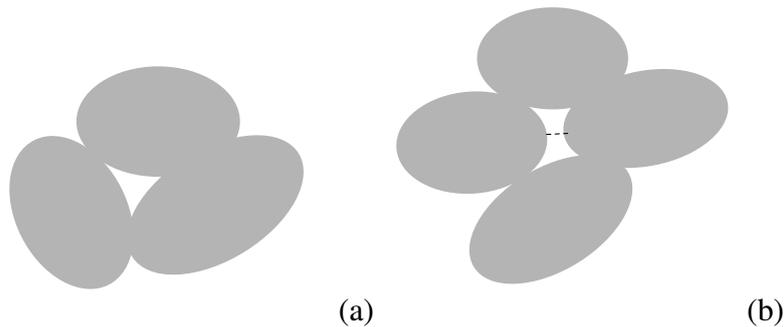


FIGURE 4.6 – Un pore entre trois particules déformables (a) et quatre particules déformables (b).

Le gain continu de contacts dans un système aussi dense peut paraître surprenant dans la mesure où les particules ne bougent pas. Mais c'est précisément la déformation des particules qui est responsable de l'apparition de nouveaux contacts. Considérons le schéma de la figure 4.6 qui représente deux pores : un entre trois particules et un autre entre quatre particules. Les trois particules sont en contact les unes avec les autres. Pendant que les trois particules se déforment, la taille du pore diminue mais le nombre de contacts ne change pas. Par contraste, dans le cas du pore entre quatre particules, toutes les particules ne sont pas en contact et il y a donc un potentiel de gain de contact entre deux particules situées de part et d'autre du pore. Le gain de contacts est donc un processus de transformation des boucles (ou cycles) à 4 ou plus de contacts vers des boucles à 3 contacts.

4.3.2 Evolution des formes des particules

Pour nos particules presque incompressibles, le changement de forme des particules est le facteur principal de l'évolution de la compacité. Pour caractériser ces déformations, nous allons analyser la surface spécifique moyenne de contact S , l'anisotropie d'orientation A_m , et le rapport d'aspect moyen α des particules dans les simulation BPM et MPM. Ces variables sont définies par les expressions suivantes :

$$S = \frac{\sum_{p=1}^{N_P} S_p^C}{\sum_{p=1}^{N_P} \pi D_p}, \quad (4.4)$$

$$\alpha = \frac{1}{N_P} \sum_{p=1}^{N_P} \frac{l_{1p}}{l_{2p}}, \quad (4.5)$$

$$A_m = 2(G_1 - G_2). \quad (4.6)$$

Dans ces relations, N_P est le nombre total des particules, et D_p et S_p^C représentent le diamètre et la surface de contact de la particule p , respectivement. l_{1p} et l_{2p} sont les dimensions maximale et minimale de la particule p , représentant ses longueurs le long de ses axes principaux x_1 et x_2 ; voir la figure 4.7. A_m est l'anisotropie d'orientation des particules définie à partir des valeurs propres G_1 et G_2 ($G_1 > G_2$) du tenseur d'orientation \mathbf{G} :

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \frac{1}{N_P} \sum_{p=1}^{N_P} \cos^2(\theta_p) & \frac{1}{N_P} \sum_{p=1}^{N_P} \cos(\theta_p) \sin(\theta_p) \\ \frac{1}{N_P} \sum_{p=1}^{N_P} \cos(\theta_p) \sin(\theta_p) & \frac{1}{N_P} \sum_{p=1}^{N_P} \sin^2(\theta_p) \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

où θ est l'orientation de la particule illustrée sur la figure 4.7.

Sur la figure 4.8, nous avons tracé la surface spécifique S , l'anisotropie d'orientation A_m et le rapport d'aspect moyen α en fonction de la compacité Φ . Ces grandeurs augmentent globalement avec Φ à la fois dans les simulations MPM et BPM, mais avec des taux différents. Mais on peut distinguer plus précisément trois régimes dans les deux cas, comme indiqué sur la figure 4.8. Même si on observe des différences notables entre les deux approches, les valeurs de transition entre ces régimes coïncident assez bien. Le premier régime correspond à $\Phi < 0,78$ (avant l'état de blocage). Le deuxième régime concerne l'intervalle $0,78 < \Phi < 0,95$. Le troisième régime correspond aux compacités élevées $\Phi > 0,95$. Ces valeurs de Φ sont approximatives en raison de la précision numérique.

Dans le premier régime, la configuration des particules évolue en raison des réarrangements des particules. On notera que la valeur de l'anisotropie A_m dans ce régime n'est pas

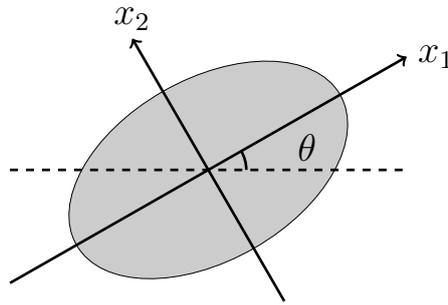


FIGURE 4.7 – Schéma d'une particule déformée avec son orientation θ et ses axes principaux x_1 et x_2 .

significative. Cette valeur correspond à de très faibles déformations des particules. Par ailleurs, les particules BPM avec différentes tailles ont été créées à partir du même échantillon des particules primaires. Cela conduit à une orientation privilégiées pour ces particules.

L'évolution de S , A_m et α est due à l'allongement des particules dans le second régime ($0,78 < \Phi < 0,95$). Ici, bien que la surface spécifique de contact S varie approximativement au même taux pour les cas sans et avec le frottement, l'anisotropie d'orientation A_m et le rapport d'aspect α croissent avec un taux plus élevé pour le cas avec le frottement par rapport au cas sans le frottement. Le frottement entre les particules permet des chaînes de contrainte plus fortes et plus linéaires de se former par rapport aux particules sans frottement. Par conséquent, dans le cas frottant les particules sont plus allongées (Nezamabadi et al. (2015)).

Dans le troisième régime ($\Phi > 0,95$), les particules s'enchevêtrent fortement et elles ne peuvent plus se déplacer. Elles se déforment individuellement de façon élastique pour les particules MPM et plastique pour les particules BPM. Ainsi, S , A_m et α varient à un rythme plus lent que dans le second régime pour les particules MPM tandis que pour les particules BPM, ces paramètres évoluent à un taux plus élevé.

Comme les volumes des particules ne changent pas au cours de la déformation, les variations du rapport d'aspect reflète la déformation des particules. Cette déformation moyenne des particules est donnée par

$$\eta = \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}. \quad (4.8)$$

Cette déformation varie de 0 pour une particule circulaire à 1 pour une particule complètement écrasée. Par ailleurs, comme la valeurs de A_m peuvent être insignifiantes pour les faibles déformations des particules, il est plus pertinent de la pondérer par la valeur de η . On définit

$$A_\eta = \frac{1}{2}\eta A_m. \quad (4.9)$$

Cette grandeur mesure en fait l'anisotropie associée au changement de forme. On peut en particulier distinguer deux limites. Si l'anisotropie A_m est très faible, alors A_η aussi reste faible

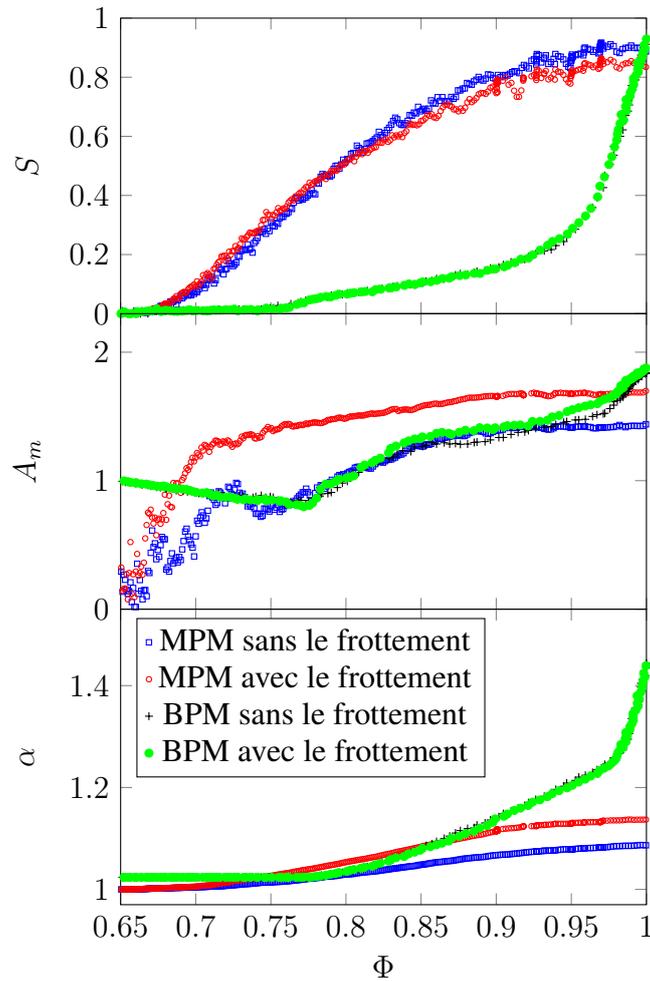


FIGURE 4.8 – L'évolution de la surface spécifique moyenne de contact, de l'anisotropie d'orientations et du rapport d'aspect moyen en fonction de la compacité.

même si les particules sont très déformées. Dans l'autre limite, si les particules se déforment peu (η faible), alors A_η est toujours faible même lorsqu'elles ont une orientation privilégiée.

La figure 4.9 montre la variation de η et de A_η . On observe clairement les trois régimes marqués par un premier régime où $A_\eta \simeq 0$ suivi d'une transition de blocage à $\Phi \simeq 0,78$ à partir de laquelle A_η augmente d'une manière quasi-linéaire avec Φ . Pour $\Phi > 0,95$, on observe une augmentation brutale de A_η dans les simulations BPM et une stagnation dans le cas MPM. On voit aussi que A_η ne pose aucun problème dans le premier régime car, contrairement à la variable A_m , sa valeur n'est pas sensible aux détails de mesure ou aux défauts des particules.

Comme la microstructure met clairement en évidence trois régimes bien distincts, il est normal de chercher leurs signatures sur les courbes déformation-contrainte. On retrouve en effet ces trois régimes sur les figures de la section 4.2 pour les simulations BPM notamment dans

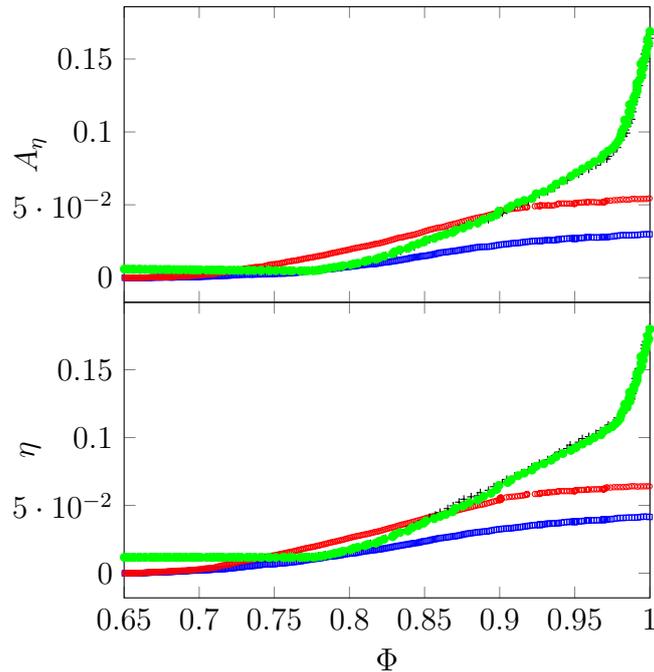


FIGURE 4.9 – L'évolution des paramètres η et A_η en fonction de la compacité.

l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation. La contrainte augmente beaucoup plus vite dans le troisième régime que dans le deuxième régime. Par contraste, les courbes macroscopiques des simulations MPM ne permettent pas de distinguer ces régimes.

4.4 Distribution des efforts de contact

Un autre aspect du comportement des particules molles sous contrainte, est l'influence de la déformation des particules et de la compacité sur la transmission des contraintes. Dans le cas des particules rigides, les distributions des forces entre particules sont assez large avec un nombre exponentiellement décroissant des fortes forces et un nombre important de faibles forces.

Pour étudier les distributions des forces, nous avons calculé les forces entre particules par la somme vectorielle des forces entre particules primaires ou points matériels le long de la surface de chaque contact. Le faible nombre de particules utilisées ne permet pas d'obtenir une statistique suffisante pour les distributions des forces. Mais nous allons voir que les tendances sont claires.

La figure 4.10 montre les densités de probabilité des forces pour quatre valeurs de la compacité. Le pdf pour $\Phi = 0,8$ est celui qu'on observe habituellement dans les milieux granulaires avec particules rigides. Cette distribution est bien ajustée par l'équation (2.32). Elle présente une

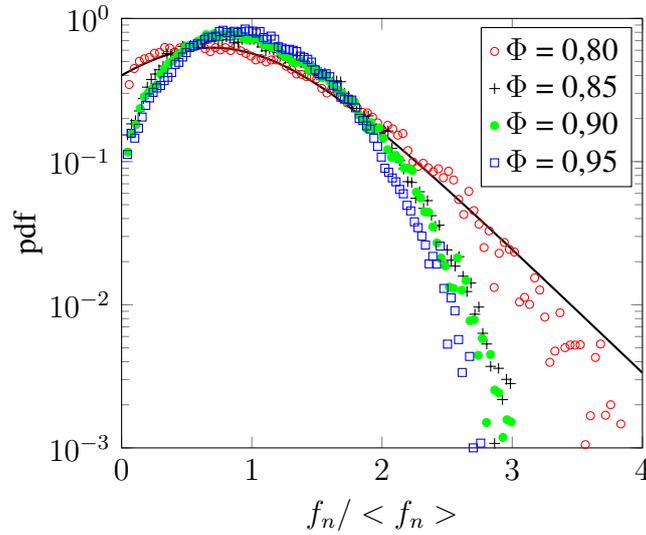


FIGURE 4.10 – La fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales de contact normalisées par la force normale moyenne dans les simulations BPM pour quatre valeurs de la compacité $\Phi = 0,8$, $0,85$, $0,90$ et $0,95$ au cours de la compression axiale. La ligne solide montre un ajustement par l'équation (2.32) pour le cas $\Phi = 0,8$ avec $\gamma = 0,25$.

décroissance exponentielle aux grandes valeurs de la force, un pic pour une force légèrement inférieure à la force moyenne et un nombre de forces faibles qui reste fini lorsque la force tend vers zéro. Pour les compacités plus élevée, les nombres des forces fortes et faibles diminuent et la distribution se concentre sur la force moyenne avec une forme proche d'une Gaussienne. En d'autres termes, la distribution des forces devient de plus en plus homogène avec l'augmentation de la compacité.

Les distributions des forces dans les simulations MPM sont présentées sur la figure 4.11. Les tendances sont similaires à celles des simulations BPM pour les faibles forces mais les grandes forces ne semblent pas changer. On peut attribuer cette observation aux effets de taille finie pour un faible nombre de particules. Les particules tendent à former des chaînes de force qui enjambent l'espace entre deux parois opposées. Ces "colonnes" de très fortes forces sont contrairement plus importantes pour les grandes déformations lorsque la paroi supérieure est plus proche de la paroi inférieure. Cet effet peut donc annuler l'effet attendu dû à la diminution de la porosité.

4.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons analysé la compression uniaxiale d'un assemblage de particules molles au-delà de l'état RCP en utilisant les deux techniques BPM et MPM. Nous avons,

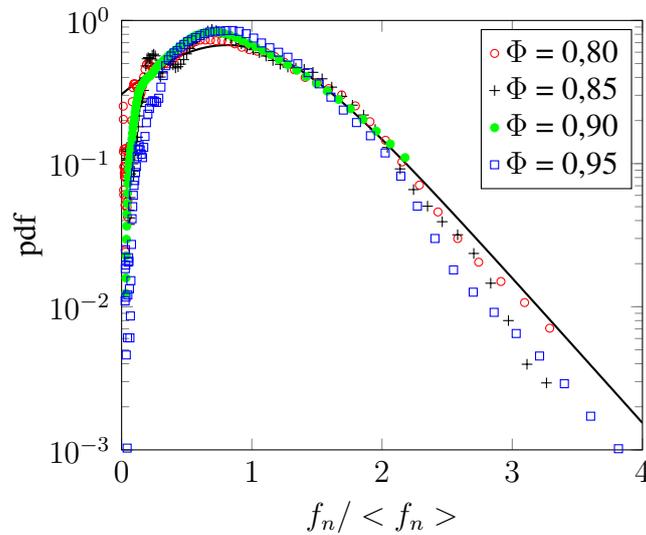


FIGURE 4.11 – La fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales de contact normalisées par la force normale moyenne dans les simulations MPM pour quatre valeurs de la compacité : $\Phi = 0,8$, $0,85$, $0,90$ et $0,95$. La ligne solide montre un ajustement par l'équation (2.32) pour le cas $\Phi = 0,8$ avec $\gamma = 0,15$.

en particulier, mis en évidence trois régimes à partir de l'analyse de la microstructure. Nous avons aussi caractérisé le comportement macroscopique et proposé des modèles simples pour les expliquer. Un résultat intéressant concerne la relation entre la compacité et le nombre de coordination par une loi simple également observé dans le cas des émulsions. On a aussi mis en évidence l'allongement des particules et une anisotropie des orientations des particules qui augmente pendant la compression uniaxiale. Les simulations par les deux techniques ont permis de mettre en évidence les différences importantes entre les assemblages de particules élastiques et plastiques.

La compaction uniaxiale constitue un mode de déformation très particulière dans la mesure où le changement de volume est imposé. Le comportement mécanique d'un milieu granulaire peut être plus généralement étudié en cisaillement par compression biaxiale à pression de confinement imposée. C'est l'objet du chapitre suivant.

Compression biaxiale d'un assemblage de particules molles

Sommaire

5.1	Compaction isotrope	74
5.1.1	Procédures numériques	74
5.1.2	Relation contrainte-compacité	75
5.2	Compaction biaxiale	78
5.2.1	Procédures numériques	78
5.2.2	Relations déformation-contrainte	80
5.2.3	Analyse de la microstructure	87
5.3	Déchargement biaxial	92
5.4	Conclusions	93

L'étude du comportement des particules molles sous compaction uniaxiale, présentée dans le chapitre précédent, a permis de mettre en évidence l'influence du changement de forme des particules sur les propriétés de remplissage d'espace, la transmission des efforts et la texture au-delà de l'état RCP. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la compression biaxiale des assemblages de particules molles à partir d'une configuration initiale préparée par la compaction isotrope en utilisant la méthode BPM. Nous nous intéressons également à la rhéologie quasi-

statique, c'est-à-dire à l'évolution vers l'état stationnaire (critique) en termes de contraintes de cisaillement et de compacité, mais aussi à la texture dans l'état critique, dans le but de comprendre l'effet de la contrainte de confinement et donc de la compacité sur la résistance au cisaillement.

5.1 Compaction isotrope

Pour avoir un état initial bien défini, nous commençons par préparer des échantillons par compaction isotrope pour différentes valeurs de la pression isotrope. En effet, comme c'est souvent le cas en mécanique des sols, la rhéologie quasi-statique ne peut être bien caractérisée que si les états d'empilement sont bien contrôlés en termes de la compacité et de l'anisotropie des contraintes. En partant d'un état isotrope, on peut analyser correctement le développement de l'anisotropie, le niveau de contrainte de cisaillement et la variation de la compacité. La valeur de la compacité initiale joue un rôle cruciale. Elle peut dépendre de la méthode de préparation, mais aussi des caractéristiques du matériaux. Comme nos particules BPM sont non-frottantes, la compacité obtenue est maximale par compaction isotrope. Mais la valeur de cette compacité est contrôlée par la contrainte de confinement. Nous allons donc considérer plusieurs valeurs de la contrainte de confinement et analyser l'évolution du système en fonction de cette contrainte.

5.1.1 Procédures numériques

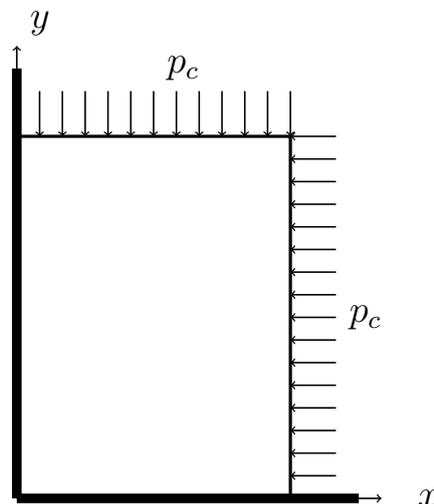


FIGURE 5.1 – Schéma de la compaction isotrope.

Comme dans la compression uniaxiale, les échantillons sont constitués de 300 particules, chaque particule étant composé d'un minimum de 200 particules primaires. La distribution

des tailles des particules est la même que dans les échantillons utilisées pour la compaction uniaxiale.

Les échantillons sont soumises à une contrainte de confinement p_c sur la paroi supérieure et sur la paroi de droite, les deux autres parois étant toujours fixes ; voir la figure 5.1. Une fois l'équilibre atteint, le système est isotrope et nous avons $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = p_c$.

Nous avons appliqué cinq valeurs différentes de la contrainte de confinement : $p_c = 0,2, 0,4, 0,8, 1,6, 3,2$ MPa pendant le chargement isotrope. Ce choix des valeurs de p_c est justifié par la contrainte caractéristique $p_I = F_0 / \langle a_0 \rangle$ définie dans la section 3.2. Dans les simulations de ce chapitre, les diamètres des particules primaires sont entre 0,07 et 0,13 mm et nous avons posé $F_0 = 100$ N. Par conséquent, la contrainte caractéristique de cet assemblage varie entre 0,7 MPa et 1,4 MPa suivant les tailles des particules. En prenant la valeur moyenne $\langle a_0 \rangle$ de la distance entre particules primaires, on obtient une contrainte caractéristique $p_I = 1,1$ MPa. On voit que parmi les valeurs des contraintes de confinement p_c considérées, nous avons trois valeurs inférieures à p_I et deux valeurs supérieures à p_I . Ceci nous permettra d'analyser plus clairement l'influence de la contrainte de confinement par rapport à la contrainte caractéristique.

Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé la compacité pour les variations de volume. Nous allons plus amplement utiliser dans ce chapitre l'*indice des vides* e qui est la grandeur souvent considérée en mécanique des sols pour pouvoir interpréter et comparer nos résultats avec le comportement connu des sols. L'indice des vides est le rapport du volume des pores à celui des particules. Il y a donc la relation suivante entre la compacité Φ et e :

$$e = \frac{1}{\Phi} - 1. \quad (5.1)$$

On notera que pendant le cisaillement, le volume total des particules varie peu et donc, e reflète directement la variation du volume des pores.

5.1.2 Relation contrainte-compacité

La figure 5.2 montre la compacité dans l'état isotrope à l'équilibre en fonction de la contrainte de confinement p_c normalisée par la contrainte caractéristique. On voit une augmentation régulière mais non-linéaire de Φ en fonction de p_c . Les valeurs de Φ , dans tous les cas, dépassent la compacité RCP. On voit qu'un ajustement logarithmique marche bien :

$$\Phi = \Phi(p_I) + k \log_{10} \frac{p_c}{p_I}, \quad (5.2)$$

avec $k \simeq 0,13$ et $\Phi(p_I) \simeq 0,93$. En mécanique des sols, la forme classique de cette relation est également logarithmique avec l'indice des vides comme variable (Wood (1990)). En effet, on voit sur la figure 5.3 que e est une fonction logarithmique de la contrainte de confinement. Nous avons :

$$e = e(p_I) - C_e \log_{10} \left(\frac{p_c}{p_I} \right), \quad (5.3)$$

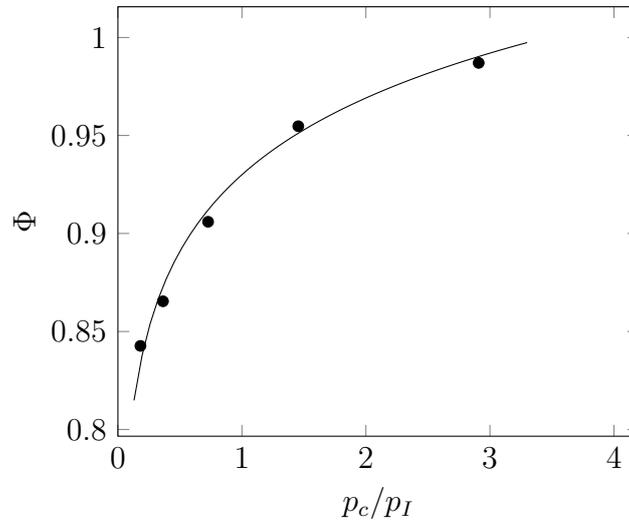


FIGURE 5.2 – La compacité Φ en fonction de la contrainte de confinement p_c dans l'état isotrope.

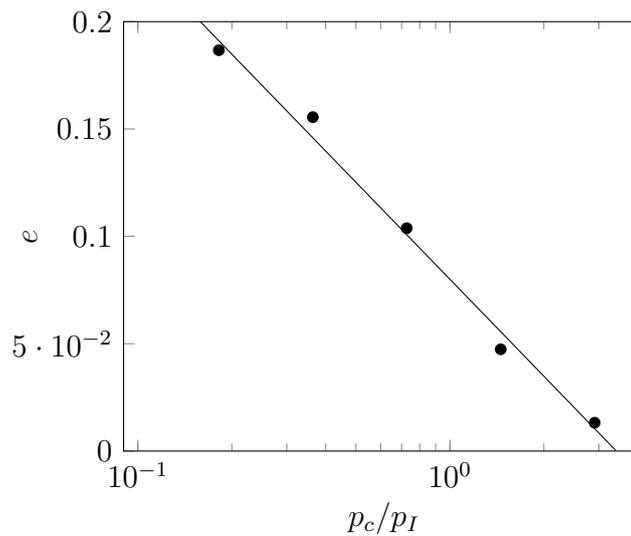


FIGURE 5.3 – Indice des vides e en fonction de la contrainte de confinement p_c .

où $C_e \simeq 0,15$ représente l'indice de compression et $e(p_I)$ est l'indice des vides pour p_I , $e(p_I) \simeq 0,08$.

La dépendance logarithmique a surtout été mise en évidence pour les argiles dont les variations de volume peuvent être importantes. Pour les sables, avec des grains rigides, la compacité dépend peu de la contrainte isotrope sauf si les particules se fragmentent. Dans ce cas, la contrainte caractéristique est la cohésion interne des particules. En l'absence de la fragmentation, la variation du volume ne peut être qu'élastique. Dans notre cas, la variation du volume

est liée aux déformations plastiques des particules. De ce point de vue, notre système ressemble aux argiles dans la mesure où les argiles sont composés des agrégats qui peuvent changer de forme sous l'effet des contraintes. Physiquement, la forme logarithmique peut se comprendre comme une conséquence du fait que la variation du volume des pores est d'autant plus difficile que le volume est petit.

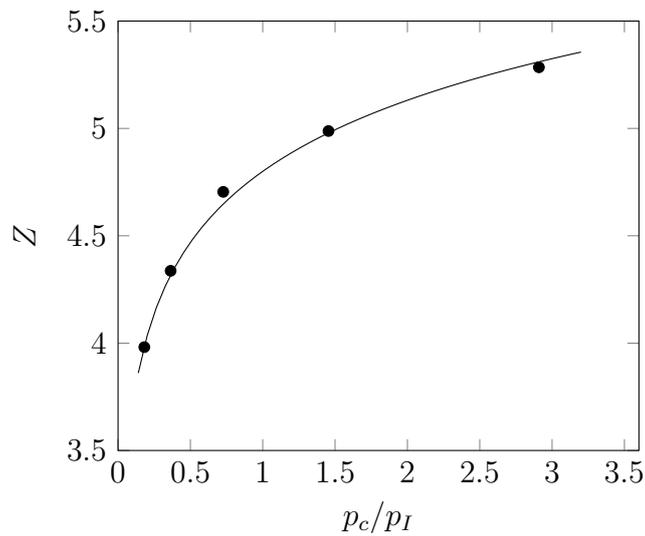


FIGURE 5.4 – Nombre de coordination Z en fonction de la contrainte de confinement p_c .

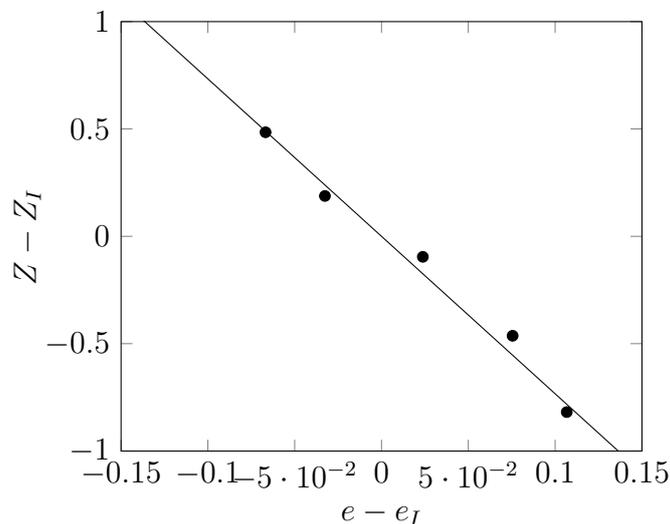


FIGURE 5.5 – Nombre de coordination Z en fonction de l'indice des vides e .

La figure 5.4 montre le nombre de coordination Z en fonction de p_c . Il augmente avec la contrainte de confinement comme dans la compression uniaxiale. Nous constatons également

qu'une dépendance logarithmique fonctionne aussi pour Z , comme indiqué sur la figure 5.4 :

$$Z = Z(p_I) - C_Z \log_{10}\left(\frac{p_c}{p_I}\right), \quad (5.4)$$

où $C_Z \approx 1,1$ et $Z(p_I) \simeq 4,8$ est le nombre de coordination pour p_I . A partir des équations (5.3) et (5.4), on obtient une relation linéaire entre Z et e indépendamment de la valeur de la pression :

$$Z - Z_I = -\frac{C_Z}{C_e}(e - e_I). \quad (5.5)$$

Cette relation est très bien vérifiée comme on peut le voir sur la figure 5.5. Mais elle contraste la relation en loi de puissance entre ces grandeurs en compression uniaxiale ; voir figure 4.5. Ce résultat montre que la relation en loi de puissance est spécifique à une déformation uniaxiale et que les relations entre la compacité et la connectivité des particules dépendent du chemin de déformation. Il a été montré que dans certains cas (par exemple en inversant la direction de cisaillement), la compacité augmente alors que le nombre de coordination diminue (Radjai et Roux (2004b)).

En supposant que l'équation (5.5) est valable pour toutes les pressions, on peut notamment considérer le cas limite où la porosité s'annule. Cette limite où $e = 0$ correspond à la valeur maximale Z_1 de Z . Cette valeur obtenue pour les simulations BPM dans le chapitre précédent est $Z_1 \simeq 5,4$. On obtient donc une relation entre les paramètres :

$$e_I = \frac{C_e}{C_Z}(Z_1 - Z_I). \quad (5.6)$$

La valeur prédite par cette relation pour e_I à partir des valeurs des autres paramètres est en accord avec la valeur mesurée ($e_I \simeq 0,08$).

5.2 Compaction biaxiale

5.2.1 Procédures numériques

Les assemblages obtenus par compaction isotrope sont soumis à un chargement biaxial en imposant la contrainte de confinement constante $\sigma_{xx} = p_c$ sur la paroi de droite et en déplaçant la paroi supérieure vers le bas à une vitesse constante de 0,01 m/s ; voir figure 5.6. Avec cette vitesse, le taux de déformation verticale $\dot{\varepsilon}$ est assez faible pour que le système reste dans le régime quasi-statique. En effet, le paramètre d'inertie I (GDR-MiDi (2004)) est inférieur à 10^{-3} pour toutes les valeurs de p_c . Chaque assemblage est cisailé jusqu'à ce que l'état stationnaire soit atteint.

Pour décrire le comportement mécanique, il est nécessaire d'évaluer l'état de contrainte et les déformations cumulées du système à tout instant et dans un élément volumique quelconque. Dans un essai de compression biaxiale, la direction principale majeure des contraintes coïncide

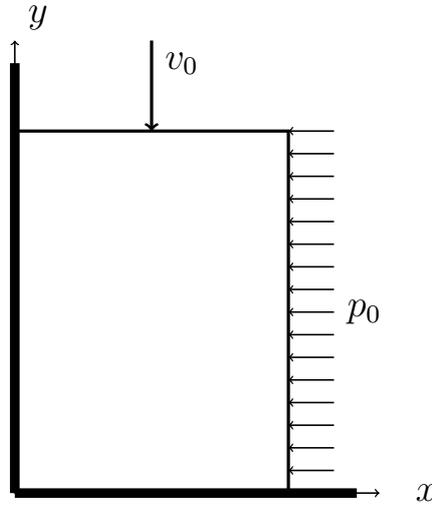


FIGURE 5.6 – Schéma de la compression bi-axiale

avec l'axe de compression et les contraintes principales σ_1 et σ_2 sont respectivement orientées suivant les directions de compression (ici verticale) et d'extension (ici horizontale) de telle sorte que $\sigma_1 = \sigma_{yy}$ et $\sigma_2 = \sigma_{xx} = p_c$. Nous allons utiliser la pression moyenne p et le déviateur des contraintes q donnés par

$$p = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2), \quad (5.7)$$

$$q = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2). \quad (5.8)$$

Le rapport $\zeta = q/p$ en 2D est égal à $\sin \varphi$, où φ est l'angle de frottement interne du matériau dans le cas des milieux granulaires à particules dures.

Les variables de déformation sont données par les déformations de la cellule de simulation. Soient h_0 et l_0 respectivement la hauteur initiale et la largeur initiale de la cellule. La compression étant pilotée suivant la direction verticale, les déformations principales cumulées ε_1 et ε_2 sont données par

$$\varepsilon_1 = \ln \left(\frac{h}{h_0} \right), \quad (5.9)$$

$$\varepsilon_2 = \ln \left(\frac{l}{l_0} \right), \quad (5.10)$$

où h et l sont respectivement la hauteur actuelle et la largeur actuelle de la cellule. La déformation de cisaillement ε_q est alors donnée par

$$\varepsilon_q = \varepsilon_1 - \varepsilon_2. \quad (5.11)$$

Pendant la compression, p n'est pas contrôlée, mais le chemin de contrainte dans l'espace (p, q) est une ligne droite de pente 1. La figure 5.7 montre que cette relation est bien respectée pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

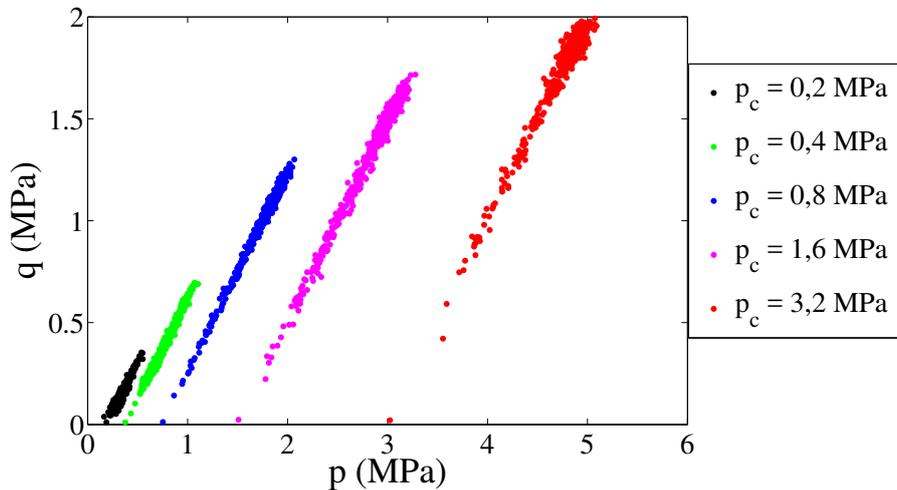


FIGURE 5.7 – Déviateur de contraintes q en fonction de la pression moyenne p pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

5.2.2 Relations déformation-contrainte

Les figures 5.8 et 5.9 présentent l'évolution du déviateur des contraintes normalisé $\zeta = q/p$ et de la pression p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c . La pression augmente pendant la compression biaxiale et se stabilise à une valeur p^* constante dans l'état stationnaire. L'évolution de ζ est similaire aux courbes déformation-contrainte dans les milieux granulaires. Ce rapport augmente et passe par un pic pour les pressions inférieures à la pression caractéristique et ensuite diminue vers une valeur constante aux fluctuations près. Pour les pressions supérieures à la pression caractéristique, q/p augmente de façon monotone vers sa valeur stationnaire avec beaucoup moins de fluctuations. Les fluctuations aux faibles pressions reflètent le faible nombre de particules. Lorsque les déformations des particules sont plus importantes pour les valeurs de la pression plus élevées, le comportement n'est plus contrôlé uniquement par les réarrangements mais aussi par les déformations des particules, ce qui absorbe et régularise les fluctuations.

Pour comprendre ces courbes, il faut d'abord remarquer qu'il n'y a pas de frottement entre particules. Il est connu que les assemblages de particules rigides sans frottement présentent une résistance au cisaillement mais une dilatance nulle (Combe et Roux (2000)). Cette résistance résulte des exclusions stériques entre particules et de la dissipation par collisions inélastiques. Ici, on observe le même phénomène mais avec des valeurs de q/p plus élevées. Cette valeur élevée

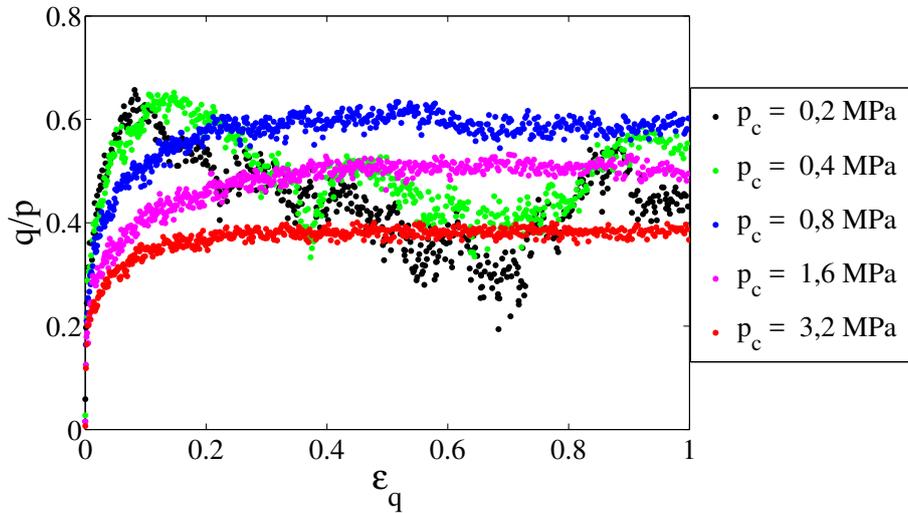


FIGURE 5.8 – Déviateur de contraintes normalisé q/p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

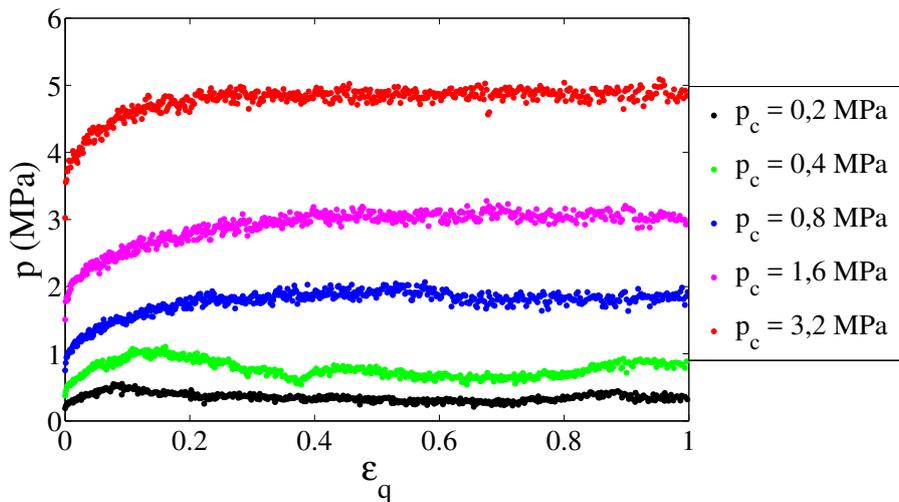


FIGURE 5.9 – Pression moyenne p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

peut donc être attribuée à la déformation plastique des particules et aussi partiellement à leurs interactions par des contacts “rugueux” entre particules primaires. Mais il y a une différence fondamentale entre le cas des particules rigides et le cas des particules molles. Dans le cas des particules rigides, la contrainte déviatorique q se met à l’échelle avec la pression p de telle sorte que $\sin \varphi$ est indépendant de p et définit un frottement interne à caractère coulombien. Dans

le cas présent, lorsqu'on augmente p le rapport q/p notamment dans l'état stationnaire change, comme nos courbes le montrent bien. Par conséquent, on ne peut plus parler du coefficient de frottement effectif.

Un autre aspect nontrivial de ces courbes est le fait que la valeur stationnaire $\zeta^* = q^*/p^*$ de la contrainte normalisée ne varie pas de façon monotone avec p_c . Pour les trois premières valeurs de p_c , ζ^* augmente mais pour les deux valeurs suivantes (valeurs au-dessus du seuil plastique), il diminue. On peut comprendre cette tendance contre-intuitive en considérant les mécanismes qui contribuent au cisaillement. Lorsque les particules ne se déforment pas beaucoup, c'est-à-dire pour $p_c < p_I$, les déformations sont essentiellement par réarrangements des particules et ce sont les contacts entre particules qui dissipent l'énergie. L'augmentation de p_c contribue alors à augmenter les facteurs qui jouent dans un milieu granulaire sur la résistance au cisaillement : augmentation du nombre des contacts, de l'anisotropie du réseau et des chaînes de forces, comme on verra dans l'analyse de la microstructure. Pour $p_c > p_I$, les particules se déforment et ce sont les changements de forme et les déformations plastiques des particules qui dominent et contribuent à diminuer l'anisotropie du réseau des contacts. Le rapport des contraintes varie alors comme p_I/p_c , et donc diminue lorsque p_c augmente. Dans la limite de très grandes pressions, la déformation d'ensemble se réduit à celle des particules et la résistance globale est égale à celle des particules.

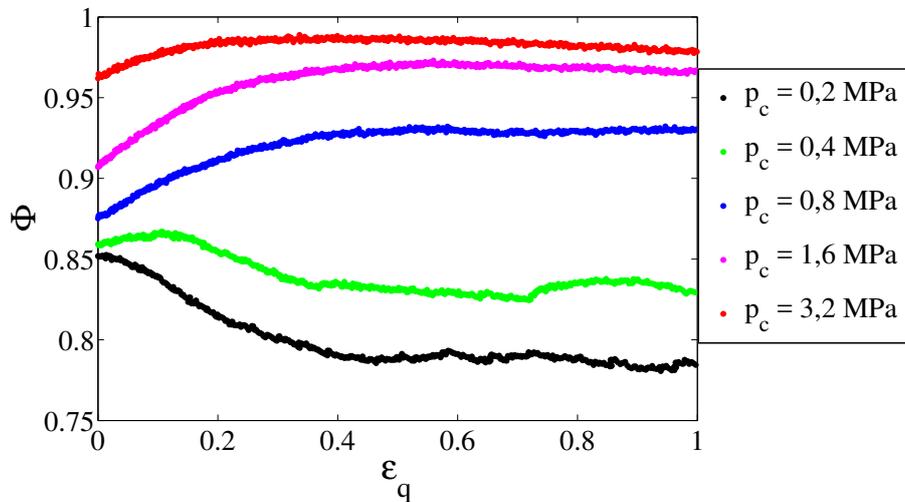


FIGURE 5.10 – Compacité Φ en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

Les figures 5.10 et 5.11 montrent respectivement la variation de la compacité Φ et de la déformation volumétrique cumulée en fonction de ε_q . Pour les deux premières valeurs faibles de p_c , on observe une nette dilatance qui diminue lorsque p_c augmente et devient négative (contraction) pour des valeurs plus grandes de p_c . La dilatance positive est cohérent avec la présence des pics sur les courbes de q/p . La dilatance négative aussi diminue en valeur absolue

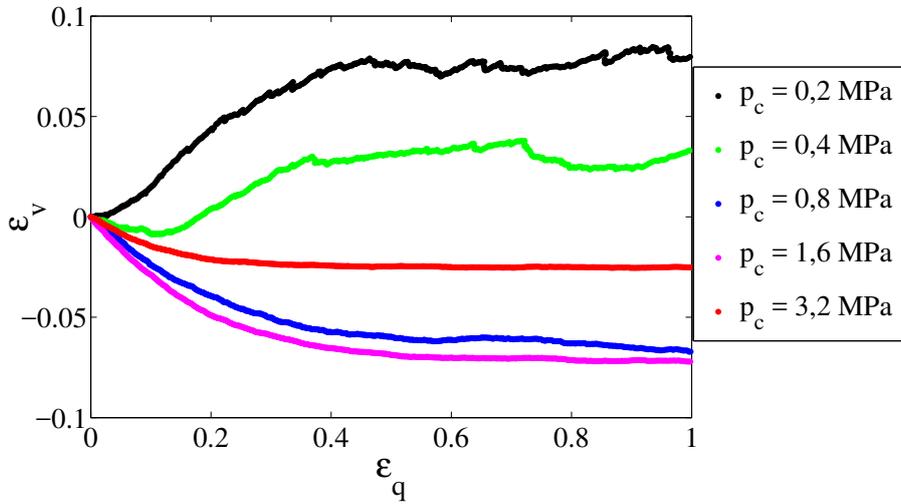


FIGURE 5.11 – Déformation volumique cumulée ε_v en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

pour les valeurs plus élevées de p_c . La dilatance tend donc à s’annuler lorsque p_c augmente. C’est cohérent avec l’image d’un assemblage sans frottement et sans pores ou avec très peu de pores ($\Phi_{iso} \simeq 0,98$ pour $p_c = 3,2$ MPa) de telle sorte que les variations de volume ne sont plus possibles. Mais la compacité Φ augmente de manière régulière avec p_c et tend vers 1.

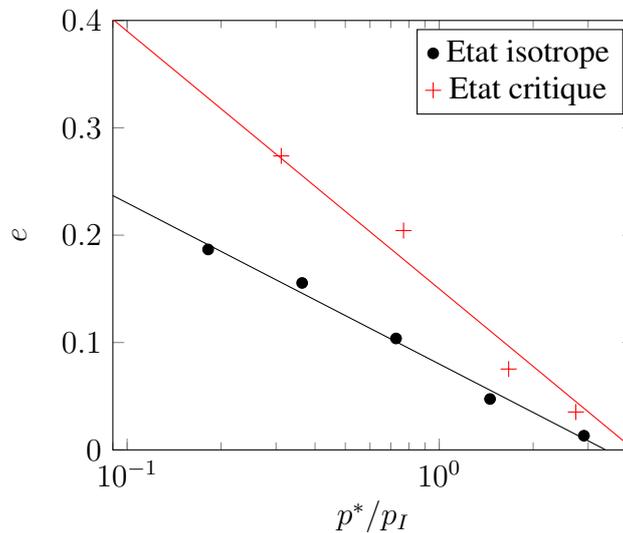


FIGURE 5.12 – Indice des vides e en fonction de la contrainte de confinement p_c .

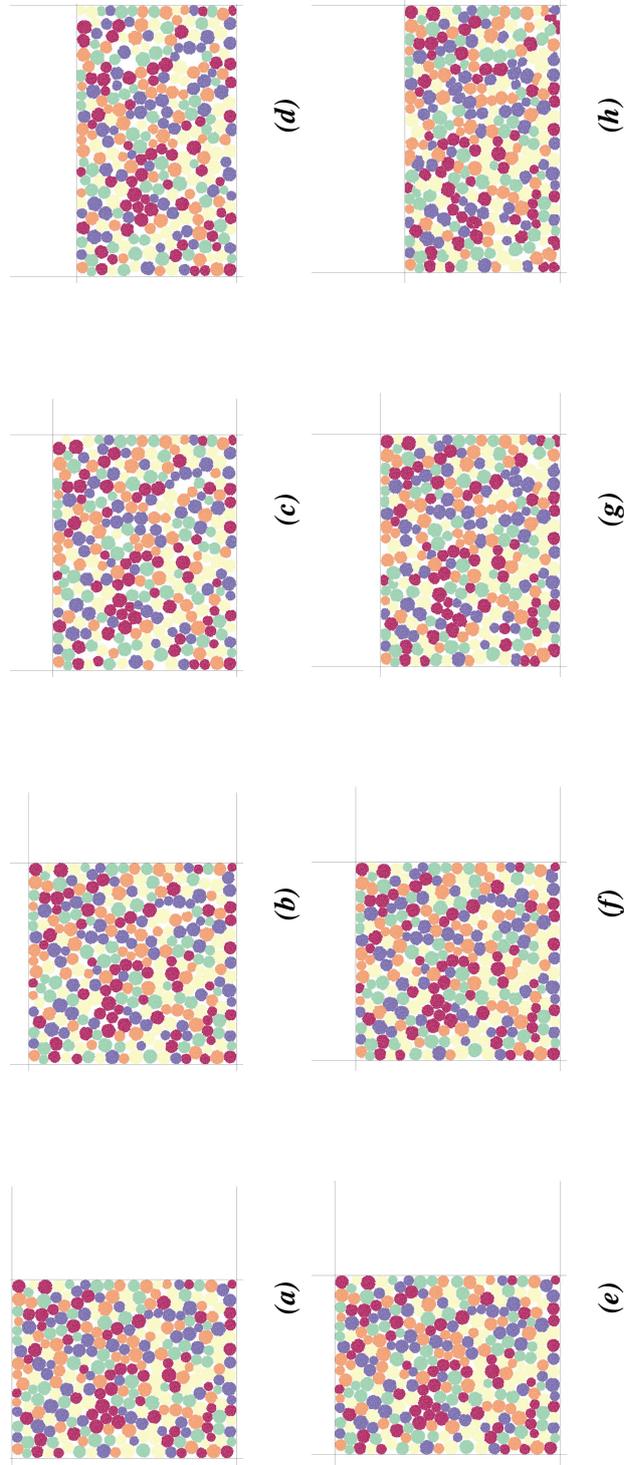


FIGURE 5.13 – Clichés de quatre états au cours de la compression biaxiale d'un assemblage de particules molles simulée par l'approche BPM pour les contraintes de confinement $p_c = 0, 2$ MPa (a-d) et $p_c = 0, 4$ MPa (e-h). Ces états correspondent aux déformations de cisaillement $\varepsilon_q = 0, 0, 2, 0, 5$ et $0, 8$. Les cercles pleins sont les particules primaires rigides des particules BPM.

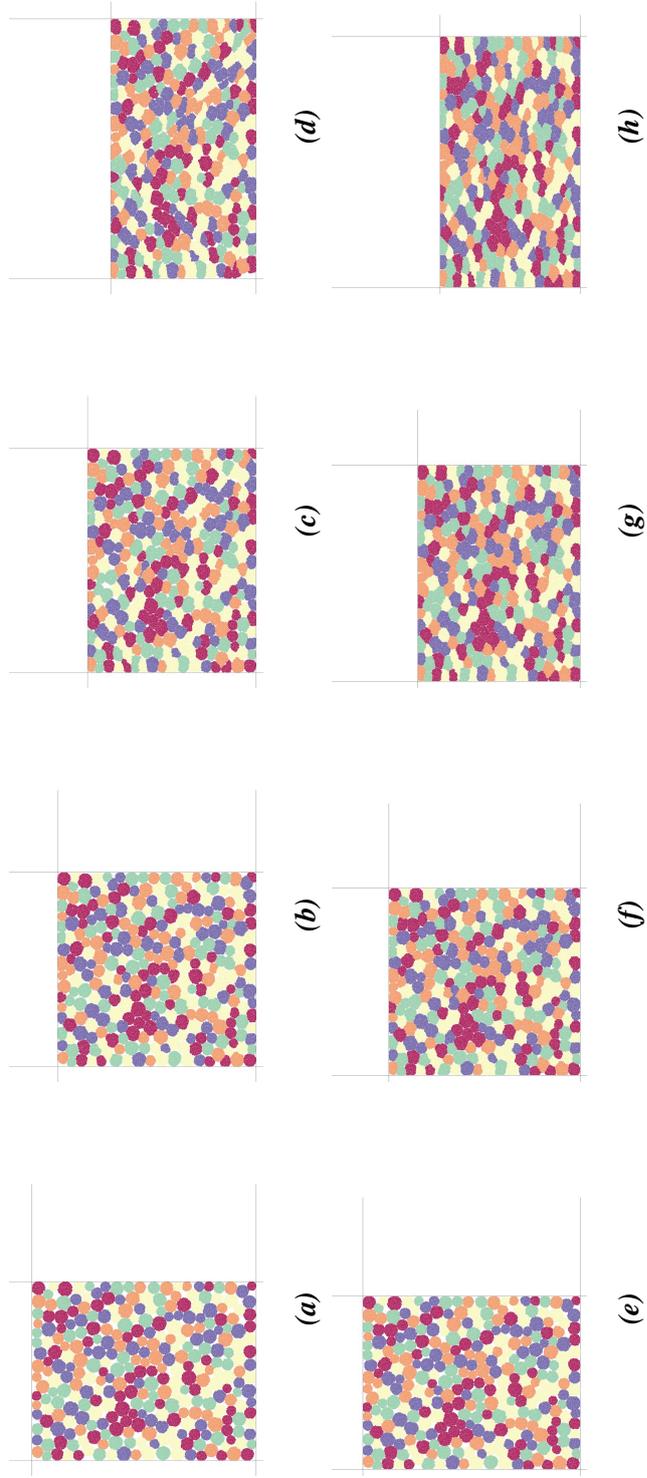


FIGURE 5.14 – Clichés de quatre états au cours de la compression biaxiale d'un assemblage de particules molles simulée pour les contraintes de confinement $p_c = 0,8 \text{ MPa}$ (a-d) et $p_c = 1,6 \text{ MPa}$ (e-h). Ces états correspondent aux déformations de cisaillement $\varepsilon_q = 0, 2, 5$ et $0, 8$. Les cercles pleins sont les particules primaires rigides des particules BPM.

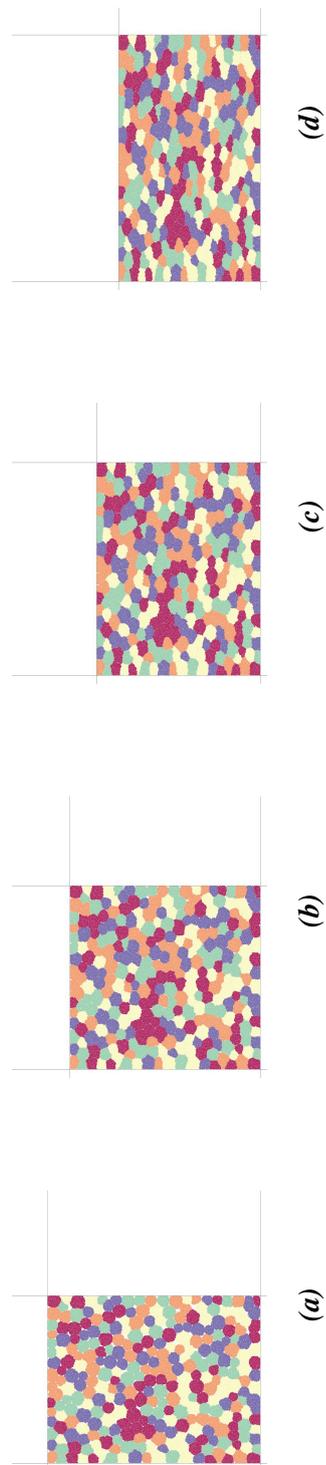


FIGURE 5.15 – Clichés de quatre états au cours de la compression biaxiale d'un assemblage de particules molles pour la contraintes de confinement $p_c = 3, 2 \text{ MPa}$ (a-d). Ces états correspondent aux déformations de cisaillement $\varepsilon_q = 0, 0, 2, 0, 2, 0, 5$ et $0, 8$. Les cercles pleins sont les particules primaires rigides des particules BPM.

En raison de l'augmentation de p , la valeur de Φ dans l'état stationnaire est différente de celle de l'état isotrope. La figure 5.12 montre l'indice des vides e en fonction de p_c/p_I dans les deux états. On observe une dépendance presque logarithmique dans les deux mais avec des coefficients différents. Ce comportement n'est pas conforme aux modèles des sols qui supposent que les coefficients sont les mêmes (Mitchell et Soga (2005)). Nous observons que pour une valeur de p_c donnée, l'indice des vides dans l'état critique est d'autant plus grand par rapport à celui de l'état isotrope que la contrainte est plus faible. Cette observation est en accord avec le fait que la dilatance est plus importante pour les valeurs plus faibles de p_c .

Il faut enfin remarquer que les variations de volume, analysées ici en termes de la dilatance et de l'indice des vides, ne sont pas nécessairement uniformes dans le volume. Comme dans le cas des particules rigides, on observe la localisation du cisaillement dans des bandes, comme on peut voir sur les clichés des échantillons à différentes étapes de déformation présentés sur les figures 5.13, 5.14 et 5.15. Malgré ces déformations localisées, les bandes de cisaillement naissent et meurent dans différents endroits du matériau et par conséquent une compacité presque homogène est atteinte vers $\varepsilon_q = 0,4$.

5.2.3 Analyse de la microstructure

Nous nous intéressons ici aux descripteurs de la texture lors de la compression biaxiale. Certains descripteurs ont été présentés et analysés dans le chapitre précédent pour la compression uniaxiale. Nous allons considérer les mêmes grandeurs.

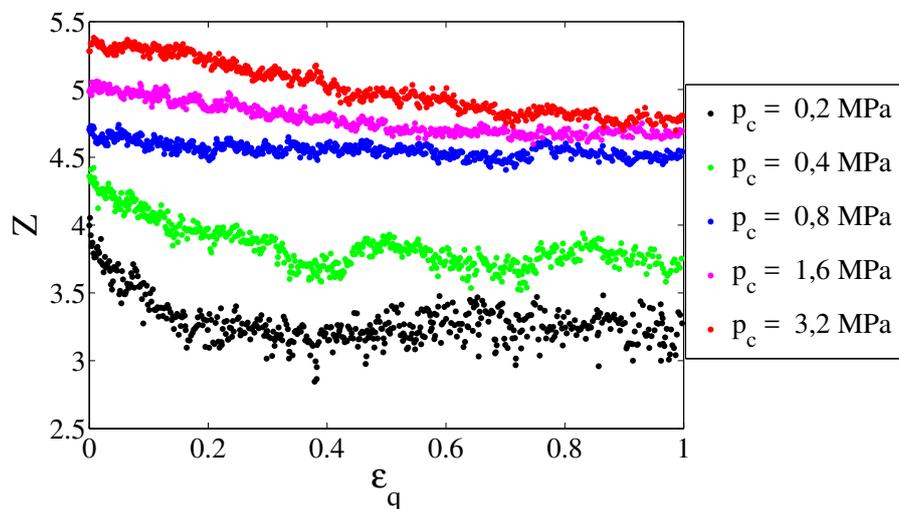


FIGURE 5.16 – Nombre de coordination Z en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

La figure 5.16 montre l'évolution du nombre de coordination Z en fonction de la déforma-

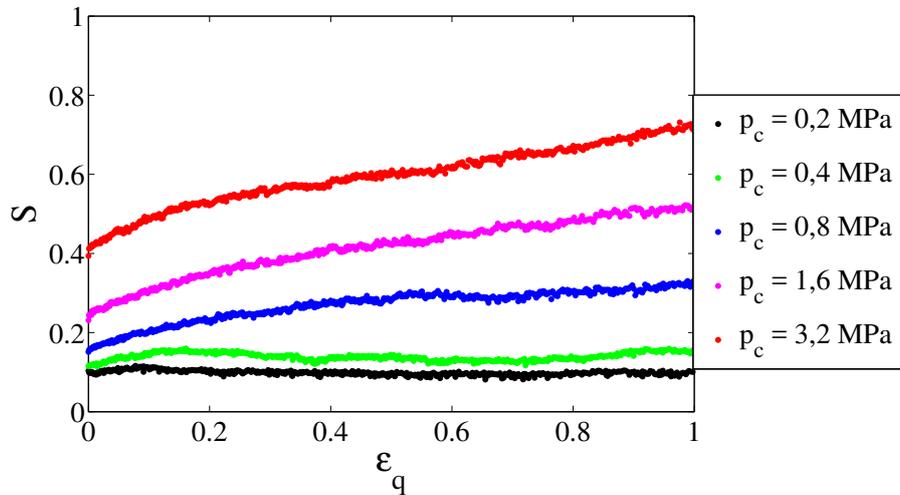


FIGURE 5.17 – Surface spécifique moyenne S en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

tion de cisaillement pour différentes valeurs de la contrainte de confinement. Contrairement à ce qu'on pouvait attendre et malgré le fait que la pression p augmente, dans tous les cas Z diminue au cours du cisaillement. Ce comportement est néanmoins proche de celui des particules rigides. En partant d'un échantillon dense, le nombre de coordination ne peut que diminuer par réarrangements des particules et pertes de contacts. Cette perte est néanmoins moins importante pour les pressions élevées et Z garde alors des valeurs élevées.

La figure 5.17 montre l'évolution de la surface spécifique S . Contrairement à Z , elle augmente avec la déformation pour $p_c > p_I$, et ceci est d'autant plus important que p_c est plus grande. Pour $p_c < p_I$, elle garde sensiblement sa valeur initiale. Ce comportement reflète donc directement la variation de p avec le cisaillement (faible pour $p_c < p_I$ et plus importante pour $p_c > p_I$). On voit que les évolutions des Z et de S ne sont pas corrélées avec celle de q/p , qui est non monotone.

Les figures 5.18 et 5.19 montrent respectivement la variation du paramètre de forme η et de l'anisotropie d'orientation A_η en fonction de la déformation de cisaillement. Ces deux paramètres varient peu ou ne varient presque pas pour $p_c < p_I$, mais elles augmentent considérablement pendant le cisaillement pour $p_c > p_I$. Ces variations sont pratiquement linéaires en fonction de ε_q . L'effet de cisaillement au-dessus du seuil plastique est effectivement d'induire une forte anisotropie de forme. La plupart des particules sont par ailleurs orientées perpendiculairement à l'axe de compression. Mais l'augmentation monotone de ces deux paramètres avec p_c n'explique pas la tendance non monotone de q/p .

Il reste deux paramètres pour caractériser la texture et qui peuvent être corrélés avec q/p : les anisotropies du réseau des contacts a_c et des forces normales aux contacts a_f (il n'y pas de

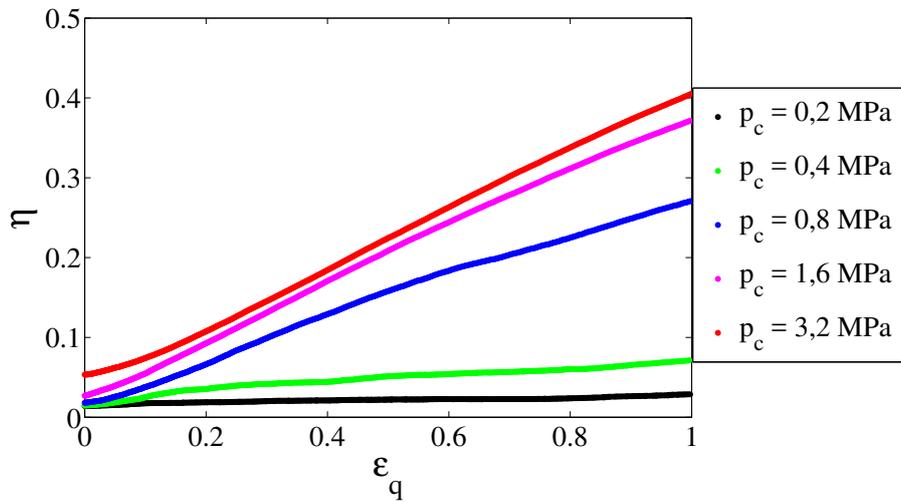


FIGURE 5.18 – Paramètre η en fonction de la déformation de cisaillement ϵ_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

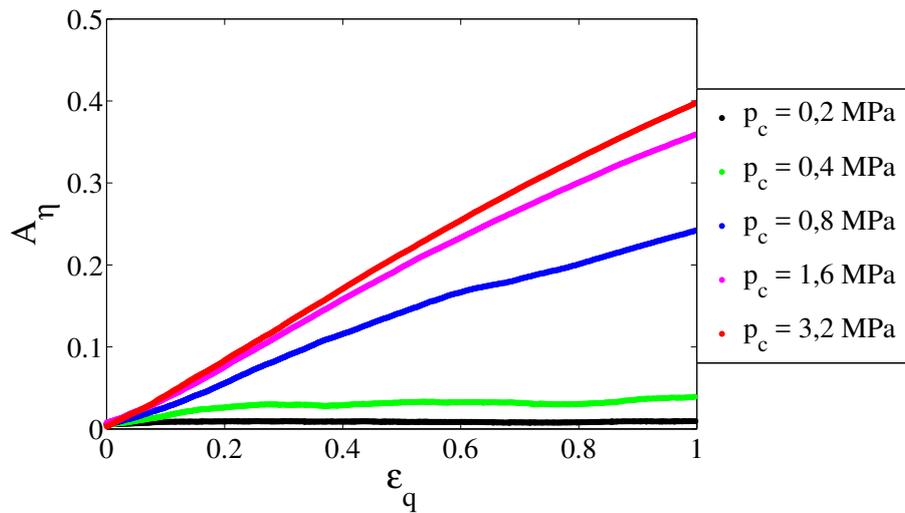


FIGURE 5.19 – Anisotropie d'orientation A_η en fonction de la déformation de cisaillement ϵ_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

frottement). L'anisotropie des contacts est définie par l'expression suivante :

$$a_c = 2(F_1 - F_2) , \tag{5.12}$$

where F_1 et F_2 ($F_1 > F_2$) sont les valeurs propres du tenseur de texture \mathbf{F} défini par le produit

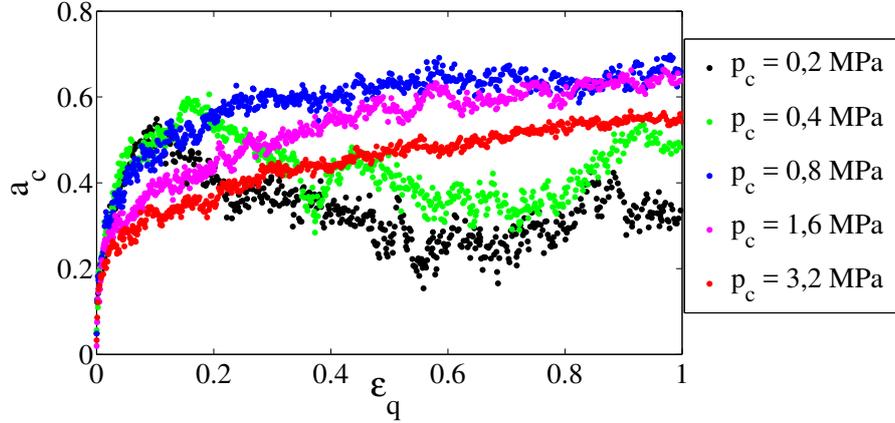


FIGURE 5.20 – Anisotropie du réseau des contacts a_c en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

tensoriel des normales des contacts \mathbf{n} :

$$\mathbf{F} = \langle \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \rangle . \quad (5.13)$$

La trace de ce tenseur est 1. La figure 5.20 montre a_c en fonction de ε_q . Les tendances pour les différentes valeurs de la pression de confinement sont très similaires à celles de q/p , ce qui indique que la résistance au cisaillement est intimement corrélée avec l'anisotropie des orientations des contacts tout comme dans les milieux à particules indéformables. Les anisotropies observées sont plus élevées pour les grandes valeurs de la pression comme dans le cas des anisotropies de forme. L'orientation privilégiée des contacts θ_c est la direction verticale et elle coïncide avec la direction principale majeure de \mathbf{F} .

L'anisotropie des forces normales aux contacts a_f peut être exprimée de façon suivante :

$$a_f = 2(\chi_1 - \chi_2) - a_c , \quad (5.14)$$

où χ_1 et χ_2 ($\chi_1 > \chi_2$) sont les valeurs propres d'un tenseur des forces χ défini à partir du produit tensoriel des forces et des normales aux contacts :

$$\chi = \frac{\langle \mathbf{f} \otimes \mathbf{n} \rangle}{\langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \rangle} . \quad (5.15)$$

où \mathbf{f} est la force de contact Bathurst et Rothenburg (1988). La figure 5.21 montre la variation de a_f en fonction de la déformation de cisaillement ε_q . On constate que l'anisotropie des forces augmente avec la déformation et passe par une valeur pic pour toutes les valeurs de la pression de confinement p_c . Après le pic, a_f diminue avec la déformation et tend vers une valeur constante. Cette diminution est en contraste avec l'anisotropie des contacts a_c qui augmente. Il semble donc que le changement de forme des particules au cours de la déformation plastique

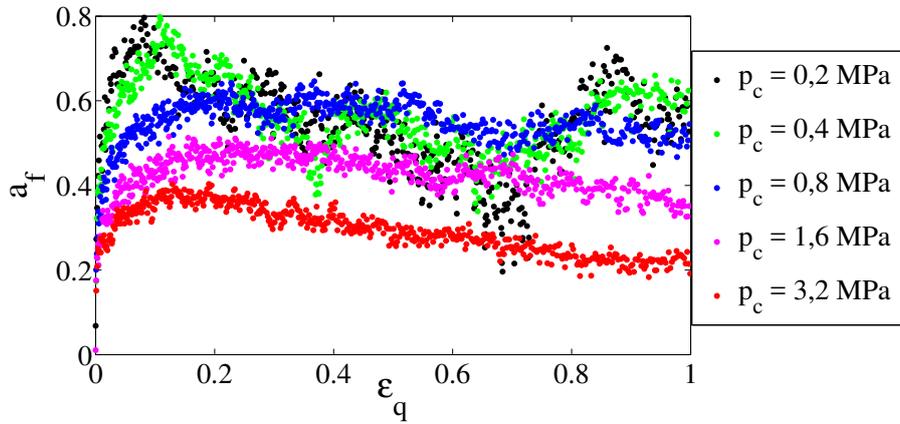


FIGURE 5.21 – Anisotropie des forces normales a_f en fonction de la déformation de cisaillement ϵ_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

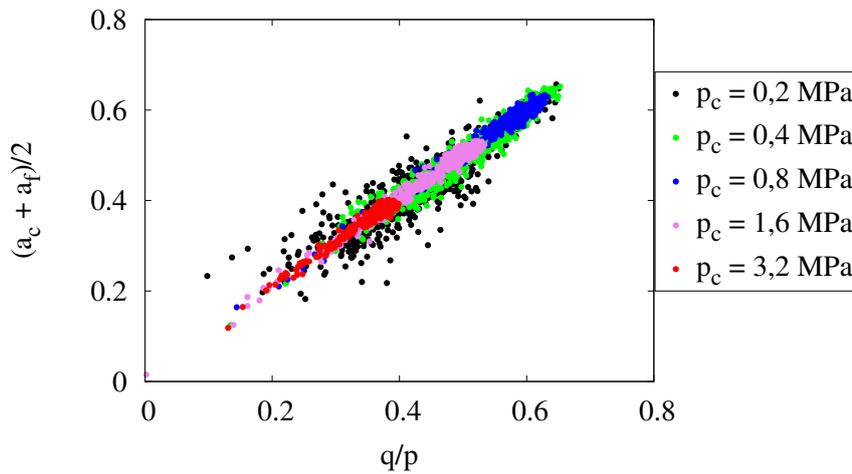


FIGURE 5.22 – Demie-somme des anisotropie des contacts et des forces normales $\frac{1}{2}(a_c + a_f)$ en fonction du déviateur de contraintes normalisé q/p pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c .

favorise une augmentation de l’anisotropie des contacts mais une diminution de l’anisotropie des forces.

Ces deux effets contradictoires conduisent à une valeur constante du rapport q/p . En effet, l’analyse du tenseur des contraintes permet de relier q/p aux anisotropies a_c and a_f par une relation simple Bathurst et Rothenburg (1988); Azéma et Radjai (2012) :

$$\frac{q}{p} \simeq \frac{1}{2}(a_c + a_f) . \tag{5.16}$$

Cette relation est bien vérifiée dans le cas des milieux granulaires avec des particules rigides [Azéma et Radjai \(2012\)](#). La figure 5.22 montre qu'elle est très bien vérifiée également dans nos simulations pendant la compression biaxiale pour toutes les pressions. Cette relation donc révèle le fait que la microstructure continue à changer lorsque l'état critique est atteint. Dans cet état, l'anisotropie des forces diminue tandis que l'anisotropie des contacts augmente. Par conséquent, q/p reste pratiquement constant pendant la déformation malgré l'évolution de la texture.

5.3 Déchargement biaxial

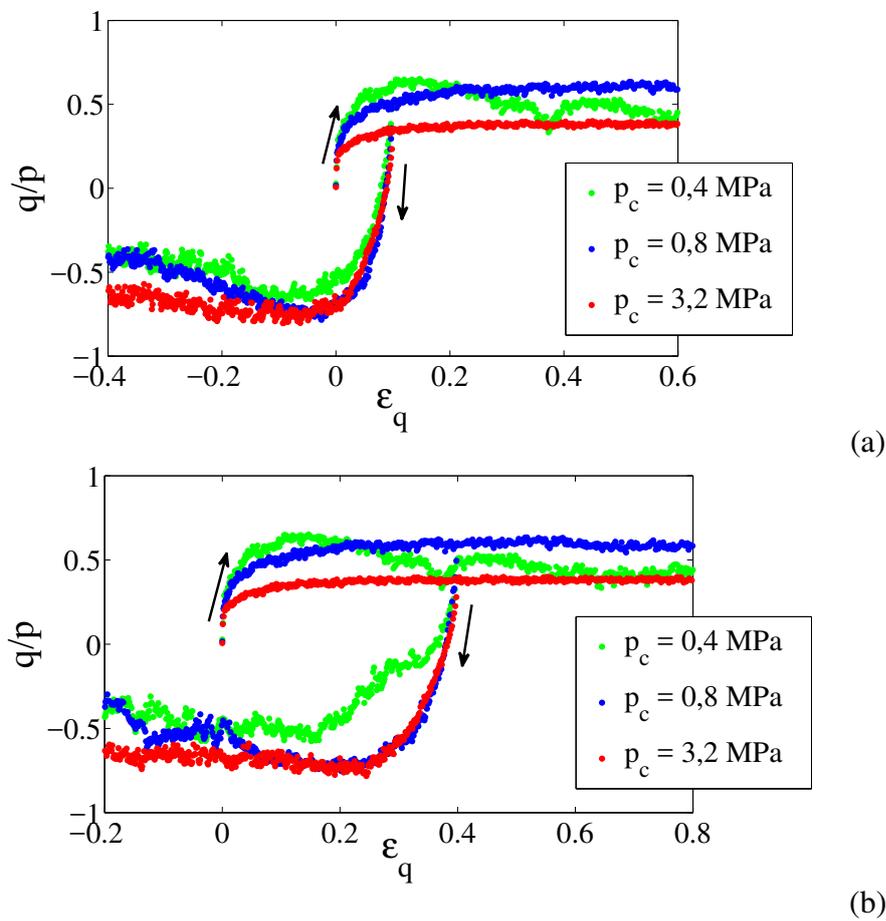


FIGURE 5.23 – Déviateur de contraintes normalisé q/p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différentes valeurs de la contrainte de confinement p_c pour le chargement et la décharge biaxiaux à partir des déformations de cisaillement $\varepsilon_q = 0, 1$ (a) et $\varepsilon_q = 0, 4$ (b).

Afin de compléter cette étude, nous avons soumis les assemblages, soumis précédem-

ment à un chargement biaxial, à une décharge biaxiale en gardant la contrainte de confinement constante p_c sur la paroi de droite et en déplaçant la paroi supérieure vers le haut à la même vitesse et avec le même pas de temps que pour le chargement. Ces déchargements sont effectués à partir de deux niveaux de déformation de cisaillement $\varepsilon_q = 0, 1$ (avant l'état critique) et $0, 4$ (dans l'état critique). Chaque assemblage est déchargé jusqu'à ce que l'état critique soit de nouveau atteint dans la nouvelle direction de cisaillement.

Les figures 5.23 montrent le déviateur des contraintes normalisé q/p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour trois valeurs de la contrainte de confinement ($p_c = 0, 4$, $0, 8$ et $3, 2$ MPa) pour à la fois le chargement et la décharge à partir de $\varepsilon_q = 0, 1$ et $\varepsilon_q = 0, 4$, respectivement. Pour $p_c = 0, 4$ MPa, on observe un transitoire relativement long avant que l'état critique soit atteint tandis que le transitoire pour $p_c = 3, 2$ est plus court.

Il est remarquable que la valeur critique q^*/p^* dans la nouvelle direction est légèrement différente de la valeur atteinte pendant le chargement. Cette différence est liée au fait que la pression moyenne p n'est pas la même pendant le chargement et la décharge. En effet, pendant la décharge, la direction principale majeure du tenseur de contrainte est horizontale et sa valeur est p_c . La valeur de la contrainte dans la direction verticale est donc inférieure à p_c . Par conséquent, la pression moyenne diminue pendant la décharge et elle est inférieure à p_c . Or, on avait vu que la pression pendant le chargement était, au contraire, supérieure à p_c . Par conséquent, alors que la méthode utilisée pour la décharge est conforme à la pratique usuelle pour les particules rigides, il est nécessaire dans le cas des particules molles de maintenir la pression moyenne à la même valeur de manière à rester dans les mêmes conditions que pendant la décharge. Ceci explique aussi pourquoi les courbes passent par un pic de contrainte pendant la décharge, un effet qu'on n'observe pas dans le cas de particules rigides notamment lorsque le point de départ est dans l'état critique.

5.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons analysé les données issues des simulations BPM pour la compression biaxiale d'un assemblage de particules molles. Nous avons considéré cinq valeurs différentes de la pression utilisées pour la préparation des échantillons par compaction isotrope et puis comme pression de confinement pour la compression biaxiale. Nous avons montré que, malgré l'absence de frottement entre particules, le système développe une forte résistance au cisaillement. Cette résistance reflète globalement à la fois les réarrangements des particules et leurs déformations plastiques au cours du cisaillement. Mais ces dernières dominent le comportement lorsque la pression de confinement est supérieure à la contrainte caractéristique des particules. Une conséquence inattendue est le fait que la résistance diminue lorsque la pression de confinement augmente dans ce régime et le matériau se rapproche d'une limite où la résistance de l'assemblage des particules est celle des particules prises individuellement.

En ce qui concerne les déformations volumétriques, nous avons vu que la dilatance n'est pas uniquement contrôlée par l'état de densité initiale (qui est toujours maximale dans notre

système pour une pression donnée), mais qu'elle dépend également de la pression de confinement en raison de son influence sur les déformations plastiques des particules. Pour la même raison, la déformabilité des particules tend à supprimer le pic de contrainte.

Un aspect important de ces analyses concerne la définition de l'état critique et du coefficient de frottement interne pour les milieux à particules molles. Nous avons vu que la contrainte déviatorique ne se met pas à l'échelle avec la pression de confinement et que, par conséquent, on ne peut plus définir un angle de frottement interne pour le matériau indépendamment de la pression. C'est un résultat attendu dans la mesure où le système comporte une pression caractéristique. Malgré cette différence, on observe une dépendance logarithmique de l'indice des vides par rapport à la pression de confinement à la fois dans l'état isotrope et dans l'état critique, comme observé en mécanique des sols.

Nous avons étudié aussi l'évolution de la microstructure pour mieux comprendre l'effet du cisaillement et de la pression de confinement. Nous avons montré que le cisaillement conduit à une forte anisotropie des particules et de leurs orientations dans le régime des déformations plastiques. Le cisaillement entraîne une diminution du nombre de coordination mais la surface spécifique augmente. Nous avons montré que la contrainte de cisaillement normalisée par la pression moyenne est pratiquement égale à la demie-somme des anisotropies du réseau des contacts et des forces. Pendant la déformation, même dans l'état critique où la contrainte de cisaillement est constante, l'anisotropie du réseau des contacts augmente tandis que celle des forces diminue.

Conclusion générale

Les matériaux divisés composés de particules molles, Soft Particle Materials ou SPM comme nous les avons appelé dans ce mémoire, couvrent une large classe de matériaux tels que les émulsions, les microgels, les mousses, les cellules biologiques et les poudres métalliques. Ces matériaux ont en commun la possibilité de se déformer sans rupture des particules et atteindre par changement de forme des compacités au-delà de celle d'un assemblage de particules rigides. L'objectif des travaux présentés dans ce mémoire était de développer une méthodologie pour la simulation des SPM sans considérer pour l'instant les forces d'adhésion au contact et l'appliquer pour l'étude du comportement rhéologique des système modèles. Cette méthodologie devait nécessairement introduire des degrés de liberté internes des particules.

Pour ce faire, nous avons développé d'une part une approche fondée sur la représentation des particules par un agrégat de particules primaires rigides avec des interactions à distance et une répulsion au contact et sans frottement interne. Cette approche, que nous avons appelée Bonded Cell Model ou BPM, conduit à un comportement élasto-plastique des particules avec un seuil plastique et une rigidité contrôlés par la force et la distance caractéristiques des interactions. Nous avons également conduit des simulations avec une forme implicite de Material Point Method, ou MPM, développé au laboratoire avec un comportement élastique linéaire pour les particules et la prise en compte des contacts par la méthode Contact Dynamics ou CD.

Comme une première application, nous avons appliqué ces deux approches à l'étude de la compression uniaxiale d'un assemblage de particules molles. Nous avons mis en évidence trois régimes à partir de l'analyse de la microstructure. Dans le premier régime, aux faibles pressions, la compaction est dominé par les réarrangements des particules. Dans le second régime,

aux pressions supérieures à la contrainte caractéristique des particules, les réarrangements sont accompagnés des déformations plastiques (BPM) ou élastiques (MPM) des particules. Dans le troisième régime, aucun réarrangement n'a lieu, mais la microstructure continue à évoluer par les déformations plastiques des particules et le remplissage des pores accompagné de l'établissement de nouveaux contacts entre particules.

Les deux approches conduisent à un remplissage progressif de l'espace, mais avec des contraintes qui dans un cas sont dictées par la plasticité des particules et dans l'autre cas par le module élastique. Nous avons montré une dépendance exponentielle de la compacité en fonction de la contrainte uniaxiale dans le cas BPM et une dépendance linéaire dans le cas MPM. Un résultat intéressant est la relation en loi de puissance entre le nombre de coordination et la compacité, également observé dans le cas des émulsions avec le même exposant. Les analyses ont également porté sur les formes des particules et la surface spécifique. Nous avons montré que les particules se déforment et prennent une forme anisotrope avec une anisotropie d'orientation qui augmente pendant la compaction.

L'approche BPM a été ensuite appliquée pour l'étude de la compression biaxiale des SPM avec plusieurs valeurs de la pression de confinement. En partant d'un état isotrope, les simulations ont permis de montrer que, malgré l'absence de frottement entre particules, le système présente une forte résistance au cisaillement. Dans le régime de réarrangements, cette résistance augmente avec la pression de confinement tandis que dans le régime des déformations plastiques des particules, elle diminue lorsque la pression de confinement augmente. Dans ce régime, le matériau se rapproche en fait d'une limite où la résistance est celle des particules prises individuellement. Nous avons aussi trouvé que la déformabilité des particules supprime le pic de contrainte et le système adopte un comportement contractant malgré sa compacité élevée.

Il a été argumenté qu'en raison de la présence d'une contrainte caractéristique dans le système, la résistance au cisaillement ne se met pas à l'échelle avec la pression de confinement et qu'il n'est donc pas possible de caractériser l'état critique par un simple coefficient de frottement. Les simulations ont permis aussi de mettre en évidence une dépendance logarithmique de l'indice des vides par rapport à la pression de confinement aussi bien dans l'état isotrope que dans l'état critique comme dans le cas des argiles ou des sols fragmentables en mécanique des sols.

L'analyse de la microstructure pendant la compression biaxiale a permis de mettre en évidence la forte anisométrie des particules et le développement d'une anisotropie d'orientations. Au cours du cisaillement, le nombre de coordination diminue tandis que la surface spécifique des contacts augmente. Nous avons montré que la résistance au cisaillement pendant la déformation biaxiale résulte d'une compensation entre une augmentation de l'anisotropie du réseau des contacts et une diminution de l'anisotropie des forces. Le seuil plastique de l'assemblage des particules pour une pression de confinement élevée est pratiquement égale à celle des particules.

Ces résultats ont été obtenus pour des assemblages composés d'un faible nombre de particules. Les simulations sont relativement longues en raison du nombre total de degrés de liberté

qui a été en moyenne 200 fois le nombre des particules. Il nous semble que cet effort numérique est inévitable pour la simulation des particules molles. Mais nous avons été surpris par le fait que même un faible nombre de particules en 2D permet d'obtenir des résultats de bonne qualité en association avec des analyses et en utilisant deux méthodes différentes. Nos simulations montrent que malgré sa simplicité de base, l'approche BPM peut être appliquée à la simulation des SPM avec des particules plastiques telles que les poudres métalliques. Mais l'approche MPM est bien plus générale et elle permet en principe d'inclure la loi de comportement désirée pour les particules.

Pour améliorer les performances de la BPM, il nous semble possible d'introduire du frottement entre particules en permettant les particules primaires d'interagir aussi bien par une force d'attraction à distance que par une résistance au roulement. La résistance au roulement n'empêche pas les particules primaires de se réarranger mais elle rend les rotations des particules primaires et donc le frottement entre les particules effectif. Le modèle BPM peut être utilisé pour représenter aussi des particules avec une structure interne. Par exemple, en modulant les forces d'interaction entre particules primaires en fonction de leurs positions dans l'agrégat, on peut générer des particules dure entourées d'une peau souple ou inversement. Il est aussi possible d'inclure l'adhésion dans les interactions entre particules.

En ce qui concerne la MPM, nous ne l'avons pas encore appliqué pour l'étude de la compression biaxiale. Il serait intéressant de voir dans quelle mesure les comportements parfois contre-intuitifs observés sont pertinents pour un assemblages de particules élastiques. De même, il serait intéressant de comparer la MPM avec un comportement élasto-plastique des particules avec la BPM. La méthode MPM peut être appliquée aussi pour l'étude des assemblages de cellules, par exemple pour comprendre le développement des contraintes mécaniques pendant la croissance cellulaire.

La recherche sur la rhéologie des SPM n'est qu'à ses débuts aussi sur le plan expérimental. Il nous semble utile de développer des expériences modèles avec des particules ultra-déformables. L'étude rhéologique de ces particules implique des nouvelles méthodes de mesures pour bien caractériser non seulement les déplacements des particules mais aussi leurs déformations et contacts. Des études sont nécessaires entre autres pour la validation des résultats numériques. De même, des analogies avec d'autres types de particules molles tels que les microgels peuvent permettre de mieux comprendre leurs liens et les spécificités de chaque matériau.

Bibliographie

- M. Abkarian et A. Viallat. Vesicles and red blood cells in shear flow. *Soft Matter*, 4 :653–657, 2008. [2.2.1](#)
- V. Acary et M. Jean. Numerical simulation of monuments by the contact dynamics method. Dans DGEMN-LNEC-JRC, éditeur, *Monument-98, Workshop on Seismic Performance of Monuments*, pages 12–14. LNEC, 1998. [3.1.3](#)
- R. Affes, J.-Y. Delenne, Y. Monerie, F. Radjai, et V. Topin. Tensile strength and fracture of cemented granular aggregates. *European Physical Journal E*, 35 :117, 2012. [3.1.1](#), [3.1](#)
- R. Afrin, M.T. Alam, et A. Ikai. Pretransition and progressive softening of bovine carbonic anhydrase ii as probed by single molecule atomic force microscopy. *Protein Science*, 14 :1147–1157, 2005. [2.2.2](#)
- I. Agnolin et J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings I : Assembling process, geometry, and contact networks. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76 :061302, 2007a. [2.1.2](#)
- I. Agnolin et J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings. II. Compression and pressure cycles. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76 :061303, 2007b. [2.1](#)
- I. Agnolin et J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings. III. Elastic properties. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76 :061304, 2007c. [2.1.1](#), [2.1.1](#), [2.1.2](#)
- I. Agnolin et J.-N. Roux. On the elastic moduli of three-dimensional assemblies of spheres : Characterization and modeling of fluctuations in the particle displacement and rotation. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :1101–1123, 2008. [2.1.2](#)
- B. Andreotti, Y. Forterre, et O. Pouliquen. *Les milieux granulaires*. CNRS, EDP Sciences, 2011. [2.1.2](#)
- S. J. Antony et M. R. Kuhn. Influence of particle shape on granular contact signatures and shear strength : new insights from simulations. *International Journal of Solids and Structures*, 41 :5863–5870, 2004. [2.1](#)
- E. Azéma et F. Radjai. Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Physical Review E*, 81 :051304, 2010. [2.1](#), [3.1.3](#)

- E. Azéma et F. Radjai. Force chains and contact network topology in sheared packings of elongated particles. *Physical Review E*, 85 :031303, 2012. [5.2.3](#), [5.2.3](#)
- E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, et G. Saussine. Influence of particle shape on shear stress in granular media. *Traffic and Granular Flow 07*, pages 497–505, 2009a. [2.1.2](#), [2.1.3](#)
- E. Azéma, F. Radjai, et G. Saussine. Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles. *Mechanics of Materials*, 41 :729–741, 2009b. [2.1](#)
- E. Azéma, F. Radjai, F., R. Peyroux, et G. Saussine. Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Physical Review E*, 76 :011301, 2007. [3.1.3](#)
- S.G. Bardenhagen, J.U. Brackbill, et D. Sulsky. The material-point method for granular materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 187 :529–541, 2000. [3.1.2](#), [3.1.3](#), [3.1.3](#)
- S.G. Bardenhagen, J.E. Guilkey, K.M. Roessig, J.U. Brackbill, W.M. Witzel, et J.C. Foster. An improved contact algorithm for the material point method and application to stress propagation in granular material. *Computer Modelling in Engineering and Sciences*, 22 :509–522, 2001. [3.1.3](#), [3.1.3](#), [3.3.3](#)
- R. J. Bathurst et L. Rothenburg. Micromechanical aspects of isotropic granular assemblies with linear contact interactions. *Journal of Applied Mechanics*, 55 :17, 1988. [5.2.3](#), [5.2.3](#)
- D.J. Benson. A mixture theory for contact in multi-material eulerian formulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 140 :59–86, 1997. [3.1.2](#), [3.1.2](#)
- D.J. Benson. An implicit multi-material eulerian formulation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48 :475–499, 2000. [3.1.2](#), [3.3](#)
- L. Beuth, Z. Wieckowski, et P.A. Vermeer. Solution of quasi-static large-strain problems by the material point method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 35 :1451–1465, 2011. [3.1.3](#)
- G.B. Blanchard, A.J. Kabla, N.L. Schultz, L.C. Butler, B. Sanson, N. Gorfinkie, L. Mahadevan, et R.J. Adams. Tissue tectonics : morphogenetic strain rates, cell shape change and intercalation. *Nature Methods*, 6 :458–464, 2009. [2.2.1](#)
- R.T. Bonnecaze et M. Cloitre. Micromechanics of soft particle glasses. *Advances in Polymer Science*, 236 :117–161, 2010. [1.1](#), [2.2.1](#), [2.8](#), [2.9](#), [2.2.3](#)
- F. P. Bowden et D. Tabor. *The Friction and Lubrication of Solids - Part I*. Clarendon Press, Oxford, 1950. [2.1.1](#)
- J.U. Brackbill, D.B. Kothe, et H.M. Ruppel. FLIP : a low-dissipation, particle-in-cell method for fluid flow. *Computer Physics Communications*, 48 :25–38, 1988. [3.1.3](#)
- J.U. Brackbill et H.M. Ruppel. FLIP : a method for adaptively zoned, particle-in-cell calculations in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, 65 :314–343, 1986. [3.1.3](#)
- I. Bratberg, F. Radjai, et A. Hansen. Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds. *Physical Review E*, 66 :031303–1, 2002. [3.1.3](#), [4.3.1](#)
- Nikolai V Brilliantov, Nicole Albers, Frank Spahn, et Thorsten Pöschel. Collision dynamics of granular particles with adhesion. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76 :051302, 2007. [2.1.1](#)
- B Brogliato. *Nonsmooth mechanics*. Springer, London, 1999. [3.3.3](#)
- CEGEO, B. Saint-Cyr, K. Szarf, C. Voivret, E. Azéma, V. Richefeu, J.-Y. Delenne, G. Combe, C. Nougulier-Lehon, P. Villard, P. Sornay, M. Chaze, et F. Radjai. Particle shape dependence in 2d granular media. *Europhysics Letters*, 98 :44008, 2012. [2.1](#)
- L. Chen, Remondetto G.E., et M. Subirade. Food protein-based materials as nutraceutical delivery systems. *Trends in Food Science and Technology*, 17 :272–283, 2006. [2.2.1](#)
- Z. Chen, R. Feng, X. Xin, et L. Shen. A computational model for impact failure with shear- induced

- dilatancy. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56 :1979–1997, 2003. [3.1.3](#)
- G. Combe et J.-N. Roux. Strain versus stress in a model granular material : a devil's staircase. *Physical Review Letters*, 85 :3628–3631, 2000. [5.2.2](#)
- S. N. Coppersmith, C.H. Liu, S. Majumdar, O. Narayan, et T. A. Witten. Model for force fluctuations in bead packs. *Physical Review E*, 53 :4673–4685, 1996. [2.1.4](#)
- S.J. Cummins et J.U. Brackbill. An implicit particle-in-cell method for granular materials. *Journal of Computational Physics*, 180 :506–548, 2002. [3.1.3](#)
- P. A. Cundall et O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29 :47–65, 1979. [3.1.3](#)
- F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, et F. Chevoir. Rheophysics of dense granular materials : Discrete simulation of plane shear flows. *Physical Review E*, 72(2–1), 2005. [2.1.2](#), [2.1.2](#)
- B.V. Derjaguin, V.M. Müller, et Y.P. Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 53 :314, 1975. [2.1.1](#)
- A. Donev, I. Cisse, D Sachs, E.A. Variano, F. H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato, et P. M. Chaikin. Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science*, 303 :990–993, 2004. [2.1](#)
- D.J. Durian. Foam mechanics at the bubble scale. *Physical Review Letters*, 75 :4780–4783, 1995. [2.2.3](#)
- D. Ebrahimi, A. J. Whittle, et R. J.-M. Pellenq. Mesoscale properties of clay aggregates from potential of mean force representation of interactions between nanoplatelets. *The Journal of Chemical Physics*, 140 :154309, 2014. [2.2.1](#)
- N. Estrada, E. Azema, F. Radjai, et A. Taboada. Identification of rolling resistance as shape parameter in granular media. *Physical Review E*, 84 :011306, 2011. [2.1.1](#)
- N. Estrada, A. Taboada, et F. Radjai. Shear strength and force transmission in granular media with rolling resistance. *Physical Review E*, 78 :021301, 2008. [2.1.1](#), [3.1.3](#), [4.3.1](#)
- GDR-MiDi. On dense granular flows. *European Physical Journal E*, 14 :341–365, 2004. [2.1](#), [2.1.2](#), [2.1.2](#), [2.1.2](#), [5.2.1](#)
- D.T Gethin, R.S Ransing, R.W Lewis, M. Dutko, et A.J.L Crook. Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material. *Computers & Structures*, 79 :1287–1294, 2001. [3.1.2](#), [3.2](#)
- J.E. Guilkey et J.A. Weiss. Implicit time integration for the material point method : quantitative and algorithmic comparisons with the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 57 :1323–1338, 2003. [3.3.2](#), [3.3.2](#)
- Y.J. Guo et J.A. Narin. Three-dimensional dynamic fracture analysis using the material point method. *Computer Modelling in Engineering and Sciences*, 16 :141–156, 2006. [3.1.3](#)
- R. Hart, P. A. Cundall, et J. Lemos. Formulation of a three-dimensional distinct element model-Part II. Mechanical calculations for motion and interaction of a system composed of many polyhedral blocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 25 :117–125, 1988. [2.1.1](#)
- H. J. Herrmann, R. Mahmoodi Baram, et M. Wackenhut. Searching for the perfect packing. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 330 :77–82, 2003. [2.1](#)
- J.-M. Hertzsch, F. Spahn, et N. V. Brilliantov. On low-velocity collisions of viscoelastic particles. *Journal de Physique II*, 5 :1725–1738, 1995. [2.1.1](#)
- P.-Y. Hicher. Experimental behaviour of granular materials. Dans B. Cambou, éditeur, *Behaviour of Granular Materials*, pages 1–98, Wien, 2000. Springer. [2.1.2](#)
- W. Hu et Z. Chen. A multi-mesh mpm for simulating the meshing process of spur gears. *Computers &*

- Structures*, 81 :1991–2002, 2003. 3.1.3, 3.3.3
- P. Huang, X. Zhang, S. Ma, et X. Huang. Contact algorithms for the material point method in impact and penetration simulation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85 :498–517, 2011. 3.3.3
- K. Ioannidou, R. Pellenq, et E. Del Gado. Controlling local packing and growth in calcium–silicate–hydrate gels. *Soft Matter*, 10 :1121–1133, 2014. 3.2.1
- J.N. Israelachvili. *Intermolecular and surface forces*. Academic Press, London, 1993. 3.2.1, 3.2.1
- H. M. Jaeger, S. R. Nagel, et R. P. Behringer. The physics of granular materials. *Physics Today*, 49 :32–38, 1996. 2.1.2
- M. Jean. Unilateral contact and dry friction : time and space variables discretization. *Archives of Mechanics, Warszawa*, 40 :677–691, 1988. 3.1.3
- M. Jean. Frictional contact in rigid or deformable bodies : numerical simulation of geomaterials. Dans A.P.S. Salvadurai et J.M. Boulon, éditeurs, *Mechanics of Geomaterial Interfaces*, pages 463–486. Elsevier Science Publisher, Amsterdam, 1995. 3.1.3, 3.3.3
- M. Jean. The non smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanic and Engineering*, 177 :235–257, 1999. 3.1.3
- M. Jean, F. Jourdan, et B. Tathi. Numerical dynamics for the simulation of deep drawing. Dans *Proceeding of The International Deep Drawing Research Group (IDDRG 1994)*, Handbooks on Theory and Engineering Applications of Computational Methods, 1994. 3.1.3
- M. Jean et J. J. Moreau. Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. Dans *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, pages 31–48, Lausanne, Switzerland, 1992. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes. 3.1.3
- M. Jean et E. Pratt. A system of rigid bodies with dry friction. *International Journal of Engineering Science*, pages 497–513, 1985. 3.1.3
- K. L. Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1985. 2.1.1
- K. L. Johnson, K. Kendall, et A. D. Roberts. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A (Mathematical and Physical Sciences)*, 324 :301–313, 1971. 2.1.1
- K.L. Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1999. 2.1.1
- A.J. Kabla. Collective cell migration : leadership, invasion and segregation. *Journal of Royal Society : Interface*, 9 :3268–3278, 2012. 2.2.1
- K.I. Kanatani. Distribution of directional data and fabric tensors. *International Journal of Engineering Science*, 22 :149–164, 1984. 2.1.3
- G. Katgert. *Flow of Foams*. PhD thesis, Leiden University, 2008. 2.2.3, 2.11
- J.A. Koupai, S.S. Eslamian, et J.A. Kazemi. Enhancing the available water content in unsaturated soil zone using hydrogel, to improve plant growth indices. *Ecohydrology & Hydrobiology*, 8 :67–75, 2008. 2.2.1
- N.P. Kruyt. Contact forces in anisotropic frictional granular materials. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3537–3556, 2003. 2.1
- J. Lanier et M. Jean. Experiments and numerical simulations with 2d disks assembly. *Powder Technology*, 109 :206–221, 2000. 3.1.3
- P. Lepsant, C. Boher, Y. Berthier, et F. Rézai-Aria. A phenomenological model of the third body particles circulation in a high temperature contact. *Wear*, 298 :66–79, 2013. 2.2.1
- Y.-L. Lin, D.-M. Wang, W.-M. Lu, Y.-S. Lin, et K.-L. Tung. Compression and deformation of soft spherical particles. *Chemical Engineering Science*, 63 :195–203, 2008. 2.2.2, 2.6

- K.K. Liu. Deformation behaviour of soft particles : a review. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 39 :189–199, 2006. [2.2.2](#)
- G. Lorenzo, N. Zartizky, et A. Califano. Rheological analysis of emulsion-filled gels based on high acyl gellan gum. *Food Hydrocolloids*, 30 :672–680, 2013. [2.2.1](#)
- S. Luding. Cohesive, frictional powders : contact models for tension. *Granular Matter*, 10 :235–246, 2008. [2.1.1](#)
- G. Ma, W. Zhou, et X.L. Chang. Modeling the particle breakage of rockfill materials with the cohesive crack model. *Computers and Geotechnics*, 61 :132–143, 2014. [3.2.1](#)
- M.A. Mader, V. Vitkova, M. Abkarian, A. Viallatc, et T. Podgorskid. Dynamics of viscous vesicles in shear flow. *The European Physical Journal E*, 19 :389–397, 2006. [2.2.1](#)
- T. S. Majmudar et R. P. Behringer. Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, 435 :1079–1082, 2005. [2.1](#)
- H. A Makse, N. Gland, D. L. Johnson, et L. M. Schwartz. Why effective medium theory fails in granular materials. *Physical Review Letters*, 83 :5070–5073, 1999. [2.1.1](#)
- H. A. Makse, D.L. Johnson, et L.M. Schwartz. Packing of compressible granular materials. *Physical Review Letters*, 84 :4160–4163, 2000. [3.4.2](#)
- C.L. Martin et D. Bouvard. Study of the cold compaction of composite powders by the discrete element method. *Acta Materialia*, 51 :376–386, 2003. [2.2.1](#)
- D. Maugis. *Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids*. Springer, 2000. [2.2.2](#)
- S.C. McNamara et H. J. Herrmann. Measurement of indeterminacy in packings of perfectly rigid disks. *Physical Review E*, 70 :061303, 2004. [3.1.3](#)
- S.C. McNamara et H.J. Herrmann. Quasirigidity : some uniqueness issues. *Physical Review E*, 74 : 061303, 2006. [3.1.3](#)
- P. Menut, S. Seiffert, J. Sprakelae, et D.A. Weitz. Does size matter ? elasticity of compressed suspensions of colloidal- and granular-scale microgels. *Soft Matter*, 8 :156–164, 2012. [2.7](#), [2.2.3](#)
- J. K. Mitchell et K. Soga. *Fundamentals of Soil Behavior*. Wiley, New York, 2005. [2.1.2](#), [5.2.2](#)
- S. Mora, C. Maurini, T. Phou, J.-M. Fromental, B. Audoly, et Y. Pomeau. Solid drops : Large capillary deformations of immersed elastic rods. *Physical Review Letters*, 111 :114301, 2013. [3.4.3](#)
- J. J. Moreau. Evolution problem associated with a moving convex set in a hilbert space. *Journal of Differential Equations*, 26 :347–374, 1977. [3.1.3](#)
- J. J. Moreau. Liasons unilatérales sans frottement et chocs inélastiques. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 296 :1473–1476, 1983. [3.1.3](#)
- J. J. Moreau. Bounded variation in time. Dans P.D. Panagiotopoulos et G Strang, éditeurs, *Topics in Nonsmooth Mechanics*, pages 1–74. Birkhäuser, Basel, 1988a. [3.1.3](#)
- J. J. Moreau. New computation methods in granular dynamics. Dans C. Thornton, éditeur, *Powders & Grains 93*, pages 227–232. August Aimé Balkema, Rotterdam, 1993. [3.1.3](#)
- J. J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. Dans D. E. Wolf et P. Grassberger, éditeurs, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, pages 233–247. World Scientific, Singapore, 1997. [2.1.3](#), [3.1.3](#)
- J.J. Moreau. *Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics*, volume 302 de *International Centre for Mechanical Sciences, Courses and Lectures*. Springer, Vienna, 1988b. [3.1.3](#), [3.2.1](#)
- J.J. Moreau. Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials. *European Journal of Mechanics A - Solids*, 13 :93–114, 1994. [3.1.3](#)
- D. M. Mueth, H. M. Jaeger, et S. R. Nagel. Force distribution in a granular medium. *Physical Review E*, 57 :3164, 1998. [2.1.4](#), [2.4](#)

- A. A. Munjiza. *The Combined Finite-Discrete Element Method*. Wiley, Chichester, 2004. [3.1.2](#)
- A. A. Munjiza, D. R. J. Owen, et N. Bicanic. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Engineering Computations*, 12 :145–174, 1995. [3.1.2](#)
- R. M. Nedderman. *Statics and kinematics of granular materials*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992. [2.1](#)
- S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, et J.-Y. Delenne. Implicit frictional-contact model for soft particle systems. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 83 :72–87, 2015. [3.1.3](#), [3.4](#), [3.4.2](#), [4.3.2](#)
- D.-H. Nguyen, E. Azéma, P. Sornay, et F. Radjai. Bonded-cell model for particle fracture. *Physical Review E*, 91 :022203, 2015. [3.1.3](#), [3.2.1](#)
- S. Nineb, P. Alart, et D. Dureisseix. Approche multi-échelle des systèmes de tenségrité. *Revue Européenne de Mécanique Numérique*, 15 :319–328, 2006. [3.1.3](#)
- C. Nouguier-Lehon, B. Cambou, et E. Vincens. Influence of particle shape and angularity on the behaviour of granular materials : a numerical analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 27 :1207–1226, 2003. [3.1.3](#)
- C.S. O’Hern, L.E. Silbert, A.J. Liu, et S.R. Nagel. Jamming at zero temperature and zero applied stress : The epitome of disorder. *Physical Review E*, 68 :011306, 2003. [4.3.1](#)
- L. Olmos. *Etude du frittage de poudres par microtomographie in situ et modélisation discrète*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2009. [2.1.2](#), [2.2.3](#)
- X. Pan, A. Xu, G. Zhang, P. Zhang, J. Zhu, S. Ma, et X. Zhang. Three-dimensional multi-mesh material point method for solving collision problems. *Communications in Theoretical Physics*, 49 :1129–1138, 2008. [3.1.3](#)
- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux. Frictionless bead packs have macroscopic friction, but no dilatancy. *Physical Review E*, 78 :011307, 2008. [3.2.1](#)
- I. Preechawuttipong. *Modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs*. PhD thesis, Université Montpellier II, 2001. [2.1.1](#)
- J.-C. Quezada, P. Breul, G. Saussine, et F. Radjai. Stability, deformation, and variability of granular fills composed of polyhedral particles. *Physical Review E*, 86 :031308, 2012. [3.1.3](#)
- F. Radjaï. Multicontact dynamics. Dans H. J. Herrmann et al., éditeur, *Physics of Dry Granular Media*, pages 305–312, Netherlands, 1998. Kluwer Academic Publishers. [3.1.3](#)
- F. Radjai. Multicontact dynamics of granular systems. *Computer Physics Communications*, 121-122 : 294–298, 1999. [2.1.4](#), [3.1.3](#)
- F. Radjai. Modeling force transmission in granular materials. *Comptes Rendus Physique*, 16 :3–9, 2015. [2.1.4](#), [2.4](#), [2.1.4](#)
- F. Radjaï et E. Azéma. Shear strength of granular media. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 13 :204–218, 2009. [2.1.3](#)
- F Radjai et F. Dubois, éditeurs. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*. Iste-Wiley, London, 2011. [2.1.1](#)
- F. Radjai, P. Evesque, D. Bideau, et S. Roux. Stick-slip dynamics of a one-dimensional array of particles. *Physical Review E*, 52 :5555–5564, 1995. [3.1.3](#)
- F. Radjai, M. Jean, J.-J. Moreau, et S. Roux. Force distributions in dense two-dimensional granular systems. *Physical Review Letters*, 77 :274–277, 1996. [2.1](#), [2.1.4](#), [3.1.3](#)
- F. Radjai et V. Richefeu. Bond anisotropy and cohesion of wet granular materials. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 367 :5123–5138, 2009a. [3.4.3](#)
- F. Radjai et V. Richefeu. Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mechanics of*

- Materials*, 41 :715–728, 2009b. [3.2.1](#)
- F. Radjai et S. Roux. Turbulentlike fluctuations in quasistatic flow of granular media. *Physical Review Letters*, 89 :064302, 2002. [3.1.3](#)
- F. Radjai et S. Roux. Contact dynamics study of 2d granular media : Critical states and relevant internal variables. Dans H. Hinrichsen et D. E. Wolf, éditeurs, *The Physics of Granular Media*, pages 165–186, Weinheim, 2004a. Wiley-VCH. [2.1.3](#)
- F. Radjai et S. Roux. The physics of granular media. Chapitre Contact dynamics study of 2D granular media : Critical states and relevant internal variables, pages 165–186. Wiley-Vch, Berlin, 2004b. [3.1.3](#), [5.1.2](#)
- F. Radjai, J. Schäfer, S. Dippel, et D. Wolf. Collective friction of an array of particles : A crucial test for numerical algorithms. *J. Phys. I France*, 7 :1053, 1997. [3.1.3](#)
- F. Radjai, H. Troadec, et S. Roux. Granular materials : Fundamentals and applications. pages 157–184. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2004a. [2.1.2](#), [2.1.2](#)
- F. Radjai, H. Troadec, et S. Roux. Key features of granular plasticity. Dans S.J. Antony, W. Hoyle, et Y. Ding, éditeurs, *Granular Materials : Fundamentals and Applications*, pages 157–184, Cambridge, 2004b. R.S.C. [2.1](#), [2.1.3](#)
- F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean, et J.J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Phys. Rev. Letter*, 80 :61–64, 1998. [2.1](#), [2.1.2](#), [2.1.3](#), [2.1.3](#), [2.1.4](#)
- M. Renouf, F. Dubois, et P. Alart. A parallel version of the non smooth contact dynamics algorithm applied to the simulation of granular media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168 :375–382, 2004. [3.1.3](#)
- V. Richefeu, E. El Youssoufi, M. S. and Azéma, et F. Radjai. Force transmission in dry and wet granular media. *Powder Technology*, 190 :258–263, 2009. [2.1](#)
- V. Richefeu, M. S. El Youssoufi, R. Peyroux, et F. Radjai. A model of capillary cohesion for numerical simulations of 3d polydisperse granular media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32 :1365–1383, 2007. [3.4.3](#)
- A. Ries, D.E. Wolf, et T. Unger. Shear zones in granular media : three-dimensional contact dynamics simulation. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76 :051301, 2007. [3.1.3](#)
- K. H. Roscoe. Tenth rankine lecture : The influence of strains in soil mechanics. *Géotechnique*, 20 : 129–170, 1970. [2.1.2](#)
- K. H. Roscoe, A. N. Schofield, et C. P. Wroth. On the yielding of soils. *Géotechnique*, 8 :22–53, 1958. [2.1.2](#)
- L. Rothenburg et R. J. Bathurst. Analytical study of induced anisotropy in idealized granular materials. *Geotechnique*, 39 :601–614, 1989. [2.1.3](#), [2.1.3](#), [2.1.3](#)
- J.-N. Roux. Contact disorder and nonlinear elasticity of granular packings : a simple model. Dans R. P. Behringer et J. T. Jenkins, éditeurs, *Powders & Grains 97*, pages 215–218, Rotterdam, 1997. Balkema. [2.1.2](#), [2.1.3](#)
- L. Sagalowicz, M.E. Leser, H.J. Wtzke, et M. Michel. Monoglyceride self-assembly structures as delivery vehicles. *Trends in Food Sciences and Technology*, 17 :204–214, 2006. [2.2.1](#)
- B. Saint-Cyr, J.-Y. Delenne, C. Voivret, F. Radjai, et P. Sornay. Rheology of granular materials composed of nonconvex particles. *Physical Review E*, 84 :041302–, 2011. [2.2.3](#), [3.1.3](#)
- M. Satake. Fabric tensor in granular materials. Dans P. A. Vermeer et H. J. Luger, éditeurs, *Proceedings of the IUTAM symposium on deformation and failure of granular materials, Delft*, pages 63–68, Amsterdam, 1982. A. A. Balkema. [2.1.3](#)

- N. Sator, S. Mechkov, et F. Sausset. Generic behaviours in impact fragmentation. *Europhysics Letters*, 81 :44,002, 2008. [3.2.1](#)
- G. Saussine, C. Cholet, P.E. Gautier, F. Dubois, C. Bohatier, et J.J. Moreau. Modelling ballast behaviour under dynamic loading - Part I : A 2D polygonal discrete element method approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :2841–2859, 2006. [3.1.3](#)
- J. R. Seth, L. Mohan, C. Locatelli-Champagne, M. Cloitre, et R. T. Bonnecaze. A micromechanical model to predict the flow of soft particle glasses. *Nature Materials*, 10 :838–843, 2011. [2.10](#), [2.2.3](#)
- K. R. Shull. Contact mechanics and the adhesion of soft solids. *Materials Science and Engineering*, 36 : 1–45, 2002. [2.2.2](#)
- L. E. Silbert, G. S. Grest, R. Brewster, et A. J. Levine. Rheology and contact lifetimes in dense granular flows. *Physical Review Letters*, 99 :068002, 2007. [3.4.2](#)
- A. Singh, V. Magnanimo, K. Saitoh, et S. Luding. The role of gravity or pressure and contact stiffness in granular rheology. *New Journal of Physics*, 17 :043028, 2015. [3.4.2](#)
- L. Staron, J.-P. Vilotte, et F. Radjai. Pre-avalanche instabilities in a granular pile. *Physical Review Letters*, 89 :204302, 2002. [3.1.3](#)
- D. Sulsky, Z. Chen, et H.L. Schreyer. A particle method for history-dependent materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 118 :179–196, 1994. [3.1.3](#)
- D. Sulsky, S.J. Zhou, et H.L. Schreyer. Application of a particle-in-cell method to solid mechanics. *Computer Physics Communications*, 87 :136–252, 1995. [3.1.3](#)
- A. Taboada, K. J. Chang, F. Radjai, et F. Bouchette. Rheology, force transmission, and shear instabilities in frictional granular media from biaxial numerical test using the contact dynamics method. *Journal of Geophysical Research*, 110 :1–24, 2005. [3.1.3](#)
- A. Taboada, N. Estrada, et F. Radjai. Additive decomposition of shear strength in cohesive granular media from grain-scale interactions. *Physical Review Letters*, 97 :098302, 2006. [2.1.1](#), [4.3.1](#)
- Y.J. Tatara, S. Shima, et J.C. Lucero. On compression of rubber elastic sphere over a large range of displacements—part 2 : Comparison of theory and experiment. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113 :292–295, 1991. [2.2.2](#)
- C. Thornton. Force transmission in granular media. *KONA Powder and Particle*, 15 :81–90, 1997. [3.4.2](#)
- V. Topin, J.-Y. Delenne, F. Radjai, L. Brendel, et F. Mabilbe. Strength and failure of cemented granular matter. *European Physical Journal E*, 23 :413–429, 2007. [3.1.1](#)
- V. Topin, F. Radjai, et J.Y. Delenne. Subparticle stress fields in granular solids. *Physical Review E*, 79 : 051302, 2009. [3.1.1](#)
- S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials – Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer-Verlag New York, 2002. [4.2](#)
- F. Toussaint. *Etude expérimentale et simulation numérique de la mise en forme par compression et frittage de poudres*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2001. [2.13](#), [2.2.3](#)
- M. van Hecke. Jamming of soft particles : geometry, mechanics, scaling and isostaticity. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 22 :033101, 2010. [4.3.1](#)
- C. Voivret, F. Radjai, J.-Y. Delenne, et M.S. El Youssoufi. Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, 76 :021301, 2007. [2.1](#)
- O. R. Walton. Numerical simulation of inclined chute flows of monodisperse, inelastic, frictional spheres. *Mechanics of Materials*, 16 :239–247, 1993. [2.1.1](#)
- K.T. Wan, V. Chan, et A. Dillard. Constitutive equation for elastic indentation of a thin-walled biomimetic microcapsule by an atomic force microscope tip. *Colloids and Surfaces B : Biointerfaces*,

- 27 :241–248, 2002. [2.2.2](#)
- J. Wang et H. Yan. On the role of particle breakage in the shear failure behavior of granular soils by dem. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 37 :832–854, 2013. [3.2.1](#)
- Z. Wieckowski. The material point method in large strain engineering problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :4417–4438, 2004. [3.1.3](#)
- D.M. Wood. *Soil behaviour and critical state soil mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, England, 1990. [2.1](#), [2.1.2](#), [2.1.2](#), [5.1.2](#)
- J. Zhang, T. S. Majmudar, M. Sperl, et R.P. Behringer. Jamming for a 2D granular material. *Soft Matter*, 6 :2982–2991, 2010. [4.3.1](#)

Modélisation numérique et rhéologie des matériaux à particules déformables

Résumé: Les matériaux à particules hautement déformables sont des formes complexes de matière avec de nombreuses applications en chimie, pharmacie, cosmétique et agro-alimentaire. L'effet conjugué du désordre et des grandes déformations des particules conduit à des propriétés mécaniques nouvelles par rapport aux matériaux à particules indéformables. En particulier, la compressibilité et la résistance au cisaillement sont contrôlées par une combinaison de réarrangements et de changement de forme des particules. Dans ce travail de thèse, nous avons développé une approche numérique originale pour la simulation de ces systèmes. Pour permettre aux particules de se déformer indéfiniment, nous avons modélisé chaque particule par un agrégat de particules primaires sans frottement qui interagissent par une force d'attraction de type Lennard-Jones et une contrainte de non-interpénétration. La dissipation d'énergie par collisions inélastiques entre les particules primaires confère un caractère plastique aux déformations des particules. Nous avons utilisé ce modèle pour étudier les propriétés de compaction et de cisaillement de ces systèmes. Nos résultats ont permis de mettre en évidence le caractère non-linéaire de la compressibilité lorsque la compacité progressivement augmente au-delà de celles des assemblages de particules indéformables. Sous cisaillement, un état critique est atteint avec une dilatance contrôlée par la pression de confinement. Dans cet état, nous avons exploré les distributions des formes des particules, les textures et les distributions des forces pour différentes valeurs de la pression. Nous avons également comparé la compressibilité simulée par l'approche développée avec celle obtenue par la Méthode des Points Matériels (MPM) en utilisant des particules élastiques.

Mots-clés: Matériaux granulaires, Compacité, Transition de blocage, Méthode des points matériels, Méthode de dynamique des contacts.

Numerical modeling and rheology of soft particle materials

Abstract : Soft-particle materials are complex forms of matter that occur in numerous applications in chemical, pharmaceutical, cosmetic and food products. Joint effects of disorder and large particle deformations lead to novel mechanical properties that differ from those of rigid-particle materials. In particular, the compressibility and shear resistance depend on both particle rearrangements and their shape change. In this doctoral work, we developed an original approach for numerical simulation of these systems. To allow the particles to deform without breakage, each particle is modeled as an aggregate of frictionless primary particles interacting via a Lennard-Jones attraction force and impenetrability constraints. Energy dissipation by inelastic collisions between primary particles leads to the plastic nature of particle deformations. This model was used to investigate the compaction and shear behavior of soft-particle systems. We find that the compressibility is strongly nonlinear as the packing fraction increases beyond that of a random close packing of rigid particles. In continuous shearing, a critical state is reached with a dilatancy that depends on the confining pressure. In this state, we investigate the shear resistance, distributions of particle shapes, fabric properties and inter-particle forces as a function of the confining pressure. We also compare our results with those obtained by using the Material Point Method (MPM) with elastic particles.

Keywords : Granular materials, Packing fraction, Jamming transition, Material point method, Contact dynamics method.