



**HAL**  
open science

# Modélisation mécanique des milieux particuliers complexes

Saeid Nezamabadi

► **To cite this version:**

Saeid Nezamabadi. Modélisation mécanique des milieux particuliers complexes. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université de Montpellier, 2020. tel-03009469

**HAL Id: tel-03009469**

**<https://hal.science/tel-03009469>**

Submitted on 17 Nov 2020

**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.



Université de Montpellier

## Habilitation à Diriger des Recherches

préparée au sein de l'école doctorale

**Informations, Structures, Systèmes (I2S)**

Spécialité : **Mécanique et Génie civil**

# Modélisation mécanique des milieux particulaires complexes

présentée par

**Saeid Nezamabadi**

soutenue le 06/11/2020 devant le jury composée par :

Pascale Aussillous	Professeur	Université Aix-Marseille	Rapporteur
Djimédo Kondo	Professeur	Sorbonne Université	Rapporteur
Jean-Noël Roux	Chercheur	IFSTTAR - Université Gustave Eiffel	Rapporteur
Thierry Ruiz	Professeur	Université de Montpellier	Examineur
Michel Potier-Ferry	Professeur Emérite	Université de Lorraine	Examineur
Jean-Yves Delenne	Directeur de Recherche	INRAe - Université de Montpellier	Examineur
Farhang Radjai	Directeur de Recherche	CNRS - Université de Montpellier	Examineur



*À Zahra et ...*



# Résumé

Ce mémoire est une synthèse des travaux de recherche effectués au sein de l'équipe *Physique et Mécanique des Milieux Divisés* (PMMD) du *Laboratoire de Mécanique et Génie Civil* (LMGC) de l'Université de Montpellier. Les contributions présentées portent sur des développements théoriques et numériques novateurs pour la modélisation et l'étude de la mécanique des matériaux particulaires. Ces matériaux sont des assemblages désordonnés de particules solides qui jouent un rôle majeur dans de nombreux procédés industriels et interviennent dans de nombreux phénomènes naturels en lien avec l'environnement et le vivant. Les particules qui les constituent peuvent prendre des formes et des tailles variées et peuvent également évoluer sous l'effet d'actions mécaniques ou de transformations chimiques. Depuis le début de ma carrière en tant que Maître de Conférences, je me suis intéressé principalement à deux cas jusqu'ici peu explorés malgré leur fort intérêt applicatif : (i) les matériaux à particules molles en grandes déformations, et (ii) les matériaux granulaires en milieu humide. Pour modéliser les particules molles, différentes stratégies numériques ont été développées permettant de prendre en compte à la fois leur déformation et leurs interactions de contact frottant. La présence de l'humidité a été simulée en considérant des interactions cohésives et visqueuses entre les particules. Ces approches numériques ont été appliquées à l'étude des propriétés rhéologiques et microstructurales des matériaux granulaires humides ou à particules déformables.



# Table des matières

Résumé	5
<b>I Synthèse générale de mes activités de recherche</b>	<b>9</b>
Milieux continus	11
Milieux divisés	14
<b>II Document scientifique</b>	
<b>Modélisation mécanique des milieux particulaires complexes</b>	<b>17</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>19</b>
<b>1 Modélisation des matériaux particulaires</b>	<b>23</b>
1.1 Méthodes discrètes pour les particules dures . . . . .	23
1.1.1 Méthode de dynamique moléculaire . . . . .	23
1.1.2 Méthode de dynamique des contacts . . . . .	27
1.2 Modélisation des matériaux à particules molles . . . . .	27
1.2.1 Méthode BPM . . . . .	28
1.2.2 Approche MPM-CD . . . . .	28
1.2.3 Approche FEM-CD . . . . .	30
<b>2 Étude des particules molles</b>	<b>33</b>
2.1 Compaction d'assemblages de particules molles . . . . .	33
2.1.1 Assemblages de particules élastiques linéaires . . . . .	33
2.1.2 Assemblages de particules néo-Hookéens . . . . .	35
2.1.3 Assemblages de particules plastiques . . . . .	40
2.1.4 Connectivité des particules et la compaction . . . . .	45
2.1.5 Simulations vs. Expériences . . . . .	46
2.2 Compression bi-axiale d'assemblages de particules molles . . . . .	48
2.2.1 Compression isotrope . . . . .	48
2.2.2 Compression bi-axiale . . . . .	52
<b>3 Milieux granulaires humides</b>	<b>57</b>
3.1 Écoulement des matériaux granulaires humides . . . . .	57
3.2 Agglomération des matériaux granulaires humides . . . . .	61
3.2.1 Évolution d'un agglomérat dans un tambour tournant . . . . .	61
3.2.2 Évolution d'un agglomérat en écoulement de cisaillement . . . . .	64
3.2.3 Résistance d'agglomérats granulaires humides . . . . .	66

<b>Conclusions</b>	<b>69</b>
<b>Projet de recherche</b>	<b>71</b>
Particules molles . . . . .	71
Milieux granulaires cohésifs . . . . .	73
Milieux cellulaires . . . . .	74
Rupture . . . . .	75
<b>Bibliographie</b>	<b>79</b>
<b>Articles dans des revues internationales</b>	<b>86</b>
<b>Ouvrages et chapitres d'ouvrages</b>	<b>89</b>
<b>Communications dans des congrès</b>	<b>91</b>

## **Première partie**

# **Synthèse générale de mes activités de recherche**



Mes travaux de recherche peuvent être divisés en deux catégories : modélisation multi-échelle des milieux (i) continus et (ii) divisés. La première partie concerne mes activités de recherche pendant ma thèse et mes post-doctorats, et les collaborations réalisées dans ce cadre. Elles se sont inscrites dans le cadre de la modélisation multi-échelle des matériaux hétérogènes et de l'analyse de vibrations non-linéaires de *Nano Electro-Mechanical System* (NEMS). Les travaux de la deuxième partie ont été réalisés au sein de l'équipe *Physique et Mécanique des Milieux Divisés* (PMMD) du *Laboratoire de Mécanique et Génie Civil* (LMGC) de l'Université de Montpellier. J'ai choisi de consacrer le document scientifique de ce mémoire (Partie II) à mes travaux relatifs aux milieux discrets, qui constituent une majorité de mes activités actuelles de recherche. Néanmoins, dans cette partie, je présente brièvement les deux axes de recherche que j'ai pu développer.

## Milieux continus

### *Etude multi-échelle d'instabilités dans les matériaux hétérogènes*

Mes activités de recherche ont débuté avec ma thèse de doctorat au *Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux* (LPMM)<sup>1</sup> de l'Université Paul Verlaine - Metz<sup>2</sup> en 2006 sous la direction de *Hamid Zahrouni* et *Julien Yvonnet*. Le sujet était l'étude multi-échelle des instabilités dans les matériaux hétérogènes utilisant la Méthode Asymptotique Numérique (MAN). Nous avons proposé une technique numérique originale et efficace pour résoudre des problèmes de structures hétérogènes en grandes déformations, avec instabilités possibles aux niveaux microscopique et macroscopique. La méthode combine la méthode des éléments finis multi-échelles (EF<sup>2</sup>) et la MAN. Dans le cadre de la EF<sup>2</sup>, on utilise deux niveaux pour décrire la géométrie : (i) niveau macroscopique où l'on peut représenter la géométrie et les conditions aux limites ; (ii) niveau microscopique où l'on peut introduire le comportement des constituants et leur répartition locale. Les deux niveaux sont couplés par les techniques d'homogénéisation. En appliquant cette procédure, on peut montrer que les charges maximales, quand elles existent, sont associées à des bifurcations du problème microscopique, que le comportement soit (hyper)élastique [23, 21, Art] ou élasto-plastique [22, 20, Art]. Cette (quasi)coïncidence entre instabilité locale et charge limite globale avait été prédite théoriquement par Triantafyllidis et Maker, (1985) [129]. Dans cet article, les auteurs avaient également remarqué que le problème global perdait son ellipticité lorsque le problème local atteignait une bifurcation.

Partant de ce constat, nous avons cherché à caractériser la rupture en compression des composites à fibres longues en associant notre approche multi-échelle avec une condition de perte d'ellipticité au niveau macroscopique [17, Art]. Il est connu que cette rupture est due à une instabilité locale appelée micro-flambage et que celle-ci est fortement influencée par les ondulations des fibres et la non-linéarité du comportement de la matrice. Nous avons montré des prédictions de rupture très proches de la solution analytique par bandes de cisaillement [18]. Ceci montre qu'une modélisation de type EF<sup>2</sup> associée à une condition de perte d'ellipticité donne une procédure claire et robuste de prédiction de la rupture compressive, qui peut être aisément appliquée à d'autres composites que les fibres longues, sans limitations sur la géométrie et le comportement des matériaux ; voir la figure 1.

A noter que cette approche multi-échelle du premier ordre a l'inconvénient de ne pas décrire précisément la réponse de la structure au voisinage de la rupture. Cela ne permet pas non plus de prédire les longueurs d'ondes de micro-flambage, qui ne peuvent être obtenues qu'avec un modèle macroscopique à longueur interne. Pour cela, une technique d'homogénéisation du second ordre a été également adaptée dans le cadre de la méthode MAN multi-échelle [46, 36, Conf] ; voir la figure 2. Dans cette technique, le double gradient de déformation macroscopique est considéré dans la transition cinématique micro-macro. Le tenseur des contraintes macroscopiques et le tenseur des contraintes d'ordre élevé sont extraits en utilisant une extension de la condition de Hill-Mandel. Un milieu continu d'ordre supérieur est obtenu au niveau macroscopique, tandis que le problème aux limites microscopique reste classique. Ainsi, le calcul d'homogénéisation du second ordre établit directement une réponse de comportement du second ordre au niveau macroscopique sans hypothèses supplémentaires au niveau microscopique. Par conséquent, cette extension

1. Actuellement *Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux* (LEM3)

2. Actuellement Université de Lorraine

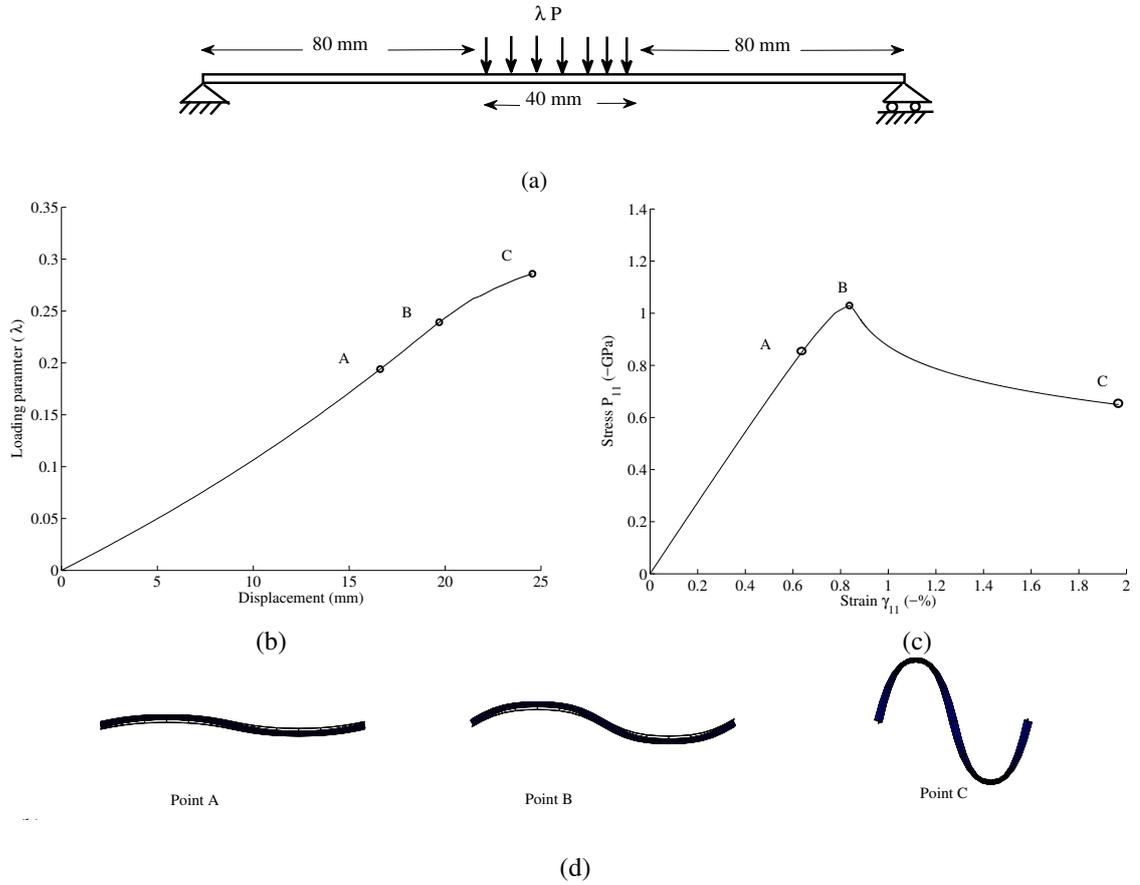
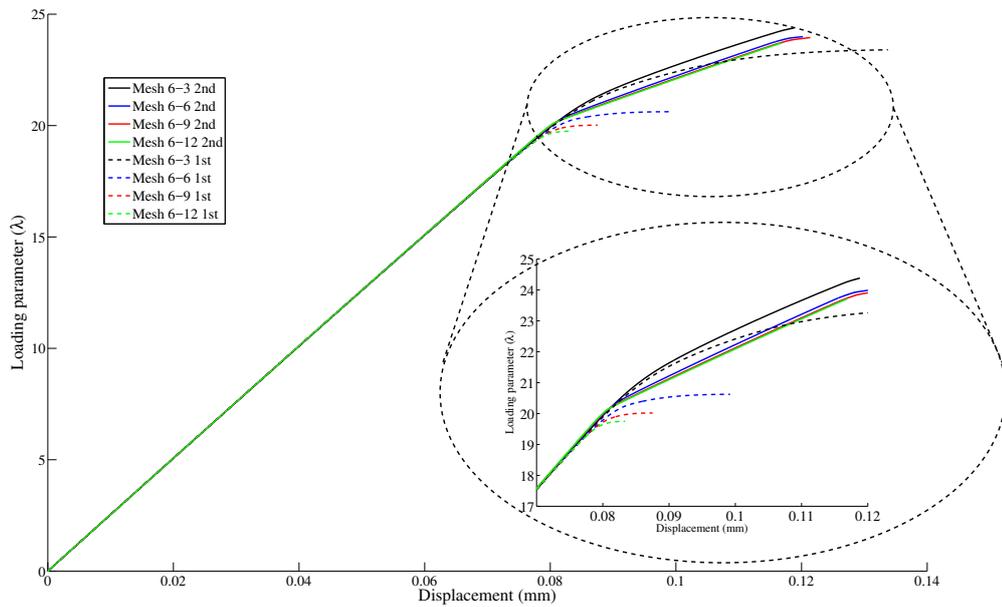
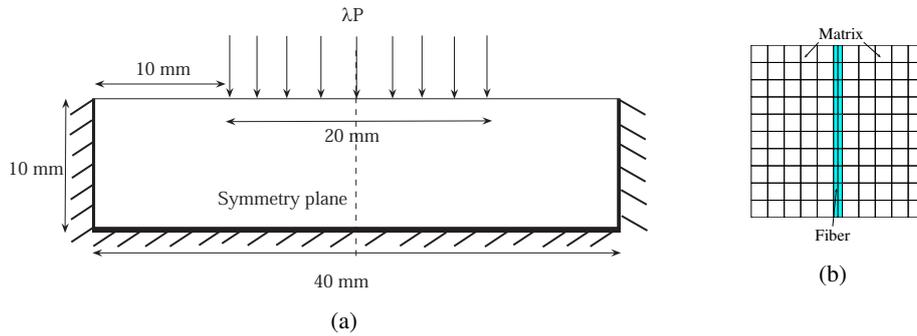


FIGURE 1 – Etude numérique analysant le défaut de compression d’un composite à fibre longue ; (a) Géométrie et conditions aux limites pour la structure macroscopique ; (b) Le paramètre de chargement  $\lambda$  en fonction du déplacement d’un point situé en haut au centre de la structure pour la microstructure présentée sur la figure (d) ; (c) Le diagramme contrainte-déformation de la microstructure ; (d) La configurations déformées de la microstructure d’un composite à fibres longues aux différents points présentés sur les figures (b) et (c). Le changement des comportements macroscopique est microscopique a constaté au point *B*, qui correspond au point de perte d’ellipticité ; pour plus des détails, voir [17, Art].

de la méthode MAN multi-échelle permet un meilleur conditionnement du problème macroscopique en présence d’instabilités au niveau de la microstructure.

Deux autres pistes ont été également considérées pour améliorer le conditionnement du problème macroscopique en présence d’instabilités. La première est une nouvelle méthode d’homogénéisation pour traiter une séparation d’échelle arbitraire dans le cas d’un milieu non-linéaire hétérogène lorsque les échelles ne sont pas séparées [24, Conf]. Cette approche est basée sur l’utilisation de l’opérateur de filtre passe-bas au lieu de l’opérateur moyenne, et les fonctions non-locales de Green au lieu des opérateurs de localisation, qui sont utilisées dans le cadre de l’homogénéisation classique [140]. La deuxième piste concerne une approche basée sur l’introduction d’une technique de projection au niveau microscopique. Étudiée pendant le post-doctorat de *Yu Cong*, l’idée principale de cette approche est de réaliser l’analyse modale de manière indépendante sur la microstructure. Cette opération conduira à un ou plusieurs vecteurs de mode qui, par projection, permettent de définir un espace vectoriel restreint, sur lequel le problème microscopique recherche un état d’énergie minimale. Cela évitera la perte d’ellipticité du problème macroscopique [30, Conf]. L’étude de ces deux techniques présentées est encore en cours.

Une méthode multi-échelle basée sur la méthode des séries de Fourier à coefficients variables a été également introduite afin de modéliser les principales caractéristiques des rides, mais en utilisant des équations



(c)

FIGURE 2 – Etude numérique comparant l’homogénéisation du second ordre avec celle du premier ordre ; (a) La structure macroscopique du problème de compression d’un matériau composite à fibres longues ; (b) La microstructure associée au matériau composite à fibres longue ; (c) Le paramètre de chargement  $\lambda$  en fonction du déplacement d’un point situé en haut au centre de la structure pour les deux techniques et pour différents maillages macroscopiques (le maillage  $m \times n$  désigne un maillage avec  $m$  éléments dans la longueur et  $n$  éléments dans la largeur). Cela montre une convergence assez rapide de la charge critique de flambage pour l’homogénéisation du second ordre contrairement de l’homogénéisation du premier ordre. Cette convergence confirme que la solution obtenue à l’aide de l’homogénéisation du second ordre ne dépend pas du maillage macroscopique lorsque la taille de la microstructure n’est pas négligeable par rapport à la longueur d’onde du champ de déformation macroscopique ; voir [36, Conf].

différentielles partielles uniquement à un niveau macroscopique [15, Art]. Dans cette méthode, la solution est recherchée sous la forme de quelques termes de séries de Fourier dont les coefficients varient plus lentement que les oscillations. La contrainte macroscopique est définie par les coefficients de Fourier de la contrainte microscopique. En ce sens, la technique actuelle est similaire à la théorie de l’homogénéisation dans laquelle une analyse à double échelle permet de déduire le comportement global macroscopique à partir de celui microscopique. Cette méthode est donc adaptée à la description du couplage entre instabilités locale et globale.

### Autres études multi-échelle

Une approche multi-échelle pour l'analyse des vibrations des matériaux hétérogènes a été développée dans le cadre du stage de *Kodjo Attipou* [M<sub>2</sub>1] [19, Art]. Cette technique, basée sur la méthode EF<sup>2</sup>, a été appliquée à l'étude des vibrations libres des matériaux hétérogènes viscoélastiques. Nous avons étudié notamment l'influence sur les propriétés amortissantes de différents paramètres comme le rapport de rigidité, la fraction volumique et la morphologie de l'inclusion.

Dans le cadre de la thèse de *Yu Cong* [T0a], une méthode d'homogénéisation numérique pour les structures minces comportant des hétérogénéités à l'échelle microscopique a été proposée [18, Art]. Cette approche multi-échelle couple deux échelles, où l'échelle macroscopique est décrite par un modèle coque utilisant une cinématique enrichie à 7 paramètres, et un modèle volumique local. Elle permet un traitement efficace des non linéarités et des instabilités par le biais de développements asymptotiques.

Enfin, dans le cadre des matériaux numériques, on utilise directement dans la simulation numérique des images de la microstructure réelle, par exemple à partir de micro-tomographie. Dans ce contexte, la méthode de la transformation rapide de Fourier (FFT) est souvent utilisée pour résoudre le problème des cellules unitaires. Dans cette méthode, pour évaluer les équations constitutives à chaque itération, le produit de convolution et les opérateurs de Green concernés sont évalués dans l'espace de Fourier. Pour éviter l'utilisation de FFT, Yvonnet (2012) [139] a proposé une procédure similaire, appelée technique Space Lippmann Schwinger, dans laquelle l'opérateur de convolution est calculé numériquement. Nous avons proposé une extension de cette technique au cas des matériaux hétérogènes géométriquement non-linéaires (les non-linéarités matérielle et géométrique); [41, Conf].

### Vibrations non linéaires de NEMS

Mes travaux du post-doctorat au *Laboratoire de Mécanique des Structures et des Systèmes Couplés* (LMSSC) - CNAM Paris, entre 2010 et 2011 concernaient la mise en place des modèles réalistes et réduits pour modéliser des nano-systèmes électromécaniques (*Nano Electro- Mechanical System* : NEMS) à actionnement et détection piézoélectrique. Ils se sont inscrits dans le projet ANR, NEMSPIEZO, dont l'objectif principal était de concevoir et fabriquer ces nano-systèmes. Le but de notre étude était de fournir des outils numériques pour simuler le comportement en vibration non linéaire de ces systèmes dans un objectif de conception [42, 44, 40, 39, 35, Conf]; voir la figure 3.

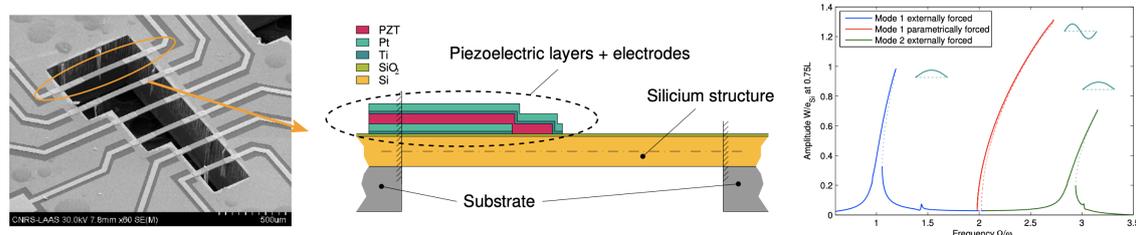


FIGURE 3 – Exemple de nano-poutre étudiée dans ce travail. (Gauche) photographie prise au microscope électronique à balayage. (Centre) schéma du système étudié. (Droite) amplitude maximale  $W$  du déplacement de la nano-poutre à  $x = 0,75l_b$  ( $l_b$  la longueur de la non-poutre) en fonction de la pulsation d'excitation  $\Omega$ . Les grandeurs adimensionnées  $W/e_{Si}$ , avec  $e_{Si}$  l'épaisseur de la couche de silicium, et  $\Omega/\omega_1$ , avec  $\omega_1$  la pulsation propre du premier mode du système, sont représentées.

## Milieus divisés

En 2011, recruté comme Maître de Conférences, mes activités de recherche se sont poursuivies au sein de l'équipe *Conception en Structures* (CS) du LMGC. Cette équipe s'intéressait à la conception morphologique des structures de forme libre et des grands systèmes à géométrie variable (par exemple les structures déployables). Dans ce cadre, mes activités ont d'abord porté sur l'étude numérique des instabilités dans les membranes [37, Conf]. Ensuite, comme la modélisation de la morphogenèse des tissus biologiques consti-

tuait un sujet de recherche émergeant de l'équipe CS, mes actions de recherche ont été progressivement orientées vers la modélisation des milieux cellulaires. Le caractère pluridisciplinaire de mes travaux et la convergence d'une thématique de recherche forte autour des milieux divisés m'ont alors conduit à rejoindre l'équipe nouvellement constituée PMMD en 2013. Cette équipe propose un projet pluridisciplinaire riche qui couvre des problèmes allant de l'échelle des particules et des interactions colloïdales jusqu'aux milieux continus, en abordant la transition discret-continu par une approche multi-échelle.

Dans le cadre des projets de l'équipe PMMD, mes travaux de recherche se sont centrés sur l'étude du comportement des milieux divisés, en particulier les matériaux à particules déformables (cellules, poudres métalliques...). Les recherches menées s'appuient sur la modélisation de ces matériaux en prenant en compte le comportement individuel des particules ainsi que leurs interactions. En vue d'applications à divers matériaux et/ou procédés industriels (chimique, pharmaceutique, cosmétique, agroalimentaire...), des méthodes numériques pour la modélisation mécanique des matériaux à particules hautement déformables ont été développées [16, 14, 11, Art]. Dans ce cadre, j'ai co-encadré les thèses de *Thanh Hai Nguyen* [T1] et de *Thi-Lo Vu* [T2]. J'ai également co-encadré la thèse de *Thanh Trung Vo* [T3] sur l'étude numérique de la rhéologie et le processus d'agglomération de matériaux granulaires humides impliquant des interactions cohésives et visqueuses venant s'ajouter à celles de contact frottant.

Par ailleurs, j'ai initié la création de l'axe transversal *Modélisation des Milieux Cellulaires* (M2Cell) dont j'ai assuré la responsabilité jusqu'à présent. Cet axe avait pour objectif de fournir un cadre d'échanges et de collaborations autour de la modélisation mécanique des milieux cellulaires à différentes échelles. En effet, ces milieux, tels que les mousses solides ou liquides et tissus biologiques, intéressent plusieurs équipes du laboratoire et demandent le développement des modélisations novatrices. Dans le cadre de cet axe, deux articles ont été publiés [16, 11, Art], et deux projets ANR et un projet régional (Chercheur d'Avenir) ont été déposés. De plus, il convient de noter que globalement, j'ai déposé plusieurs projets de recherche dont un projet (Agropolis Fondation) accepté et deux autres (ANR et MUSE) actuellement en deuxième phase d'évaluation.

Pendant cette période, j'ai développé des activités de recherche avec l'INRAE Montpellier, notamment avec le laboratoire IATE<sup>3</sup>, dans le cadre d'un contrat de collaboration de recherche entre l'UM et l'INRAE depuis 2015. Cette collaboration active a permis de publier plusieurs articles [13, 16, 14, 11, 12, 10, 7, 4, 2, 3, Art]. De plus, afin de développer des collaborations au niveau international, j'ai proposé un programme de recherche pour initier une collaboration entre notre équipe PMMD et le groupe de recherche de M. Ghadiri<sup>4</sup> de l'Université de Leeds. Ce groupe est très connu au niveau international dans le domaine de la technologie des poudres et plus particulièrement dans la modélisation et l'expérimentation sur les procédés industriels liés aux poudres et aux matériaux granulaires. Dans ce cadre, un projet commun a été défini pour l'analyse du comportement de l'écoulement de poudres cohésives en considérant également la déformabilité des particules. J'ai pu obtenir un "Congé pour Recherches ou Conversions Thématiques" (CRCT) pour l'année scolaire 2018-2019 ainsi que le soutien de l'Agropolis Fondation pour une mobilité internationale. Les résultats initiaux ont permis de publier quelques articles [5, 6, 4, Art].

Enfin, je me suis investi pleinement dans la vie de la communauté scientifique des milieux divisés à travers différentes actions telles que la participation à l'organisation de la conférence internationale *Powders and Grains*. Cette conférence, qui est la plus importante dans le domaine des milieux divisés, a eu lieu à Montpellier du 3 au 7 juillet 2017. J'ai été également coéditeur thématique du journal *EPJ Web of Conferences* dans lequel ont été publiées les communications de cette conférence [1, Ouvr]. De plus, j'ai organisé dans le cadre de la collaboration avec l'université de Leeds un colloque international intitulé *Powders and Granular Materials : Challenges and Future Trends* (<https://pgm2019.sciencesconf.org/>), qui a eu lieu le 6 et le 7 juin 2019 à Montpellier.

---

3. Ingénierie des Agropolymères et Technologies Emergentes

4. <http://ghadiri-group.leeds.ac.uk/>

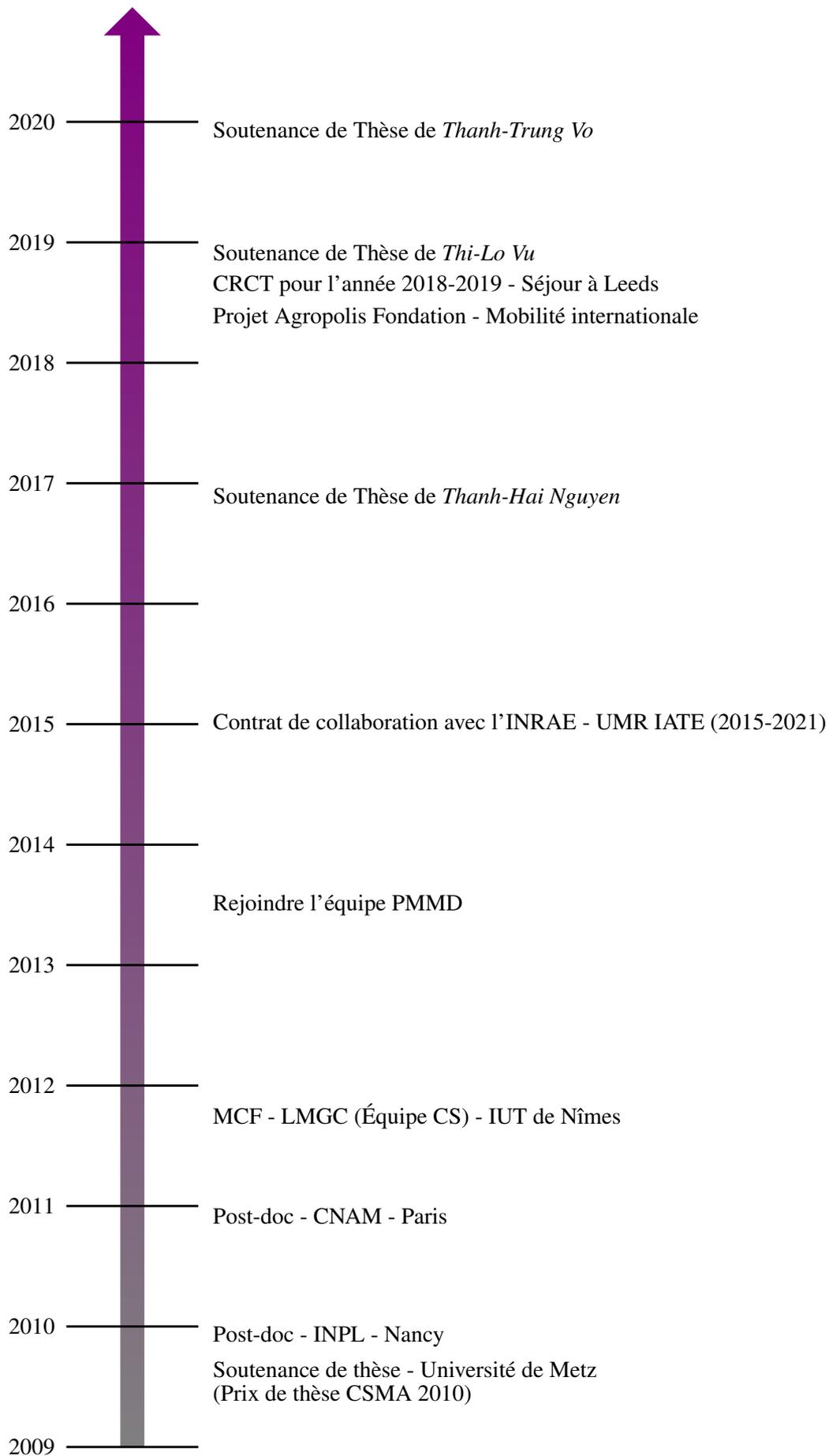


FIGURE 4 – Déroulement de mes activités de recherche.

**Deuxième partie**

**Document scientifique**

**Modélisation mécanique des milieux  
particulaires complexes**



# Introduction générale

Dans cette partie, je présente la ligne directrice de mes activités de recherche sur les matériaux particulaires et les différents travaux qui s’y rapportent. Ces travaux s’appuient pour une part sur les travaux de thèse de *Thanh-Hai Nguyen*, *Thi-Lo Vu* et *Thanh Trung Vo*. Ces thèses ont été co-encadrées avec *Farhang Radjai* et *Serge Mora* du LMGC et *Jean-Yves Delenne* (INRAE) de l’UMR IATE.

Les matériaux particulaires ou granulaires sont des formes complexes de la matière que l’on trouve en abondance dans la nature et dans l’industrie. La grande majorité des produits de consommation se présentent sous forme de particules où l’ont été à l’une des étapes de leur fabrication. On peut citer comme exemples les produits pharmaceutiques et alimentaires, les cosmétiques, les produits chimiques, les combustibles nucléaire et de nombreux matériaux de construction. Les matériaux particulaires se présentent sous la forme d’assemblages de particules bien individualisées qui interagissent par des contacts frottants, des liaisons solides, des ponts liquides ou des forces chimiques [97, 101, 68]. Leurs comportements complexes peuvent dépendre de la pression, de la densité et souvent du temps [137, 33]. Les milieux particulaires peuvent se présenter sous une multitudes de formes avec des particules de géométries, tailles et propriétés très variées qui peuvent évoluer sous l’effet des actions mécaniques (déformation ou fragmentation) ou chimiques [42, 134, 8, 19]. La combinaison des réarrangements et des propriétés des particules contrôle les caractéristiques rhéologiques comme la compressibilité ou l’écoulement mais aussi la microstructure. L’état de cette microstructure est sensible aux forces interfaciales entre les particules (frottement, adhésion...) et aux facteurs environnementaux (température, humidité...). La texture désordonnée et la transmission des contraintes hétérogènes, caractéristiques des milieux particulaires a été étudiée en détail par [48, 97].

Dans ce mémoire, on se concentre sur l’étude du comportement de matériaux granulaires humides ou à particules molles. Les matériaux composés de particules molles constituent une classe importante mais peu étudiée de milieux particulaires. Ils jouent un rôle majeur dans les sciences naturelles et dans de nombreux procédés industriels. Ces matériaux sont composés d’un réseau désordonné de particules solides capables de subir de grandes déformations mécaniques (élastiques ou inélastiques) sans rompre. Des exemples de ces matériaux sont les mousses, les émulsions, de nombreuses suspensions colloïdales, les cellules biologiques et les poudres métalliques (Figure 1). Les matériaux à particules molles diffèrent de ceux à particules dures dont le comportement plastique est principalement régi par les réarrangements de particules et le glissement par frottement. Pour ces derniers la compacité ne peut pas dépasser la limite de la compacité de l’assemblage aléatoire compact (*Random Close Packing* : RCP). Dans le cas de particules molles il est possible de dépasser le seuil du RCP du fait du changement de forme tout en autorisant l’écoulement plastique en raison du glissement des particules. Ces glissement peuvent se produire progressivement laissant les particules changer de forme sous l’effet de contraintes élastique ou inélastique (voir par exemple [22, 133]). Un point important sera donc d’analyser les effets conjoints des réarrangements locaux et du changement de forme des particules en tenant compte de l’évolution des propriétés d’assemblage à petite échelle au cours des déformations. En particulier, quand l’assemblage des particules molles atteint des compacités dépassant largement celle du RCP, une question centrale est de savoir si les lois rhéologiques connues pour les matériaux granulaires à particules rigides continuent à s’appliquer. Ce point n’a pratiquement pas encore été abordé par les chercheurs en physique et mécanique travaillant sur les milieux granulaires.

Par ailleurs, il est important de considérer également les matériaux granulaires plus complexes qui, en plus du contact et du frottement, interagissent via des liaisons cohésives ou des forces visqueuses. Ces interactions affectent la résistance et les propriétés d’écoulement du matériau à l’état solide sous charge ex-

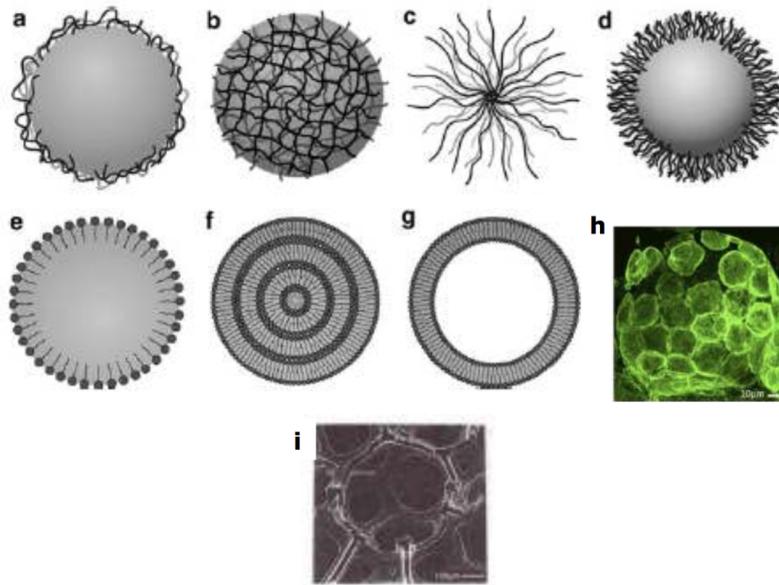


FIGURE 1 – Différents types de particules molles : (a) particules solides recouvertes de polymères absorbés ou greffés, (b) particules de microgel, (c) polymères en étoile, (d) micelle de copolymères à bloc, (e) émulsion de gouttelettes, (f) vésicule multi-lamellaire, (g) liposome, (h) cellules biologiques, et (i) poudres métalliques ; [15].

terne et pendant leur écoulement en cisaillement. Un exemple typique est celui des matériaux granulaires humides tels que les sols mouillés ou les poudres à forte humidité. Le liquide de liaison induit à la fois une force de cohésion capillaire et une force visqueuse pendant l'écoulement granulaire. Un autre exemple est celui des suspensions denses de particules colloïdales dans un fluide où les forces lubrifiantes et colloïdales entrent en jeu. Les matériaux cohésifs ont été étudiés par des expériences et des simulations de la dynamique des particules et appliqués au processus d'agglomération (Figure 2). De même, les effets des forces visqueuses sur la rhéologie des milieux granulaires denses ont été analysés dans des suspensions et pour des assemblages de particules interagissant par des forces de lubrification. Cependant, les effets conjoints des forces visqueuses et cohésives ont été peu étudiés.



FIGURE 2 – Tambour de granulation.

Dans le contexte des matériaux particulaires, la simulation numérique peut contribuer à une meilleure compréhension et une modélisation théorique de ces matériaux. Pour cela, deux principales approches numériques peuvent être utilisées : (i) l'approche continue, dans laquelle les matériaux particulaires sont

supposés constituer un milieu continu, et (ii) la modélisation par éléments discrets, dans laquelle, le comportement et les interactions des particules individuelles sont pris en compte. La première méthode est basée sur la définition de lois de comportement phénoménologiques qui rendent compte de la dynamique des particules. Un inconvénient particulier de l'utilisation de ces lois phénoménologiques est qu'une série d'expériences complexes et coûteuses ou des développements théoriques complexes est souvent nécessaire pour initialiser les paramètres de ces modèles. Une autre limite est que les comportements individuels, les tailles et les formes des particules ainsi que leurs interactions ne peuvent pas être pris en compte dans ces simulations des matériaux particulaires. En effet, il s'agit d'une limitation importante, car ces propriétés des particules ont un impact majeur sur le comportement des matériaux particulaires [117, 144].

Une approche alternative est la classe des méthodes numériques en éléments discrets, qui offrent un potentiel remarquable grâce au développement rapide de la puissance de calcul. Elles sont considérées aujourd'hui comme des approches mûres et bien établies pour une utilisation efficace dans les domaines de la technologie des poudres, de la mécanique des sols et de la géologie. Ces approches ont été développées pour la simulation d'assemblages de particules en supposant que ces dernières sont dures ou faiblement déformables. Cependant, on peut adapter les approches discrètes aux systèmes particulaires dans lesquels les interactions entre particules ou leur déformabilité sont pris en compte. Dans ce mémoire, on considère ces approches discrètes pour étudier le comportement de matériaux granulaires humides ou à particules déformables. Le document scientifique est ainsi structuré en trois chapitres.

Dans le premier chapitre, on aborde d'abord les méthodes discrètes les plus classiques – *Molecular Dynamics* (MD) et *Contact Dynamics* (CD). Une extension de la méthode MD est ensuite présentée pour la prise en compte des interactions cohésives et visqueuse en plus du contact frottant. Pour traiter les particules déformables, qui peuvent subir de grandes déformations, deux stratégies numériques sont proposées : (i) la modélisation des particules avec des approches continues – *Material Point Method* ou *Finite Element Method* –, et (ii) une discrétisation des particules déformables par des particules primaires rigides. Dans les deux cas, la méthode CD est utilisée pour traiter les contacts frottants. Ces outils sont à la base des études numériques présentées dans les chapitres suivants.

Le deuxième chapitre concerne des matériaux à particules déformables. On analyse d'abord la compression uni-axiale de ces matériaux en considérant différentes approches numériques et lois de comportement (élastique ou plastique). Une étude de la rhéologie quasi-statique des assemblages cisailés est ensuite présentée. Enfin, une comparaison à l'échelle macroscopique et microscopique du comportement sous compaction d'un assemblage de particules molles est montré dans les cas expérimental et numérique.

Le troisième chapitre est consacré à des matériaux granulaires humides. On se concentre d'abord sur la rhéologie additive de l'écoulement de ces matériaux. On s'intéresse ensuite à la procédure de l'agglomération dans un tambour tournant et en conditions périodiques d'écoulement sous l'effet d'un cisaillement. Un essai de compression radiale est également effectué afin d'étudier la résistance mécanique des agglomérats.

Le document scientifique se termine par des conclusions générales sur l'ensemble de ces travaux et des orientations futures de recherche.



# Chapitre 1

## Modélisation des matériaux particulaires

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la modélisation des milieux particulaires et plus particulièrement à la mise en place des outils numériques utilisés dans mes travaux. Deux types d'approches dépendant de la nature de particules sont présentés ci-dessous : les techniques pour des particules dures et molles. Pour les particules dures, les stratégies numériques développées ne prennent en compte que les degrés de liberté d'un corps rigide. Ceci permet de modéliser des systèmes avec un nombre important de particules. Par contre, pour les particules molles, les degrés de liberté internes doivent être pris en compte pour simuler leurs grandes déformations. Nous décrivons brièvement dans ce chapitre les approches numériques appliquées aux études présentées dans les chapitres suivants.

### 1.1 Méthodes discrètes pour les particules dures

Différentes méthodes ont été développées pour modéliser les matériaux particulaires. Des stratégies numériques efficaces fondées sur une modélisation par éléments discrets (*Discrete Element Method* : DEM) peuvent être considérées comme l'outil le plus puissant et robuste pour la modélisation des assemblages de particules dures en raison de leur potentiel à prendre en compte toutes conditions de chargement, distributions de taille et propriétés physiques des particules. Dans ces méthodes, les équations de mouvement rigide des particules sont résolues en tenant compte des interactions entre les particules en contact. Les stratégies numériques basées sur la DEM incluent la dynamique moléculaire (*Molecular Dynamics* : MD) et la dynamique des contacts (*Contact Dynamics* : CD).

#### 1.1.1 Méthode de dynamique moléculaire

La méthode MD, développée à l'origine pour la modélisation d'interactions moléculaires, a été proposée par Cundall [25] pour modéliser les milieux granulaires. Elle est basée sur un schéma d'intégration temporel explicite pour résoudre les équations du mouvement pour toutes les particules en prenant en compte des interactions entre elles comme une loi force-déplacement. Les contacts entre les particules sont donc supposés d'être localement souples bien que les particules sont traitées comme des objets rigides. Les contacts obéissant à un comportement élastique dans lequel la variable de déformation au contact est déduite des positions et déplacements relatifs des particules. Une force visqueuse peut être également considérée pour prendre en compte le caractère inélastique du contact et des chocs entre particules. La MD a été largement utilisée pour l'étude des matériaux particulaires [90, 131, 58, 132, 125, 125, 73, 40, 39, 1].

Dans la MD, le mouvement de chaque particule sphérique rigide  $i$  de rayon  $R_i$  est régi par la deuxième loi de Newton sous l'action des forces de contact normales  $f_n$ , tangentielles  $f_t$  et du poids des particules

$m_i \mathbf{g}$  :

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_j (f_n^{ij} \mathbf{n}^{ij} + f_t^{ij} \mathbf{t}^{ij}) + m_i \mathbf{g}$$

$$\mathbf{I}_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j f_t^{ij} \mathbf{c}^{ij} \times \mathbf{t}^{ij} \quad (1.1)$$

où  $m_i$ ,  $\mathbf{I}_i$ ,  $\mathbf{r}_i$  et  $\boldsymbol{\omega}_i$  sont, respectivement, la masse, la matrice d'inertie, la position et le vecteur de rotation de la particule  $i$ , et  $\mathbf{g}$  représente le vecteur d'accélération de la gravité.  $\mathbf{n}^{ij}$  est le vecteur unitaire normal au plan de contact avec la particule  $j$  et pointant de  $j$  à  $i$ ,  $\mathbf{t}^{ij}$  désigne le vecteur unitaire appartenant au plan de contact  $ij$  et pointant dans la direction opposée au déplacement relatif des deux particules, et  $\mathbf{c}^{ij}$  est le vecteur pointant du centre de la particule  $i$  au point de contact avec la particule  $j$ . La dissipation visqueuse tangentielle, par rapport à la force de lubrification normale, est négligée [60].

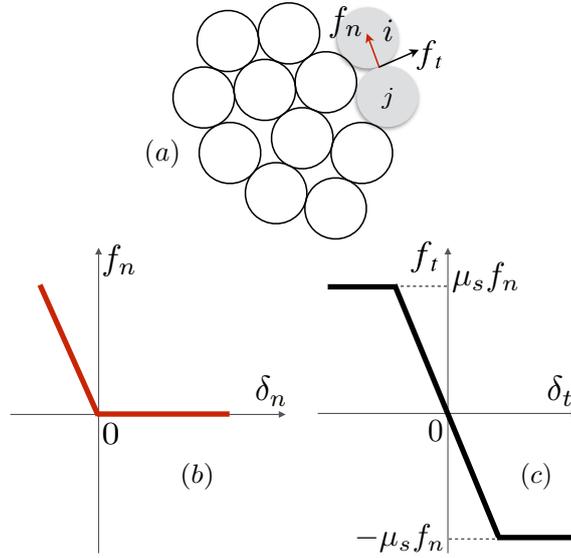


FIGURE 1.1 – Représentation schématique des lois de force de contact dans la DEM.

La force de contact normale  $f_n$  implique deux composantes [104] :

$$f_n = f_n^e + f_n^d \quad (1.2)$$

La force élastique normale  $f_n^e = k_n \delta_n$  est une fonction linéaire de la déflexion élastique normale  $\delta_n$ , avec  $k_n$  comme constante de rigidité normale, et la force d'amortissement normale  $f_n^d = \gamma_n \dot{\delta}_n$  est proportionnelle à la vitesse relative normale  $\dot{\delta}_n$ , avec  $\gamma_n$  le paramètre d'amortissement normal. Ces deux forces n'apparaissent que lorsqu'il y a chevauchement ; *c'est-à-dire*, pour  $\delta_n < 0$ .

La force de contact tangentielle  $f_t$  est également la somme d'une force élastique  $f_t^e = k_t \delta_t$  et d'une force d'amortissement  $f_t^d = \gamma_t \dot{\delta}_t$ , où  $k_t$  est la rigidité tangentielle,  $\gamma_t$  indique le paramètre d'amortissement visqueux tangentielle, et  $\delta_t$  et  $\dot{\delta}_t$  sont, respectivement, le déplacement tangentiel et la vitesse tangentielle en contact. Selon la loi de Coulomb pour le frottement, la force tangentielle est limitée par un seuil de force  $\mu_s f_n$  avec  $\mu_s$  étant le coefficient de frottement [105, 115, 30, 66] :

$$f_t = -\min \left\{ (k_t \delta_t + \gamma_t \dot{\delta}_t), \mu_s f_n \right\} \quad (1.3)$$

Les forces de contact normales et tangentielles sont indiquées sur la figure 1.1.

### La MD pour les particules humides

Dans les applications avancées de la MD, il est possible d'implémenter la présence d'un fluide interstitiel ou d'une matrice de liaison solide [62, 100]. Pour simuler le fluide interstitiel, on peut coupler les

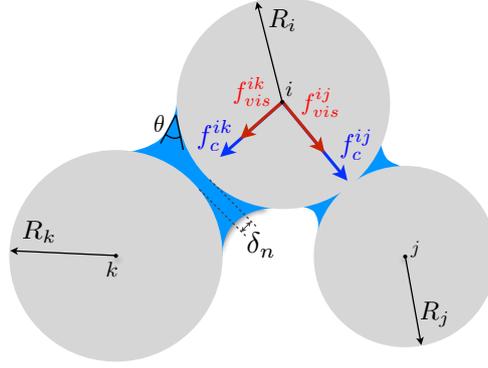


FIGURE 1.2 – Schéma de deux cas différents de ponts capillaires : particule  $i$  en contact avec la particule  $j$  et sans contact avec la particule  $k$ .

méthodes DEM avec la méthode LBM (*Lattice Boltzmann Method*) [84, 29, 5] ou plus généralement la méthode CFD (*Computational Fluid Dynamics*) [126, 143, 142]. Cependant, de telles applications nécessitent beaucoup plus de puissance de calcul et de mémoire pour discrétiser les degrés de liberté associés à la phase interstitielle. Pour cette raison, dans les simulations MD de matériaux granulaires humides, il est nécessaire de mettre en place une stratégie de modélisation en faisant des choix appropriés qui permettent un compromis entre l'efficacité du calcul (grand nombre de particules) et le réalisme physique. Dans le cas de matériaux granulaires humides insaturés, des expériences montrent que la phase fluide peut être correctement représentée par ses effets cohésifs et visqueux dans les interactions particules-particules [103]. C'est pourquoi nous nous appuyons sur cette approche pour modéliser le pont capillaire dans les matériaux granulaires humides.

Les équations de mouvement pour une particule  $i$  s'écrivent :

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_j [(f_n^{ij} + f_c^{ij} + f_{vis}^{ij}) \mathbf{n}^{ij} + f_t^{ij} \mathbf{t}^{ij}] + m_i \mathbf{g}$$

$$\mathbf{I}_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j f_t^{ij} \mathbf{c}^{ij} \times \mathbf{t}^{ij} \quad (1.4)$$

où  $f_c$  et  $f_{vis}$  sont les forces capillaire et visqueuse. En raison de la prédominance des effets cohésifs et visqueux normaux par rapport aux forces tangentielles cohésives et visqueuses, on ne considère que les expressions théoriques du premier ordre (composantes normales) de la force capillaire  $f_c$  et de la force visqueuse  $f_{vis}$  agissant entre deux particules ; voir Figure 1.2.

La force cohésive capillaire  $f_c$  entre deux particules de rayons  $R_i$  et  $R_j$  agit le long de l'axe reliant les centres des particules. Cette force cohésive est une fonction du volume de liquide  $V_b$  de la liaison capillaire, de la tension superficielle liquide-vapeur  $\gamma_s$  et de l'angle de contact particule-liquide-gaz  $\theta$  [104, 62, 103] ; voir la figure 1.2. La force capillaire est obtenue en intégrant l'équation de Laplace-Young [62, 72, 118]. A l'état pendulaire (voir la figure 1.3), une solution approximative est donnée par l'expression suivante [105, 32, 61], qui est en accord avec les expériences [103, 72] :

$$f_c = \begin{cases} -\kappa R & \text{pour } \delta_n < 0, \\ -\kappa R e^{-\delta_n/\lambda} & \text{pour } 0 \leq \delta_n \leq d_{rupt}, \\ 0 & \text{pour } \delta_n > d_{rupt}, \end{cases} \quad (1.5)$$

où  $R = \sqrt{R_i R_j}$  est le rayon géométrique moyen de deux particules, et le pré-facteur de force capillaire  $\kappa$  est [105] :

$$\kappa = 2\pi\gamma_s \cos \theta. \quad (1.6)$$

Cette force existe jusqu'à une distance de décollement  $d_{rupt}$  donnée par [62] :

$$d_{rupt} = \left(1 + \frac{\theta}{2}\right) V_b^{1/3}. \quad (1.7)$$

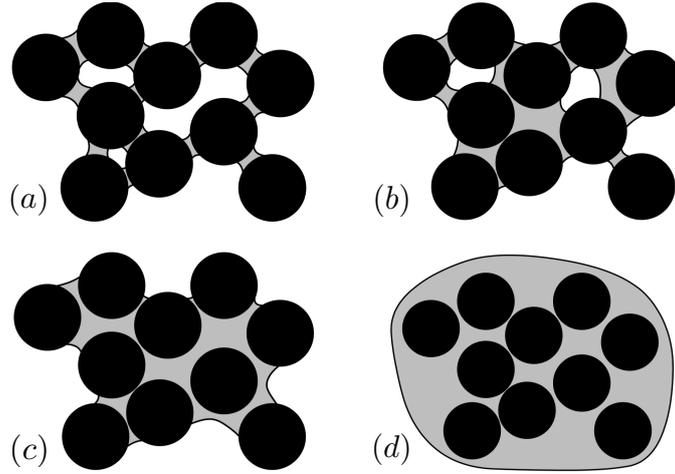


FIGURE 1.3 – Schématisation des différents états de l'eau dans un matériau granulaire : (a) état pendulaire, (b) état funiculaire, (c) état capillaire, et (d) état de gouttelettes [74].

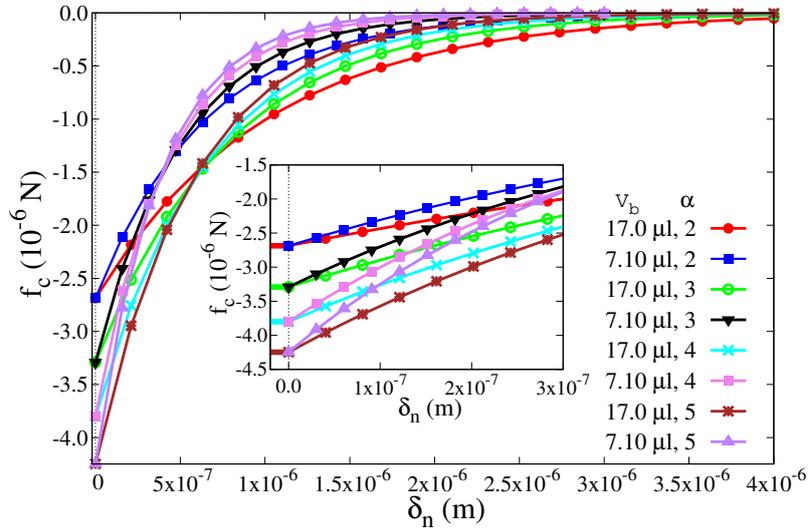


FIGURE 1.4 – Force cohésive capillaire  $f_c$  diminue en valeur absolue en fonction du gap  $\delta_n$  entre deux particules dans le contact du pont capillaire pour différentes valeurs du volume liquide  $V_b$  de la liaison capillaire et le rapport de taille des particules ( $\alpha = d_{max}/d_{min}$ ). La force capillaire existe jusqu'à la distance de rupture  $d_{rupt}$  [10, Art].

La longueur caractéristique  $\lambda$  dans l'équation (1.5) est donnée par :

$$\lambda = c h(r) \left( \frac{V_b}{R'} \right)^{1/2}, \quad (1.8)$$

où  $R' = 2R_i R_j / (R_i + R_j)$  et  $r = \max\{R_i/R_j; R_j/R_i\}$  sont le rayon moyen harmonique et le rapport des tailles entre deux particules. L'expression (1.5) correspond bien à la force capillaire obtenue par l'intégration directe de l'équation de Laplace-Young en définissant  $h(r) = r^{-1/2}$  et  $c \simeq 0.9$ [98, 104, 105]; voir la figure 1.4. Il est également très proche de l'expression utilisée dans [55].

La force visqueuse normale  $f_{vis}$  est due à l'effet de lubrification des ponts liquides entre les particules.

Son expression classique pour deux sphères lisses et sphériques est [60, 38] :

$$f_{vis} = \frac{3}{2} \pi R^2 \eta \frac{\dot{\delta}_n}{\delta_n}, \quad (1.9)$$

où  $\eta$  est la viscosité du liquide et  $\dot{\delta}_n$  désigne la vitesse normale relative supposée positive lorsque l'écart  $\delta_n$  diminue. Cette expression implique que la force visqueuse diverge lorsque l'écart  $\delta_n$  tend vers zéro. Avec cette singularité, deux particules rigides ne peuvent pas entrer en collision dans un temps fini. Cependant, pour des particules légèrement rugueuses, les surfaces ne sont plus parallèles et la taille caractéristique des aspérités permet une collision en temps fini. Par conséquent, nous introduisons une longueur caractéristique  $\delta_{n0}$  représentant la taille des aspérités avec la force de lubrification donnée par :

$$f_{vis} = \frac{3}{2} \pi R^2 \eta \frac{\dot{\delta}_n}{\delta_n + \delta_{n0}} \quad \text{pour } \delta_n > 0, \quad (1.10)$$

pour  $\delta_n > 0$ , *c'est-à-dire*, pour un écart positif. Cette expression garantit que la singularité ne se produira pas tant qu'il n'y aura pas de contact. Lorsqu'un contact apparaît, *c'est-à-dire* pour  $\delta_n < 0$ , on suppose que la force de lubrification reste égale à sa valeur maximale donnée par :

$$f_{vis} = \frac{3}{2} \pi R^2 \eta \frac{\dot{\delta}_n}{\delta_{n0}} \quad \text{pour } \delta_n \leq 0. \quad (1.11)$$

Cette méthode a été utilisée au cours de la thèse de *Thanh Trung Vo* [T3].

### 1.1.2 Méthode de dynamique des contacts

La méthode CD a été développée par J.J. Moreau et M. Jean au LMGC [75, 76, 80, 77, 78, 81, 54, 49, 53, 52, 50, 51]. Elle est fait appel à la formulation mathématique de dynamique non-régulière (avec des sauts de vitesse) et des développements algorithmiques par J.J. Moreau et M. Jean. La différence essentielle entre la CD et la MD est dans le traitement des interactions de contact. Dans la CD, les interactions de contact sont traitées sans introduire des lois de force spécifiques. La résolution des équations du mouvement de corps rigide est basée sur un schéma d'intégration temporelle implicite en prenant en compte les contraintes cinématiques résultant des interactions de contact. Comme cette résolution implicite rend la méthode inconditionnellement stable, la CD admet des pas de temps bien plus grands que la MD. Dans la CD, grâce à un algorithme itératif, les forces de contact et les vitesses des particules sont simultanément déterminées à tous les contacts potentiels entre les particules. De plus, un avantage important de la CD est le traitement des contacts frottants sans régularisation. Cette méthode a été largement appliquée pour étudier les matériaux granulaires [79, 97, 101, 17, 99, 89, 70, 123, 113, 9, 8, 108, 96, 85], 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 [2, 87]

## 1.2 Modélisation des matériaux à particules molles

Les matériaux à particules molles intéressent de nombreux domaines tels que les cosmétiques, la chimie, la pharmacie, l'agroalimentaire... Il peut s'agir par exemple de pâtes colloïdales, de vésicules, de microgels ou de suspensions. Même si le comportement et le domaine d'application de ces matériaux sont très variées, ils présentent le dénominateur commun d'être des milieux discrets avec des particules qui peuvent subir de grandes déformations sans rupture [15]. Par conséquent, pour la modélisation des matériaux à particules molles, les méthodes discrètes présentées ci-dessus, sont incapables de rendre compte de modèles de comportement réalistes pour les particules individuelles. Afin de permettre à chaque particule de se déformer en fonction de modèles de comportement continu, et aussi pour décrire les interactions de contact, il est nécessaire de combiner la DEM avec une méthode appropriée pour la simulation de la déformation des particules. La première idée peut être de représenter chaque particule déformable comme un agrégat de particules primaires rigides avec des interactions cohésives telles qu'une particule peut se

déformer en raison des mouvements relatifs de ses particules primaires tout en restant ensemble comme une particule solide. Nous allons appeler cette technique, le modèle de particules liées (*Bonded Particle Method* : BPM) [14, Art]. Une autre stratégie consiste à discrétiser chaque particule comme un ensemble d'éléments finis ou points matériels. Dans ce contexte, nous avons développé une technique prometteuse combinant une formulation implicite de la méthode de points matériels (*Material Point Method* : MPM) avec la méthode CD pour un traitement rigoureux des contacts frottants [16, Art]. Une technique alternative consiste à combiner la méthode des éléments finis (*Finite Element Method* : FEM) avec la DEM [8, Art]. Par la suite, nous allons décrire brièvement ces approches.

### 1.2.1 Méthode BPM

La méthode BPM a été développée au cours de la thèse de *Thanh-Hai Nguyen* [T1]. Dans cette technique, chaque particule déformable est représentée comme un agrégat de particules primaires rigides. Ces dernières interagissent par des interactions comportant une partie d'attraction pour empêcher la dispersion des particules primaires tout en permettant leurs déplacements et réarrangements selon les forces extérieures exercées sur ses bords par d'autres agrégats. Les interactions entre particules primaires appartenant à un agrégat sont les mêmes, mais peuvent être différentes pour un autre agrégat. Notons que ce modèle peut être utilisé pour la simulation des particules sécables lorsque ces interactions peuvent être rompues à un certain seuil [112, 135, 67, 85]. Pour permettre de grandes déformations des particules molles sans perte irréversible des interactions entre les particules primaires, nous avons remplacé l'interaction de contact (qui est toujours courte-distance) par une force d'attraction longue portée de type Lennard-Jones et un contact inélastique non-frottant. Pour la force d'attraction agissant entre les deux particules primaires de rayons  $R_1$  et  $R_2$ , nous avons utilisé la partie attractive de la force de Lennard-Jones [46, 45] :

$$F_a = F_0 \left( 1 + \frac{\delta}{a_0} \right)^{-\gamma}, \quad (1.12)$$

où  $a_0 = R_1 + R_2$ ,  $\delta$  est la distance entre les particules primaires et  $F_0$  représente la valeur maximale de la force d'attraction pour  $\delta = 0$ . L'exposant  $\gamma$  pour la partie attractive de la force de Lennard-Jones est égal à  $\gamma = 7$  [14, Art]. Par ailleurs, la partie répulsive de l'interaction entre particules primaires est activée uniquement lorsque les deux particules se touchent ( $\delta = 0$ ). Pour la simulation des particules primaires, nous avons utilisé la méthode CD.

Dans la méthode BPM, les particules molles se caractérisent par un comportement élastique-(parfaitement) plastique avec une contrainte seuil plastique égale à une contrainte caractéristique  $p_I = F_0 / <a_0 >$ . Le rapport entre la pression de confinement  $p$  et cette contrainte seuil contrôle donc le comportement mécanique d'un assemblage de particules BPM. Si  $p/p_I < 1$ , la déformation des particules est faible et les réarrangements des particules régi principalement l'assemblage comme un assemblage de particules indéformables. Par contre, pour  $p/p_I \gg 1$ , les particules se déforment fortement et ces déformations dominent le comportement de l'assemblage [14, Art].

### 1.2.2 Approche MPM-CD

Pour modéliser des assemblages de particules déformables, nous avons développé l'approche MPM-CD basée sur une formulation implicite de la MPM couplée avec la méthode CD pour le traitement des contacts frottants entre les particules [16, Art]. La MPM est une méthode mixte basée sur la combinaison des descriptions Eulérienne et Lagrangienne du matériau [120, 121]. La description Lagrangienne consiste à discrétiser chaque corps en un ensemble de points matériels, et la description Eulérienne est basée sur un maillage sous-jacent. A chaque pas de temps, l'information portée par ces points est projetée sur le maillage sous-jacent, dans lequel sont résolues les équations du mouvement. Cette solution est ensuite utilisée pour mettre à jour les informations associées aux points matériels. Cette technique a été appliquée aux problèmes en grandes déformations [136], aux calculs de taux de dissipation de l'énergie [124], à la mécanique de la rupture [20, 37] et aux matériaux granulaires [11, 12, 24]. Dans la suite, nous présentons brièvement l'approche MPM-CD.

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

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (1.13)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) \quad \text{dans } \Omega, \quad (1.14)$$

où  $\rho(\mathbf{x}, t)$  est la densité du matériau,  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  est la vitesse,  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$  est le tenseur des contraintes de Cauchy,  $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$  représente la force volumique et  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$  est l'accélération à la position  $\mathbf{x}$  et au temps  $t$ .

Dans le cadre de la MPM, le corps est divisé en  $N_p$  points matériels représentant une quantité de matière fixe, permettant de satisfaire la conservation de la masse (1.13). En outre, de manière similaire à la méthode des éléments finis, ces points servent de points d'intégration sur le volume dans une formulation faible utilisant une fonction de Dirac. De ce fait, la densité est discrétisée pour un élément sous la forme suivante :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=1}^{N_p} \rho_p \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p(t)), \quad (1.15)$$

où  $\rho_p$  et  $\mathbf{X}_p(t)$  représentent la densité et la position d'un point matériel, respectivement, et  $\delta$  est la fonction de Dirac. Notons que la densité des points matériels est égale à  $\rho_p = m_p/V_p$ , rapport de la masse  $m_p$  sur le volume  $V_p$  associé au point matériel. Ainsi, en présence de contacts entre les corps, la forme faible de l'équation du mouvement (1.14) sous la forme discrétisée peut s'écrire :

$$\mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{nodal}}(t) = \mathbf{F}^{\text{int}}(t) + \mathbf{F}^{\text{ext}}(t) + \mathbf{F}^{\text{C}}(t), \quad (1.16)$$

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

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \mathbf{N}_p \quad \text{matrice de masse nodale}, \quad (1.17)$$

$$\mathbf{F}^{\text{int}} = - \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{G}_p \sigma_p V_p \quad \text{vecteur de la force intérieure}. \quad (1.18)$$

Dans les équations (1.17) et (1.18),  $\mathbf{N}_p$  et  $\mathbf{G}_p$  représentent, respectivement, la matrice et le gradient de la fonction de forme. Afin de résoudre le problème (1.16), nous considérons une approche implicite dans le cadre de la MPM [16, Art]. Les solutions nodales sont ensuite projetées sur les points matériels, ce qui permet de mettre à jour l'information portée par ces points.

Pour étudier un assemblage de grains déformables, les forces de contact  $\mathbf{F}^{\text{C}}$  entre les grains nécessitent d'être calculées à l'aide d'un algorithme de contact prenant en compte la condition de non-interpénétration de la matière ainsi que la loi de frottement de Coulomb. Comme nous utilisons un schéma implicite pour l'implémentation de la MPM, la méthode CD est un choix naturel pour le traitement des points de contact. Cependant, contrairement à des particules parfaitement rigides, la méthode de résolution doit être adaptée aux grains discrétisés 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. Dans ce modèle, les variables de contact sont calculées en même temps que celles associées au comportement volumique.

Considérons deux grains déformables ( $\alpha$  et  $\beta$ ); voir la figure 1.5(a). Dans le cadre de l'algorithme multi-maillage, un maillage sous-jacent approprié à chaque grain est défini. Un point de contact à l'interface entre les deux grains peut être traité par l'introduction d'un maillage sous-jacent commun avec le même type de grille pour le transfert de quantités nodales de maillages appropriés au maillage commun. Les

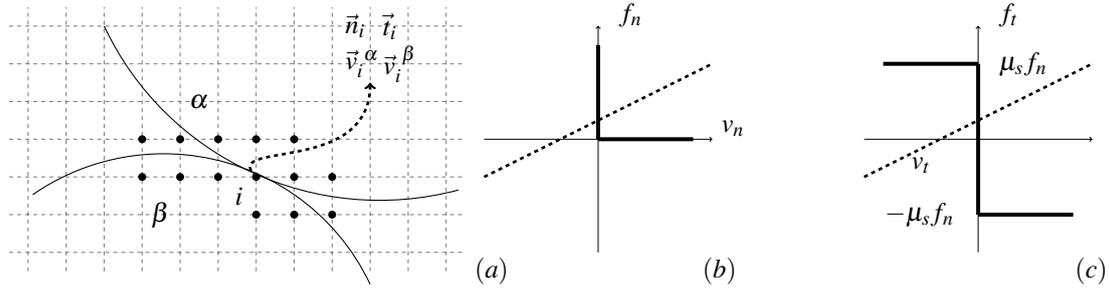


FIGURE 1.5 – (a) Schéma de l’algorithme de contact multi-maillage dans la MPM ; Conditions de contact : (b) Condition de Signorini reliant la vitesse normale relative  $v_n$  et la force normale  $f_n$  ; (c) Loi de frottement de Coulomb reliant la vitesse de glissement  $v_t$  et la force de frottement  $f_t$  ;  $\mu_s$  est le coefficient de frottement. Les lignes pointillées représentent des relations linéaires extraites des équations de la dynamique.

points de contact entre les grains  $\alpha$  et  $\beta$  sont traités au niveau des noeuds voisins appartenant au maillage sous-jacent commun. Leurs valeurs nodales impliquent des contributions des deux grains. A un noeud de contact potentiel  $i$ , un vecteur normal unité  $\mathbf{n}_i$ , orienté du grain  $\beta$  vers le grain  $\alpha$ , et un vecteur tangentiel unité  $\mathbf{t}_i$  sont définis [44]. Tant que la vitesse relative normale,  $v_n = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{n}_i$ , reste positive, rien ne se passe. Mais quand  $v_n = 0$ , une force normale répulsive  $f_n$  est mobilisée au niveau du noeud de contact. Ces conditions définissent la condition de Signorini en vitesse comme le montre la figure 1.5(b) [98]. D’autre part, en combinant les équations du mouvement  $\mathbf{P}_{\text{nodal}}^\alpha = \mathbf{M}^\alpha \mathbf{v}_{\text{nodal}}^\alpha$  et  $\mathbf{P}_{\text{nodal}}^\beta = \mathbf{M}^\beta \mathbf{v}_{\text{nodal}}^\beta$  au noeud commun, on obtient une relation linéaire  $f_n = M_n v_n + K_n$ , où  $M_n$  est la masse réduite et  $K_n$  représente une force compensée dépendant d’autres forces de contact à ce noeud. Les forces normales à tous les noeuds de contact sont obtenues par une procédure itérative en intersectant cette relation linéaire avec le graphe de Signorini, comme le montre la figure 1.5(b). Dans la même veine, la loi de frottement sec de Coulomb est une relation complémentaire entre la force de frottement  $f_t$  et la vitesse tangentielle,  $v_t = (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_i^\beta) \cdot \mathbf{t}_i$ , au noeud de contact ; voir la figure 1.5(c). Les équations de mouvement au noeud commun donnent une relation linéaire  $f_t = M_t v_t + K_t$ . En intersectant cette dernière avec le graphe de Coulomb, la force de frottement  $f_t$  peut être calculée à tous les noeuds de contact simultanément dans la même procédure itérative utilisée pour calculer les forces normales. La convergence vers la solution à la fois pour les forces de contact et les contraintes internes est lisse, et une précision élevée peut être obtenue.

Nous avons utilisé les formulations de la MPM dans le contexte de l’hypothèse des déformations infinitésimales [16, 14, Art] et la théorie des déformations finies [11, Art]. Ces formulations sont applicables à une large classe de comportements matériels - élastique ou inélastique. Notons que les résultats de deux formulations sont similaires si le pas de temps reste assez petit [11, Art]. De plus, pour améliorer les performances de calcul, une procédure de parallélisation a été proposée dans le cadre de cet algorithme. L’algorithme parallèle proposé est du style SPMD (Single Program, Multiple Data), basé sur MPI (Message Passing Interface). Les particules dans le domaine de simulation sont réparties entre des sous-domaines. En choisissant un nombre de sous-domaines égal au nombre de processeurs disponibles, les données associées aux particules dans le même sous-domaine sont stockées dans la mémoire d’un seul processeur. L’effort de calcul dépend de la résolution de l’équation du mouvement pour chaque particule, ce qui est étroitement lié au volume de la particule. Les forces de contact étant calculées sur le processus principal (Master), les seuls échanges de données entre les particules (et donc les processeurs) sont les forces de contact. Bien que l’efficacité de cette procédure diminue avec l’augmentation du nombre de processeurs, elle est toujours utile pour réduire le coût de calcul [11, Art].

### 1.2.3 Approche FEM-CD

Plusieurs auteurs ont proposé de coupler la FEM pour la déformation d’une particule individuelle avec la DEM classique pour les interactions entre particules pour simuler un assemblage de particules défor-

mables [83]. Par exemple, Gethin et al. (2001) [34] ont appliqué cette technique à la compaction de poudres métalliques. D'autres exemples d'application de la FEM-DEM peuvent être trouvées dans [82]. Cependant, dans le cadre du logiciel LMGC90 [65], un couplage entre la FEM et la méthode CD a été développée et implémentée. Cette approche utilise un schéma d'intégration implicite avec un pas de temps plus important que celui avec la DEM classique. Les forces de contact 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. Le grand avantage de ce couplage FEM-CD est que nous pouvons non seulement simuler le vrai comportement des particules déformables en prenant en compte les degrés de liberté globaux (déplacement et rotation) et les degrés de liberté internes des particules, et aussi traiter le contact frottant et non frottant entre particules avec le pas de temps raisonnable [8, Art]. Cette approche a été utilisée au cours de la thèse de *Thi-Lo Vu* [T2].



## Chapitre 2

# Étude des particules molles

Pour les matériaux à particules molles, la déformation et la compressibilité des particules constituent un mécanisme important de déformation et d'écoulement, et l'existence d'une contrainte caractéristique fait dépendre leur rhéologie de la pression de confinement. A cet égard, ces matériaux diffèrent des matériaux à particules dures dont le comportement plastique est principalement dicté par des réarrangements et des glissements frictionnels, et dont la compacité ne peut dépasser celle d'un assemblage aléatoire compact (*Random Close Packing* : RCP). Les particules molles peuvent atteindre une compacité plus élevée par *changement de forme des particules* ainsi que par écoulement plastique [22, 133]. La compaction, le changement de volume sous cisaillement et les propriétés de texture complexes de ces particules sont restés inexplorés en raison de l'absence d'outils numériques et expérimentaux appropriés. La recherche expérimentale sur les systèmes à particules molles est actuellement en cours [71, 7] malgré les difficultés d'accès à des mécanismes locaux ou à l'échelle de particules. Dans ce contexte, les simulations numériques peuvent fournir des informations intéressantes et suggérer des stratégies expérimentales originales. Les simulations numériques permettent également, grâce à des outils de visualisation numérique uniques, d'avoir accès à une multitude d'informations détaillées, pas toujours faciles à obtenir à partir de tests expérimentaux.

Dans le chapitre précédant, trois approches numériques ont été proposées pour la modélisation des systèmes à particules molles. Dans ce chapitre, nous présentons les études effectuées concernant des assemblages de particules molles en utilisant ces techniques. Nous considérons les compressions uni-axiale et bi-axiale des assemblages de particules molles. Les résultats présentés sont issus de plusieurs travaux y compris les thèses de *Thanh Hai Nguyen* [T1] et *Thi-Lo Vu* [T2].

### 2.1 Compaction d'assemblages de particules molles

Dans cette section, on s'intéresse à la compression uni-axiale d'assemblages de particules déformables. Pour étudier ces assemblages, les trois approches numériques présentées dans le chapitre précédent ont été utilisées. Nous décrivons également une étude expérimentale effectuée dans le cadre de la thèse de *Thi-Lo Vu*. Nous allons 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. Nous allons nous focaliser plus particulièrement sur l'évolution de la contrainte appliquée et de la connectivité en fonction de la compacité.

#### 2.1.1 Assemblages de particules élastiques linéaires

Nous considérons d'abord un assemblage de 300 particules de faible polydispersité de taille (diamètres  $\in [1, 4, 2, 4]$  mm) confinées dans une boîte rectangulaire dans laquelle seule la paroi supérieure est mobile. Nous avons utilisé la procédure MPM-CD pour analyser la compaction de cet assemblage. La configuration initiale est préparée en utilisant la DEM. A partir de cette configuration initiale, on modélise la procédure de compaction en déplaçant la paroi supérieure vers le bas à une vitesse constante. Deux cas sont étudiés : 1) sans frottement et 2) avec un coefficient de frottement  $\mu_s = 0,5$  entre les particules (le frottement entre les

particules et les parois étant nul). L'effet de la gravité est négligé afin d'éviter les gradients de contrainte supplémentaires. On considère un comportement élastique linéaire isotrope pour les particules avec le module de Young  $E = 10$  MPa, coefficient de Poisson  $\nu = 0,45$  et densité  $\rho = 990$  kg/m<sup>3</sup>.

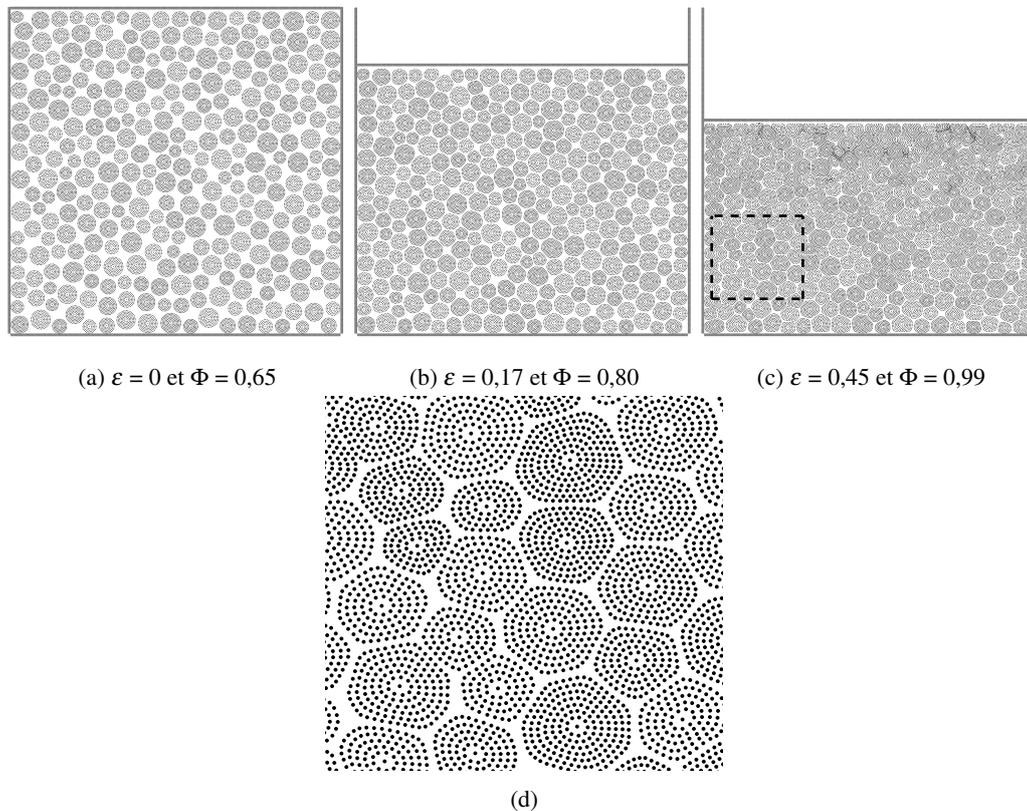


FIGURE 2.1 – Trois états de compaction au cours de la compression uni-axiale d'un assemblage de particules molles simulée par l'approche MPM-CD (a-c); Zoom sur l'image du dernier état de compaction (d). Les cercles pleins sont des points matériels. Notons que les gaps apparents observés sur les clichés des simulations entre les particules sont liés à la résolution spatiale; voir [14, Art].

Les figures 2.1(a-d) montrent trois états de compaction au cours de la compression uni-axiale pour le cas sans frottement. A la fin de la compaction, tout l'espace est presque rempli par le changement de forme des particules. En effet, les formes des particules changent graduellement d'une forme circulaire à une forme presque polygonale comme on peut voir sur la figure 2.1(d).

La figure 2.2 montre la compacité  $\Phi$  ( $\Phi = V_S/V$ , où  $V_S$  est le volume de particules et  $V$  le volume total) en fonction de la contrainte verticale  $\sigma$ , calculées à partir des forces agissant sur la paroi inférieure et normalisée par la contrainte de consolidation  $\sigma_0$ , définie pour une compacité  $\Phi_0$ . Notons que les résultats sont présentés à partir de l'état de référence ( $\sigma_0, \Phi_0$ ) et nous avons choisi  $\Phi_0 \simeq 0,8$  qui correspond au début de blocage des particules [14, Art]. La relation entre la compacité et la contrainte est linéaire, ce qui reflète le comportement élastique linéaire de chaque particule. De plus, le frottement entre particules a peu d'effet sur la compacité.

Trois paramètres contrôlent la relation la compacité-contrainte : (i) les réarrangements des particules, (ii) le changement de volume des particules, et (iii) les changements de forme des particules. Nous savons que les réarrangements à partir du point de référence (point de blocage) sont négligeables et que les particules ne changent significativement pas de volume car  $\nu = 0,45$  pour les particules et il est proche d'un matériau incompressible (*c'est-à-dire*,  $\nu = 0,5$ ). Donc, seul le dernier paramètre permet à la compacité de dépasser considérablement la compacité RCP.

Pour décrire quantitativement l'évolution de la contrainte appliquée en fonction de la compacité, comme

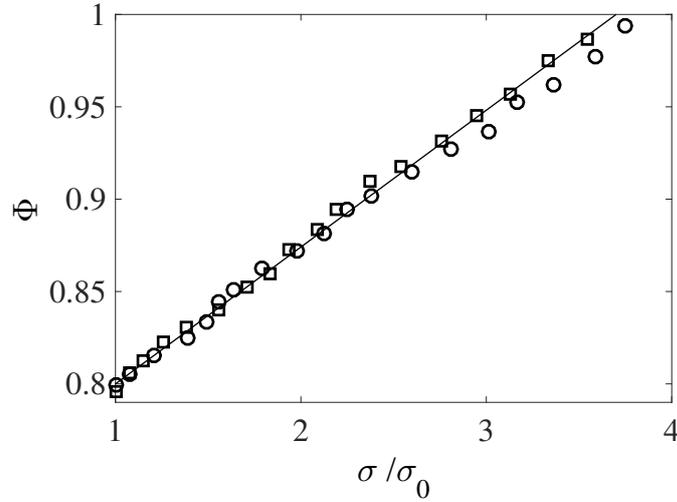


FIGURE 2.2 – Compacité en fonction de la contrainte axiale normalisée pour les assemblages de particules MPM sans (○) et avec (□) frottement. La ligne continue indique la prédiction du modèle simple de compaction ; voir l'équation (2.2).

un modèle élastique linéaire a été utilisé pour les particules déformables, on suppose que l'assemblage se comporte comme un milieu élastique avec un module effectif d'élasticité isostatique  $K^{\text{eff}}$  reliant l'évolution du volume  $dV$  à l'incrément de la contrainte  $d\sigma$  :

$$K^{\text{eff}} \frac{dV}{V} = -d\sigma . \quad (2.1)$$

Il est plausible de considérer une déformation uniforme, la même pour les particules et pour les pores, de sorte que la règle de mélange de Voigt s'applique [128]. Par conséquent, le module d'élasticité isostatique effectif augmente proportionnellement à la compacité :  $K^{\text{eff}} \propto \Phi K$ , où  $K$  est le module d'élasticité isostatique d'une particule. En supposant de plus que la variation du volume des particules est du second ordre par rapport au changement de forme des particules, on obtient [14, Art] :

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{\alpha}{K} \left( \frac{\sigma}{\sigma_0} - 1 \right) , \quad (2.2)$$

avec  $\alpha \simeq 0,73$ . C'est une relation linéaire entre la compacité et la contrainte normalisée, comme observée sur la figure 2.2.

## 2.1.2 Assemblages de particules néo-Hookéens

### Effet de compressibilité

Un nouvel assemblage de 300 particules de polydispersité de taille avec diamètres  $\in [2, 4]$  mm avec les conditions similaires à l'assemblage précédent est considéré. On suppose qu'il n'y a aucun frottement entre les particules et entre les particules et les parois. L'approche MPM-CD dans le contexte de l'hypothèse des déformations finies est utilisée car on considère un comportement hyper-élastique de néo-Hookéen pour les particules [21, Art] :

$$\mathbf{S} = (\lambda \ln(J) - \mu) \mathbf{C}^{-1} + \mu \mathbf{I} , \quad (2.3)$$

où  $\mathbf{S}$  est la seconde contrainte de Piola-Kirchhoff,  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$  la déformation de Cauchy-Green droit et  $J = \det(\mathbf{F})$  avec  $\mathbf{F}$  étant le gradient de déformation.  $\lambda$  et  $\mu$  représentent les coefficients de Lamé. Dans cette étude, nous avons considéré  $\mu = 1,5$  MPa,  $\rho = 990$  kg/m<sup>3</sup> et trois valeurs de  $\lambda = 0, 3$  et 100 MPa. Ces

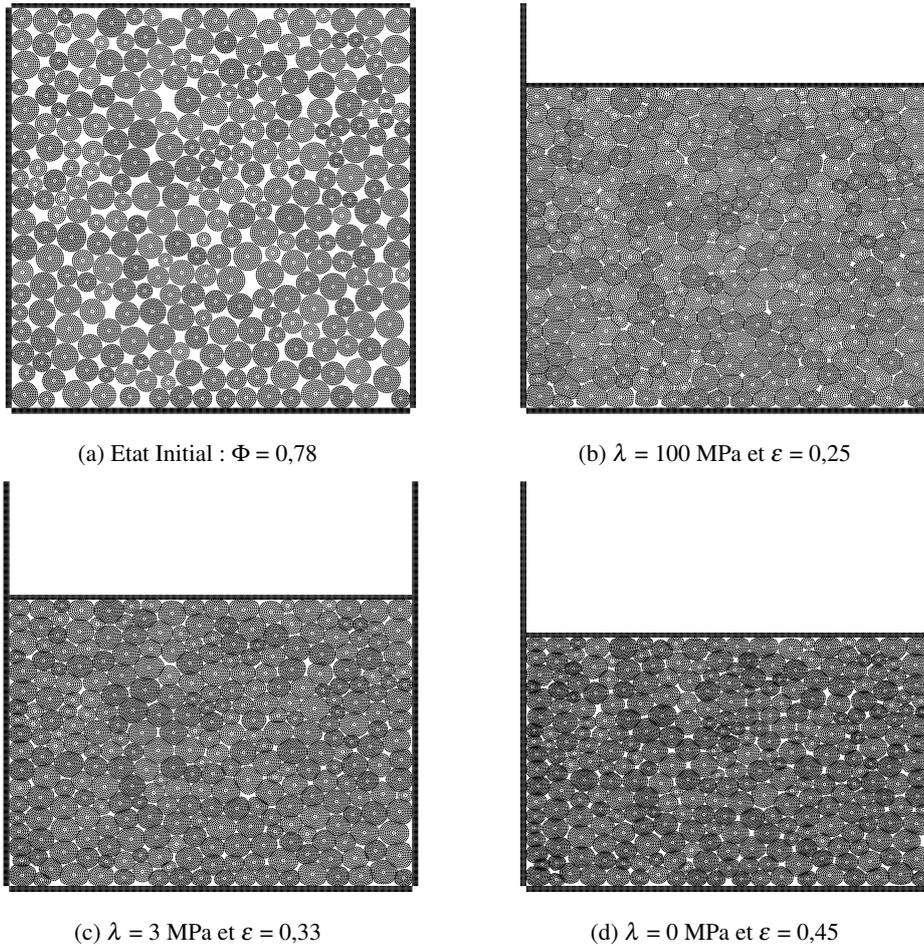


FIGURE 2.3 – État initial de l'assemblage (a) et trois états de l'assemblage compacté de particules néo-Hookéennes pour une compacité de 0,97 et plusieurs valeurs de  $\lambda$  (b-d). On constate que, malgré la même valeur de la compacité, le volume des assemblages est différent en raison des compressibilités différentes des particules. Les points noirs représentent les points matériels.

différentes valeurs de  $\lambda$  définissent la compressibilité de la particule ; *c'est-à-dire*, pour  $\lambda = 0$ , la particule est entièrement compressible alors que pour  $\lambda = 100$  MPa, la particule est quasi incompressible.

La figure 2.3 montre les états de l'échantillon au cours de l'essai de compaction pour différentes valeurs de  $\lambda$ . La compacité  $\Phi$  augmente avec le changement de forme des particules et, à la fin de la compaction, presque tout l'espace est rempli par les particules. La forme des particules passe progressivement de circulaire à presque polygonale, comme le montre sur la figure 2.3. Notons que, comme précisé précédemment, les gaps observés entre les particules sont liés à la résolution de maillage, qui peut être augmentée pour une discrétisation plus fine de la zone de contact. De plus, étant donné que les particules moins compressibles peuvent s'allonger plus, les pores entre ces particules sont remplis plus rapidement, même pour une faible déformation globale.

Ce phénomène est plus clairement mis en évidence sur la figure 2.4. Elle montre la déformation volumique cumulée des particules définie par  $\ln(V_S/V_{S_i})$ , où  $V_{S_i}$  est le volume initial des particules, et la déformation verticale cumulée  $\varepsilon$  en fonction de la compacité  $\Phi$ . Ce dernier devrait varier en raison du changement de volume élastique des particules résultant de la compressibilité élastique des particules ainsi que de la variation du volume total  $V$  due aux réarrangements de particules et au changement de forme.

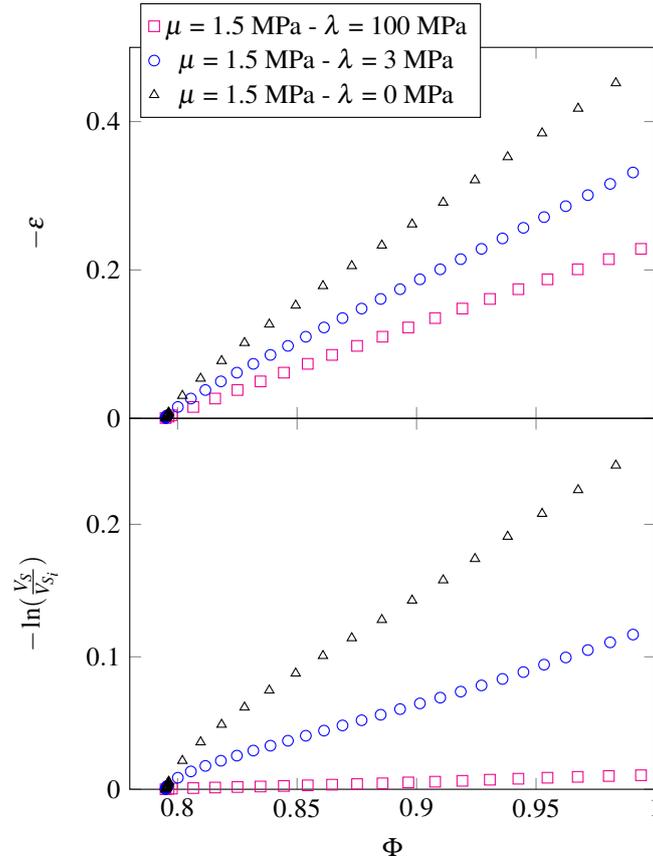


FIGURE 2.4 – Déformation verticale cumulée,  $\varepsilon$ , et le changement total du volume de particules,  $\ln(V_S/V_{S_i})$ , en fonction de la compacité,  $\Phi$ , pour plusieurs valeurs de  $\lambda$ .

Puisque la largeur de la boîte est constante, nous avons

$$\ln\left(\frac{V_S}{V_{S_i}}\right) = \ln\left(\frac{\Phi}{\Phi_i}\right) + \varepsilon \quad (2.4)$$

avec  $\varepsilon = \ln(h/h_i)$ , où  $h_i$  est la hauteur initiale de la boîte. Sur la figure 2.4, les données pour trois valeurs de  $\lambda$  coïncident jusqu'à  $\Phi \simeq 0,8$ . Au-delà de cette compacité,  $\varepsilon$  et  $\ln(V_S/V_{S_i})$  varient à des taux presque linéaires et différents pour chaque valeur  $\lambda$ . Comme prévu, ce taux augmente lorsque  $\lambda$  (ou la compressibilité) diminue. Notons que pour  $\lambda = 100$  MPa (les particules quasi incompressibles), la variation de volume des particules est négligeable, comme le montre sur la figure 2.4. De plus, on peut considérer que  $\Phi \simeq 0,8$  est le point de blocage au-dessus duquel il n'y a plus de réarrangement de particules, et donc l'évolution de l'assemblage est uniquement due au changement de forme des particules.

L'évolution de la contrainte appliquée  $\sigma$  au-delà du point de blocage permet une analyse macroscopique de l'évolution de l'assemblage. La figure 2.5 montre  $\sigma$ , calculée à partir des forces de contact agissant sur la paroi inférieure et normalisée par le module d'onde de compression des particules  $M$  ( $M = \lambda + 2\mu$ ) en fonction de  $\Phi$ . Nous constatons un comportement non linéaire pour trois cas avec des taux différents. Nous observons également que la force nécessaire pour comprimer l'assemblage augmente avec la compressibilité des particules. Ces observations peuvent s'expliquer par le fait qu'au-delà du point de blocage, l'assemblage se comporte presque comme un milieu continu, puisqu'il n'y a plus de réarrangements de particules. Ainsi, au-delà de l'état RCP, la contrainte appliquée  $\sigma$  peut être liée à la déformation verticale cumulée  $\varepsilon$  par un module effectif d'onde de compression  $M^{\text{eff}}$  :

$$\sigma = M^{\text{eff}} \varepsilon . \quad (2.5)$$

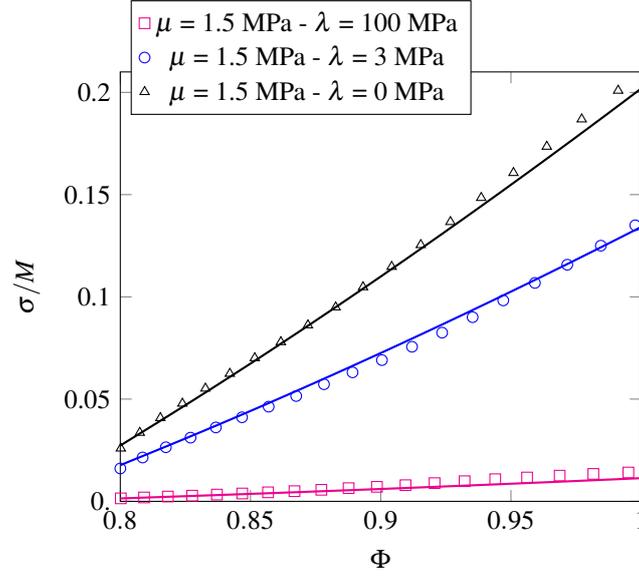


FIGURE 2.5 – Contrainte appliquée normalisée par le module d’onde de compression  $M$  en fonction de la compacité pour plusieurs valeurs de  $\lambda$ . Les lignes représentent le comportement prédit par le modèle de compaction introduit dans [11, Art]; voir l’équation (2.9).

On peut également supposer que le module d’élasticité isostatique des particules  $K$  relie l’incrément de volume  $dV_S$  des particules à l’incrément de la contrainte effectif  $d\sigma_S$  des particules :

$$K \frac{dV_S}{V_S} = -d\sigma_S . \quad (2.6)$$

$\sigma$  peut être liée à  $\sigma_S$  comme suit :

$$\sigma = c_1 Z \Phi \sigma_S , \quad (2.7)$$

où  $c_1$  est une constante de matériau à déterminer. Étant donné que  $d\varepsilon = dV_S/V_S - d\Phi/\Phi$  et en utilisant les équations(2.5), (2.6) et (2.7), l’équation différentielle suivante à résoudre est obtenue :

$$\left(1 + \frac{M^{\text{eff}}}{c_1 K Z \Phi}\right) d\sigma = \left[ \frac{M^{\text{eff}}}{c_1 K Z \Phi} \left(\frac{dZ}{Z} + \frac{d\Phi}{\Phi}\right) + \frac{dM^{\text{eff}}}{M^{\text{eff}}}\right] \sigma - M^{\text{eff}} \frac{d\Phi}{\Phi} . \quad (2.8)$$

En sachant que  $M^{\text{eff}}$  et  $Z$  sont liés à  $\Phi$  (voir ci-dessous), l’intégration de l’équation différentielle (2.8) donne :

$$\sigma = - \frac{M^{\text{eff}}}{1 + \frac{M^{\text{eff}}}{c_1 K Z \Phi}} (\ln(\Phi) + c_2) , \quad (2.9)$$

où  $c_2$  est la constante d’intégration. En considérant la règle de mélange de Voigt pour un milieu continu hétérogène,  $M^{\text{eff}} = \Phi M$  (pour plus des détails, voir [11, Art]). Les prédictions de ce modèle (2.9) sont en bon accord avec nos simulations MPM-CD présentées sur la figure 2.5 avec  $c_2 \simeq 0,27$  et  $c_1 \simeq 0,01$  pour  $\lambda = 100$  MPa,  $c_1 \simeq 0,23$  pour  $\lambda = 3$  MPa et  $c_1 \simeq 1,3$  pour  $\lambda = 0$  MPa. Notons que, bien que ce modèle semble bien prédire la contrainte appliquée  $\sigma$  en fonction de  $\Phi$ , à des compacités élevées, les particules néo-Hookéennes peuvent remplir les petits pores restants seulement pour des contraintes beaucoup plus élevées (impliquant des rayons de courbure de plus en plus petits). En conséquence, lorsque la compacité tend vers 1, la contrainte appliquée correspondante doit tendre vers l’infini. Ce modèle n’est donc pas valide pour des valeurs élevées de la compacité. Par ailleurs, dans nos simulations, pour résoudre correctement les faibles rayons de courbure au niveau des zones de contact entre les particules, il convient d’affiner dans la même proportion la discrétisation.

## Effet de frottement

Dans le cadre de la thèse de *Thi-Lo Vu* [1, Art], nous avons effectué une étude numérique de la compaction par la méthode FEM-CD en considérant trois assemblages de 400 particules néo-Hookéennes de diamètres  $\in [10, 15]$  mm. Ces assemblages confinés dans une boîte rectangulaire, sont soumis à une compression uni-axiale dans le cadre de l'hypothèse des déformations planes et dans le régime quasi-statique en imposant le déplacement de la paroi du haut. Pour les particules néo-Hookéennes, le module de cisaillement est  $\mu = 0,15$  MPa et la densité du matériau est  $\rho = 1180$  kg/m<sup>3</sup>. Ces particules sont supposées être quasi-incompressibles en fixant  $\nu = 0,495$ . Différentes valeurs du coefficient de frottement  $\mu_f$  sont considérées entre les particules tandis qu'il n'y a aucun frottement entre les particules et les parois. La figure 2.6 présente les trois états de compaction pour un assemblage avec  $\mu_f = 0,2$ .

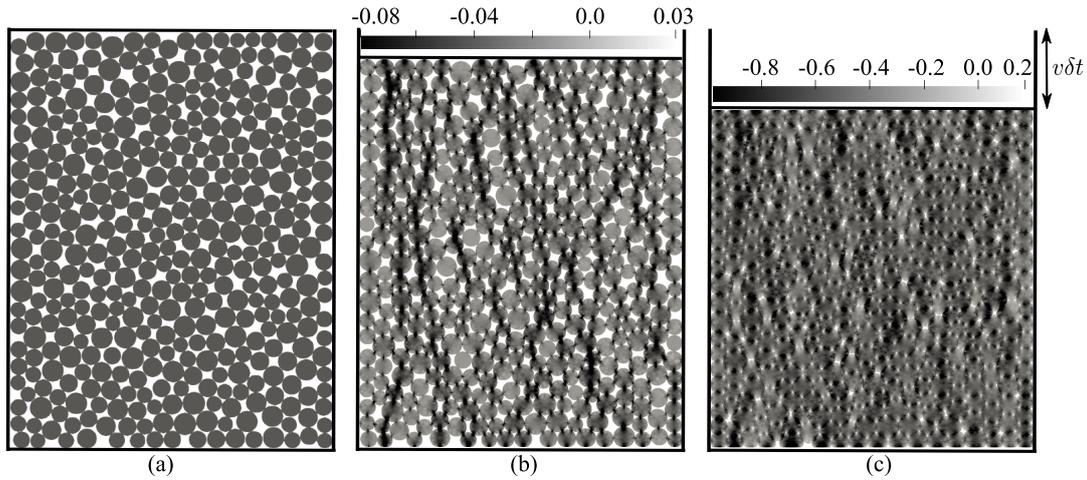


FIGURE 2.6 – Trois états de la compaction d'un assemblage de 400 particules néo-Hookéennes avec le coefficient de frottement de  $\mu_f = 0,2$  : (a)  $\Phi = 0,80$ , (b)  $\Phi = 0,86$  et (c)  $\Phi = 0,98$ . Le niveau de gris indique les valeurs de la composante yy de la contrainte de Cauchy (la direction de la compression), normalisées par le module de Young des particules,  $\sigma_{yy}/E$ .

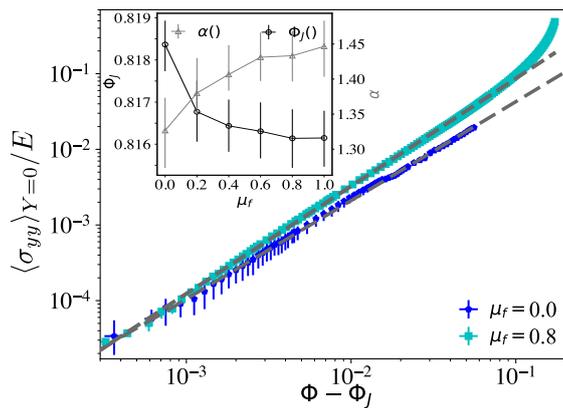


FIGURE 2.7 – Valeur moyenne de la contrainte normale appliquée par l'assemblage à la paroi inférieure,  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$ , normalisée par le module de Young  $E$  des particules, en fonction de la compacité excédentaire  $\Phi - \Phi_J$ , échelle log-log, pour deux valeurs du coefficient de frottement ( $\mu_f = 0$  et  $\mu_f = 0,8$ ). Les lignes pointillées sont la loi de puissance de  $K(\Phi - \Phi_J)^\alpha$  avec  $K$  et  $\alpha$  comme paramètres d'ajustement. Encart : les valeurs de  $\Phi_J$  (axe gauche) et  $\alpha$  (axe droit) en fonction du coefficient de frottement  $\mu_f$ .

La figure 2.7 présente à l'échelle log-log, la valeur moyenne de la composante  $yy$  de la contrainte de Cauchy obtenue sur la paroi inférieure du système,  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$ , en fonction de l'excès de compacité  $\Phi - \Phi_J$  (où  $\Phi_J$  est la compacité au point de blocage) pour quatre coefficients de frottement  $\mu_f$ . Dans l'encart de cette figure, nous montrons que  $\Phi_J$ , comme cela a déjà été rapporté dans la littérature [133], diminue lorsque  $\mu_f$  augmente. Les barres d'erreur de la figure 2.7 représentent la variabilité statistique de  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$  obtenu à partir des trois configurations initiales. Par ailleurs, nous observons que  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$  suit bien une loi de puissance  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0} \propto (\Phi - \Phi_J)^\alpha$  sur une large plage de valeurs de  $\Phi$ . Une telle loi de puissance a déjà été démontrée dans des expériences [68, 69] et des simulations numériques en compression bi-axiale, mais dans une plage beaucoup plus réduite de compacité [92, 69]. Dans nos simulations, l'exposant  $\alpha$  diminue avec le coefficient de frottement  $\mu_f$ . Il varie de  $\alpha = 1,32 \pm 0,4$  pour  $\mu_f = 0$  à la valeur asymptotique de  $\alpha = 1,45 \pm 0,4$  pour  $\mu_f > 0,6$ . Ces valeurs de  $\alpha$  sont différentes de celles obtenues expérimentalement par d'autres auteurs pour la compression bi-axiale avec une résolution limitée de la mesure de force [68, 69], et sont également différentes des simulations effectuées dans le cadre de l'hypothèse de déformations infinitésimales [91, 92]. Ces divergences peuvent résulter de différences dans la géométrie de chargement, la taille du système ou la polydispersité des tailles. De plus, la validité de l'approximation de l'élasticité infinitésimale (Hookéen) faite dans les études précédentes est douteuse. Même proche du point de blocage, puisque la contrainte est générée par une petite quantité de particules dans les principales chaînes de force [97], la déformation de ces particules est finie. Par conséquent, des simulations prenant correctement en compte les déformations finies des particules sont nécessaires même pour la détermination d'une loi d'échelle proche du blocage. L'exposant trouvé dans la littérature est proche de 1, qui est la valeur bien connue prévue pour un contact hertzien entre deux particules ; *c'est-à-dire*, pour de petites déformations. Le traitement rigoureux de la grande déformation conduit ici à des exposants significativement plus élevés, du moins pour les particules néo-Hookéennes. Étonnamment, les lois de puissance trouvées ici sont bonnes jusqu'à une compacité de  $\Phi = 0,93$  ; voir la figure 2.7. La divergence de  $\sigma_{yy}$  pour  $\Phi \simeq 1$  mentionnée ci-dessus implique naturellement que les lois de puissance ne sont plus applicables pour les compacités élevées. En fait, pour  $\Phi > 0,93$ , on quitte le domaine dans lequel  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$  suit la loi de puissance pour entrer dans un nouveau domaine avec une augmentation plus forte de  $\langle \sigma_{yy} \rangle_{Y=0}$  lorsque  $\Phi$  augmente [1, Art].

### 2.1.3 Assemblages de particules plastiques

#### Simulations numériques par la MPM-CD

Nous réalisons les simulations numériques sur l'assemblage de 300 particules présenté dans la section 2.1.2 en considérant deux types de loi de comportement : élastique et élasto-plastique avec écrouissage isotrope linéaire [6]. Pour les deux comportements, le module de Young, le coefficient de Poisson et la densité de la particule sont fixés, respectivement, à  $E = 10$  MPa,  $\nu = 0.45$  et  $\rho = 1000$  kg/m<sup>3</sup>. Pour la loi élasto-plastique, la limite d'élasticité est égale à  $\sigma_y = 0,4$  MPa et nous avons considéré trois valeurs de dureté  $H = 0, 1$  et  $3$  MPa. Notons que les simulations MPM-CD ont été effectuées à deux dimensions dans le cadre de l'hypothèse des déformations planes.

La figure 2.8 montre la configuration initiale et les états de l'assemblage à la compacité de  $\Phi = 0,97$  pour les particules élastiques et plastiques. On voit que les formes des particules passent progressivement de circulaires à polygonales et que les particules plastiques ont une forme polygonale avec des courbures plus grandes que les particules élastiques ; voir les zooms sur les assemblages sur la figure 2.8. En effet, la plasticité permet à ces particules de remplir les pores avec des contraintes plus faibles en comparaison avec les particules élastiques.

Afin de mettre en évidence cette caractéristique, la valeur moyenne de la courbure maximale des particules  $\kappa$  et la compacité  $\Phi$  en fonction de la contrainte appliquée  $\sigma$  sont présentées sur la figure 2.9. Comme mentionné précédemment, les particules plastiques atteignent des valeurs plus élevées de  $\kappa$  pour une contrainte  $\sigma$  plus petite que les particules élastiques. Nous observons aussi que pour les particules plastiques, lorsque la dureté  $H$  diminue, la courbure  $\kappa$  augmente ; *c'est-à-dire*, on a besoin de moins de contrainte pour remplir les pores d'un assemblage de particules en compression lorsque la dureté  $H$  des particules est faible. Ce point se retrouve également dans l'évolution de la compacité  $\Phi$  en fonction de la contrainte appliquée  $\sigma$ . On observe un comportement non linéaire pour les particules élastiques et plastiques avec des taux différents. Pour comprimer les particules élastiques, nous avons besoin d'une force

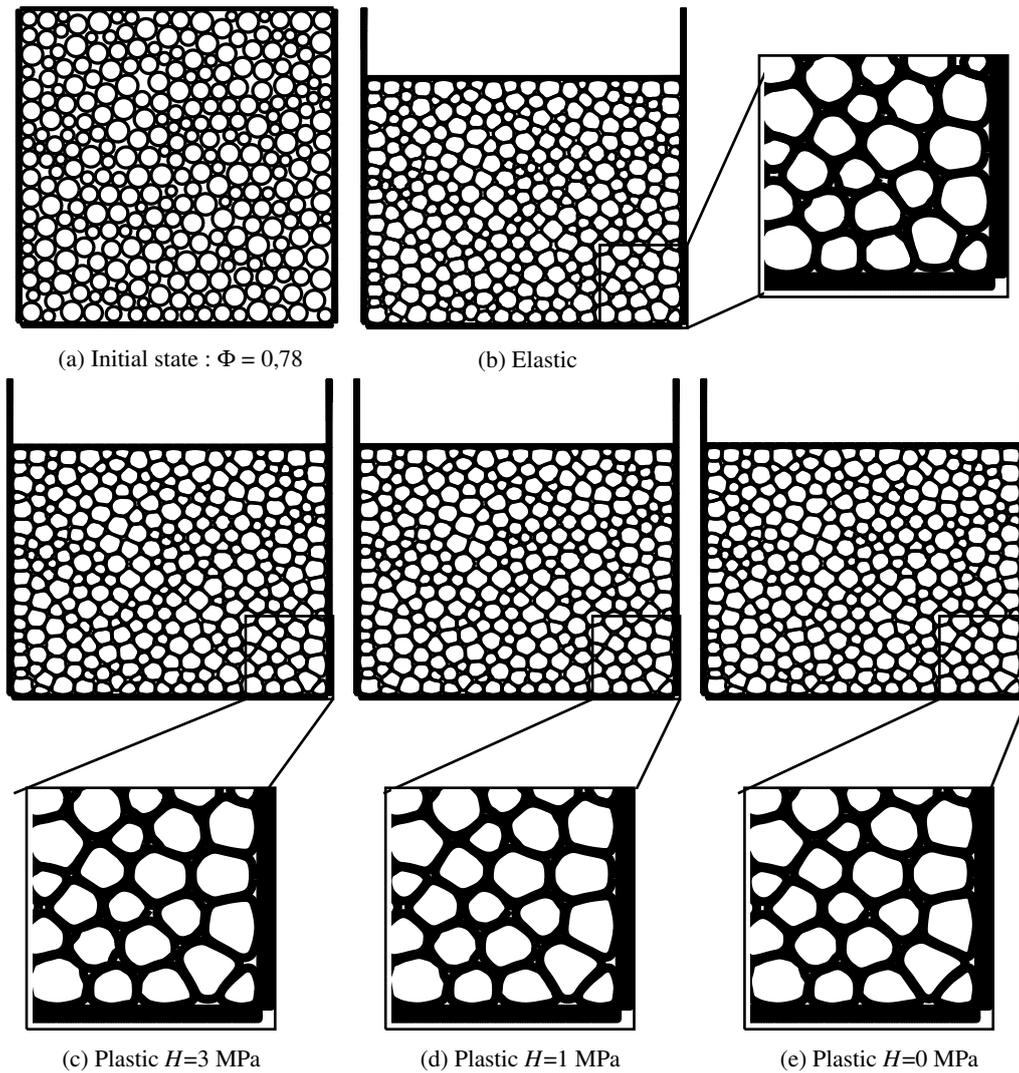


FIGURE 2.8 – État initial de l’assemblage (a) et quatre états de l’assemblage compacté de particules élastiques et plastiques pour une compacité de  $\Phi = 0,97$  et zoom sur ces images (b-e).

plus importante que pour les particules plastiques, et la force nécessaire augmente pour les particules plastiques lorsque le durcissement augmente.

Sur la figure 2.9, nous observons également que les résultats plastiques divergent des résultats élastiques pour  $\sigma \gtrsim 0,35$  MPa. Cette valeur est inférieure à la limite d’élasticité d’une particule plastique ( $\sigma_y = 0,4$  MPa) puisque toutes les particules de l’assemblage ne subissent pas en même temps une déformation plastique. De plus, dans tous les cas, un changement de régime est observé autour de la compacité de 0,8. Ce point de changement peut être considéré comme le point de blocage,  $\Phi_c \simeq 0,8$ . Comme précisé au-dessus, au-delà de ce point, le réarrangement des particules est négligeable et le changement de forme des particules contrôle essentiellement l’évolution de l’assemblage. On peut donc utiliser le modèle donné par l’équation (2.9). On suppose seulement qu’au-delà du point de blocage le volume des particules et des pores change comme un matériau poreux. Le module effectif d’onde de compression  $M^{\text{eff}}$  est donc donné par :

$$M^{\text{eff}} = \frac{G^{\text{eff}}(4G^{\text{eff}} - E^{\text{eff}})}{3G^{\text{eff}} - E^{\text{eff}}}, \quad (2.10)$$

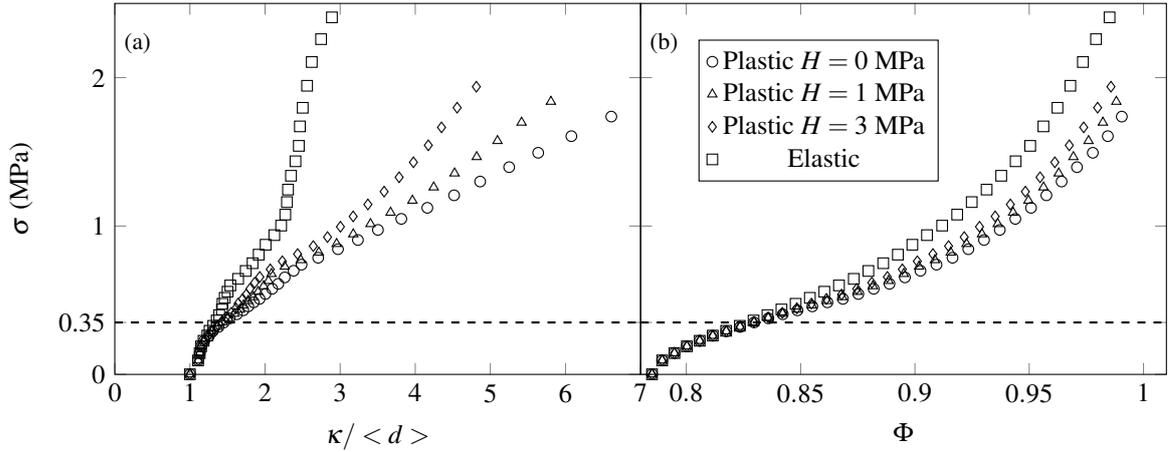


FIGURE 2.9 – Contrainte appliquée  $\sigma$  en fonction de la valeur moyenne de la courbure maximale des particules  $\kappa$  normalisée par leur diamètre moyen  $\langle d \rangle$  (a) et la compacité  $\Phi$  (b) pour les particules élastiques et plastiques.

où  $E^{\text{eff}}$  est le module d'Young effectif défini comme [56] :

$$E^{\text{eff}} = E \left( 1 - \frac{p}{p_c} \right)^{f_E}, \quad (2.11)$$

et le module de cisaillement effectif  $G^{\text{eff}}$  est [57] :

$$G^{\text{eff}} = G \left( 1 - \frac{p}{p_c} \right)^{f_G}, \quad (2.12)$$

avec  $p$  la porosité ( $p = 1 - \Phi$ ). Ici,  $f_E$  et  $f_G$  sont les exposants caractéristiques des modules de Young et de cisaillement.  $p_c$  est la porosité à laquelle les modules de Young et de cisaillement effectifs deviennent nuls ; *c'est-à-dire*, juste avant le point de blocage.

La relation ci-dessus est définie pour les particules élastiques. Pour les particules plastiques, la contrainte appliquée  $\sigma$  peut être décomposée en une partie élastique  $\sigma_e$  et une partie plastique  $\sigma_p$  comme suit :

$$\sigma = (1 - f_p)\sigma_e + f_p\sigma_p, \quad (2.13)$$

où  $f_p$  est la fraction volumique plastique définie comme le rapport entre le volume des régions plastiques des particules et leur volume total. Pendant la compaction,  $f_p$  est nul avant le blocage, mais au-delà du point de blocage, on peut supposer que  $f_p$  augmente comme une loi de puissance avec  $\varepsilon - \varepsilon_c$  :

$$f_p = a(\varepsilon - \varepsilon_c)^b, \quad (2.14)$$

où  $a$  et  $b$  sont les paramètres constants à déterminer, et  $\varepsilon_c$  correspond au point de blocage  $\Phi_c \simeq 0,8$ . De plus, la contrainte plastique  $\sigma_p$  peut être définie comme suit en considérant l'équation (2.9) :

$$\sigma_p = \sigma_y - \frac{M_p^{\text{eff}}}{1 + \frac{M_p^{\text{eff}}}{c_{1p}K_p Z \Phi}} (\ln(\Phi) + c_{2p}), \quad (2.15)$$

avec

$$M_p^{\text{eff}} = \frac{G_p^{\text{eff}}(4G_p^{\text{eff}} - E_p^{\text{eff}})}{3G_p^{\text{eff}} - E_p^{\text{eff}}}. \quad (2.16)$$

$$E_p^{\text{eff}} = E_p \left( 1 - \frac{p}{p_c} \right)^{f_{E_p}}, \quad (2.17)$$

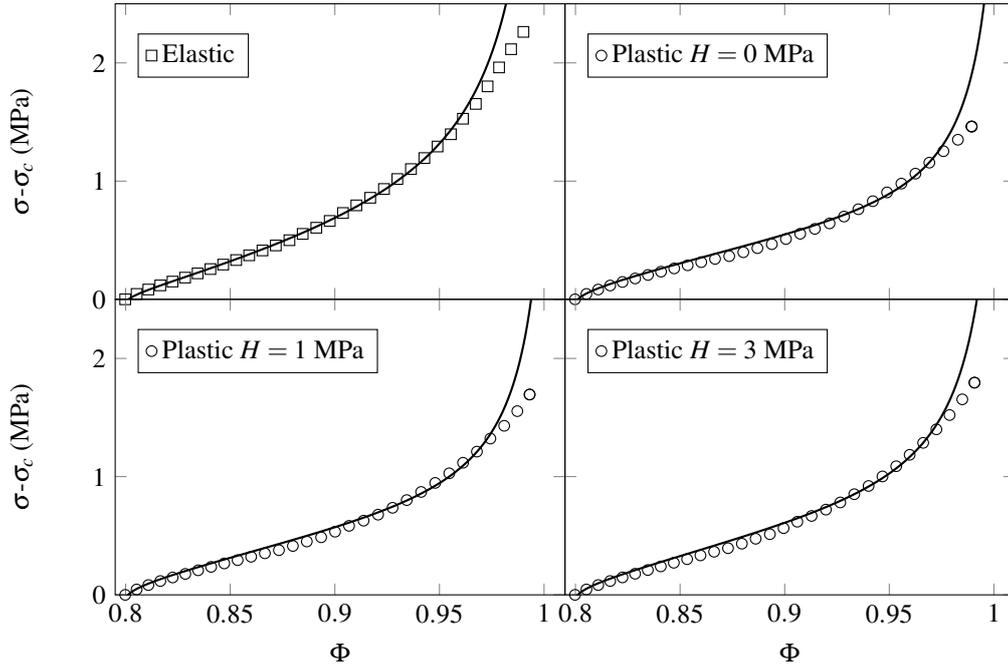


FIGURE 2.10 – Excès de contrainte appliquée  $\sigma - \sigma_c$  en fonction de la compacité  $\Phi$  pour les particules élastiques et plastiques par les simulations MPM-CD.  $\sigma_c$  correspond au point de blocage  $\Phi_c \simeq 0,8$ . Les lignes montrent les comportements prévus au-delà de l'état RCP par les modèles de compaction présentés dans les équations (2.9) et (2.13).

$$G_p^{\text{eff}} = G_p \left( 1 - \frac{p}{p_c} \right)^{f_{G_p}} . \quad (2.18)$$

Ici,  $E_p$  est le module tangent plastique lié à  $H$  par :  $E_p = EH/(E + H)$ , et  $G_p$  désigne le module de cisaillement plastique ( $G_p = E_p/2(1 + \nu_p)$ ). Notons que, en supposant que la variation de volume due à la déformation plastique est négligeable, on conclut à l'égalité des coefficients de Poisson élastique et plastique ; *c'est-à-dire*,  $\nu_p = \nu$ .

Pour déterminer les paramètres dans les modèles élastiques (2.9) et plastiques (2.13), nous considérons d'abord les résultats de simulation élastique, permettant de fixer les paramètres élastiques. De la même manière, on peut déterminer les paramètres plastiques à partir d'un des résultats de simulations plastiques en fixant les paramètres élastiques obtenus. Sur la figure 2.10, nous observons que les prédictions des modèles élastiques et plastiques sont en bon accord avec toutes les simulations MPM-CD en fixant  $f_E = f_{E_p} \simeq 1,4$ ,  $f_G = f_{G_p} \simeq 0,2$  et  $p_c \simeq 0,21$ ,  $c_1 = c_{1_p} \simeq 1$ ,  $c_2 = c_{2_p} \simeq 0,3$ ,  $a \simeq 1$  et  $b \simeq 0,55$ . Néanmoins, aux compacités élevées, une divergence entre les modèles et les simulations numériques est perceptible. Pour bien reproduire les prédictions, la discrétisation des particules peut être affinée afin de résoudre correctement les petits rayons de courbure aux zones de contact entre particules [4, Art].

### Simulations numériques par la BPM

En considérant le même assemblage et la condition de compaction similaire à la section 2.1.1, nous effectuons les simulations numériques en utilisant l'approche BPM. Notons que, comme indiqué dans la section 1.2, les particules modélisées par la BPM ont un comportement élastique-parfaitement plastique. Les particules de l'assemblage sont discrétisées par 100 000 particules primaires rigides non-frottantes de densité  $2000 \text{ kg/m}^3$  et de polydispersité de taille avec les diamètres  $\in [0,07, 0,13]$  mm. Ainsi, chaque particule est composée d'un minimum de 200 particules primaires ; voir la figure 2.11(a). La relation (1.12)

définit les interactions entre les particules primaires dans chaque particule avec  $F_0 = 100$  N et  $\gamma = 7$ . La figure 2.11 montre trois états de l'échantillon au cours de l'essai de compaction sans frottement.

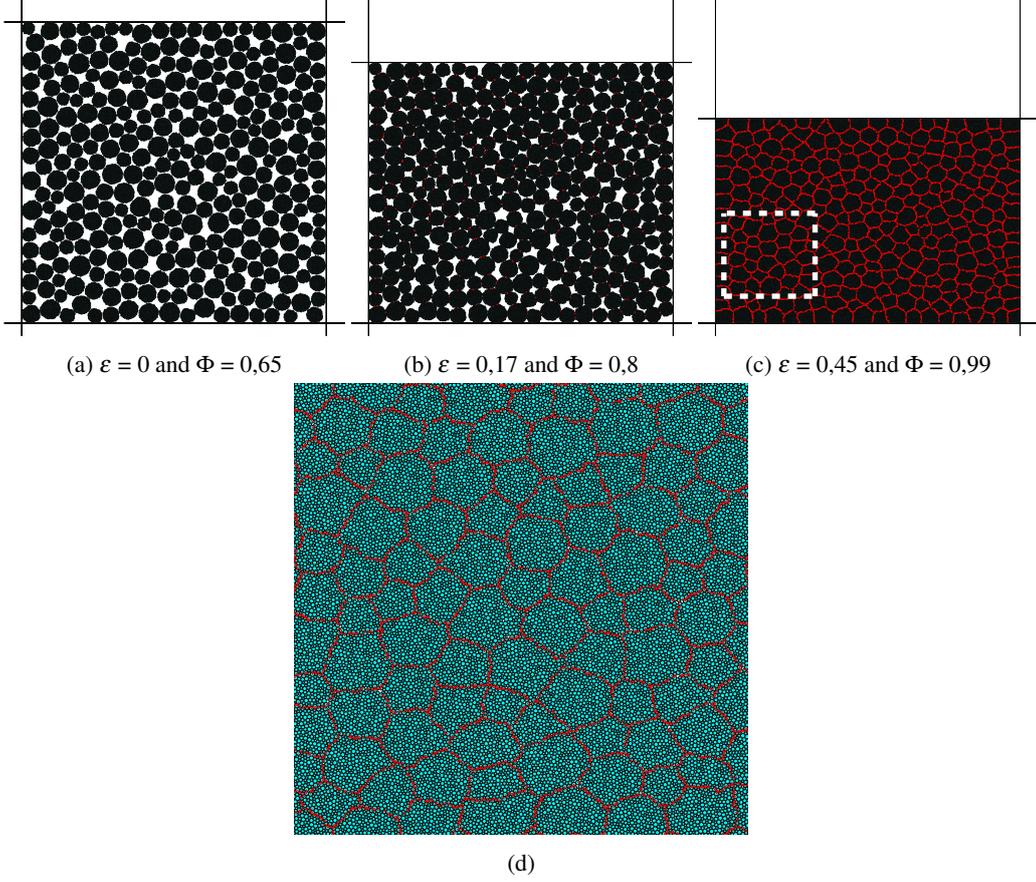


FIGURE 2.11 – Trois états de compaction au cours de la compression uni-axiale d'un assemblage de particules molles simulé par la méthode BPM (a-c); Zoom sur l'image du dernier état de compaction (d). Les cercles pleins sont des particules primaires rigides; voir [14, Art].

Sur la figure 2.12, la compacité  $\Phi$  en fonction de la contrainte appliquée  $\sigma$  est présentée. 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. On observe une augmentation presque exponentielle de la compacité en fonction de  $\sigma$ . Comme les particules BPM ne changent pratiquement pas de volume à cause de la rigidité des particules primaires, l'évolution de la compacité est due au changement plastique des formes des particules.

Pour trouver une relation compacité-contrainte dans le cas BPM, nous supposons que toutes les particules sont au seuil plastique. Cela donc suggère que la variation  $d\sigma$  de la contrainte est proportionnelle à une variation de la surface de contact entre particules et donc par une variation  $d\Phi$  de la compacité. On peut également considérer que l'effort nécessaire dépend au volume disponible et donc, proportionnel à la porosité  $1 - \Phi$  de l'assemblage. Dans cette approximation linéaire, nous avons donc  $d\Phi \propto (1 - \Phi)d\sigma$ , ce qui conduit à une augmentation exponentielle de  $\Phi$  en fonction de  $\sigma$  :

$$\Phi = 1 - (1 - \Phi_0)e^{-\alpha\left(\frac{\sigma}{\sigma_0} - 1\right)}, \quad (2.19)$$

où  $\alpha$  est un paramètre qui caractérise la compressibilité de l'assemblage. La figure 2.12 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

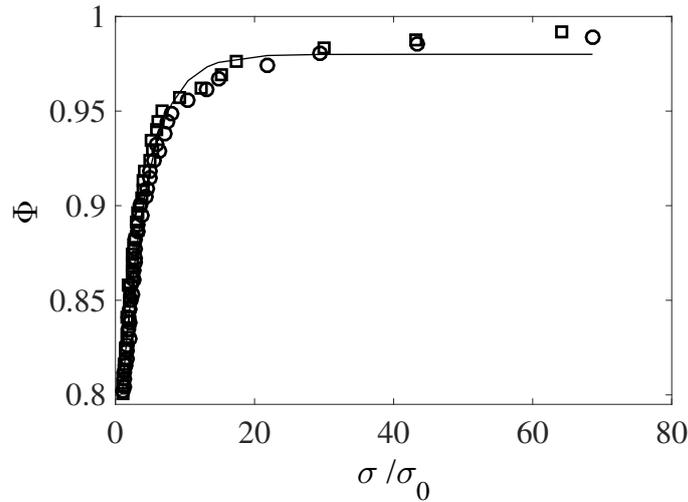


FIGURE 2.12 – Compacité en fonction de la contrainte axiale normalisée pour les assemblages de particules BPM sans (○) et avec (□) frottement. La ligne continue indique la prédiction du modèle simple de compaction Eq. (2.19).

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 [14, Art].

#### 2.1.4 Connectivité des particules et la compaction

La microstructure d'un assemblage de particules molles peut être caractérisée à l'ordre le plus bas, comme dans le cas des particules rigides, par son nombre de coordination  $Z$ , qui est le nombre moyen de contacts actifs par particule impliquée dans la transmission de contraintes. Pour les grandes déformations de l'assemblage, 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 peut être bien approximée par des polygones et  $Z$  représente alors le nombre de côtés de ces polygones. Pour une faible polydispersité de tailles des particules, chaque particule est souvent entourée par 6 voisins (à deux dimensions), mais on y trouve aussi des particules avec 5 ou 7 voisins.

La figure 2.13 montre l'évolution de  $Z$  en fonction de la compacité  $\Phi$  pour les assemblages soumis à la compression uni-axiale présentés précédemment dans cette section. Dans tous les cas,  $Z$  augmente lorsque  $\Phi$  augmente. Cette augmentation résulte de mécanismes que l'on peut décrire comme suit : à faible compacité, les particules subissent des réarrangements pour trouver des états d'équilibre dans la structure. Elles obtiennent donc facilement les nouveaux voisins. A une compacité plus élevée,  $Z$  augmente grâce à l'effet de la déformation des particules. De plus, on voit qu'en normalisant  $Z - Z_c$  par  $Z_1 - Z_c$ , où  $Z_c$  est le nombre de coordination correspondant à  $\Phi_c$ , et  $Z_1$  et  $\Phi_1$  correspondent à n'importe quel état après le point de blocage, tous les points de donnée se superposent et une loi en puissance 0,5 ajuste bien la courbe [92, 133, 141], [11, Art] :

$$\frac{Z - Z_c}{Z_1 - Z_c} = \sqrt{\frac{\Phi - \Phi_c}{\Phi_1 - \Phi_c}}. \quad (2.20)$$

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 [92].

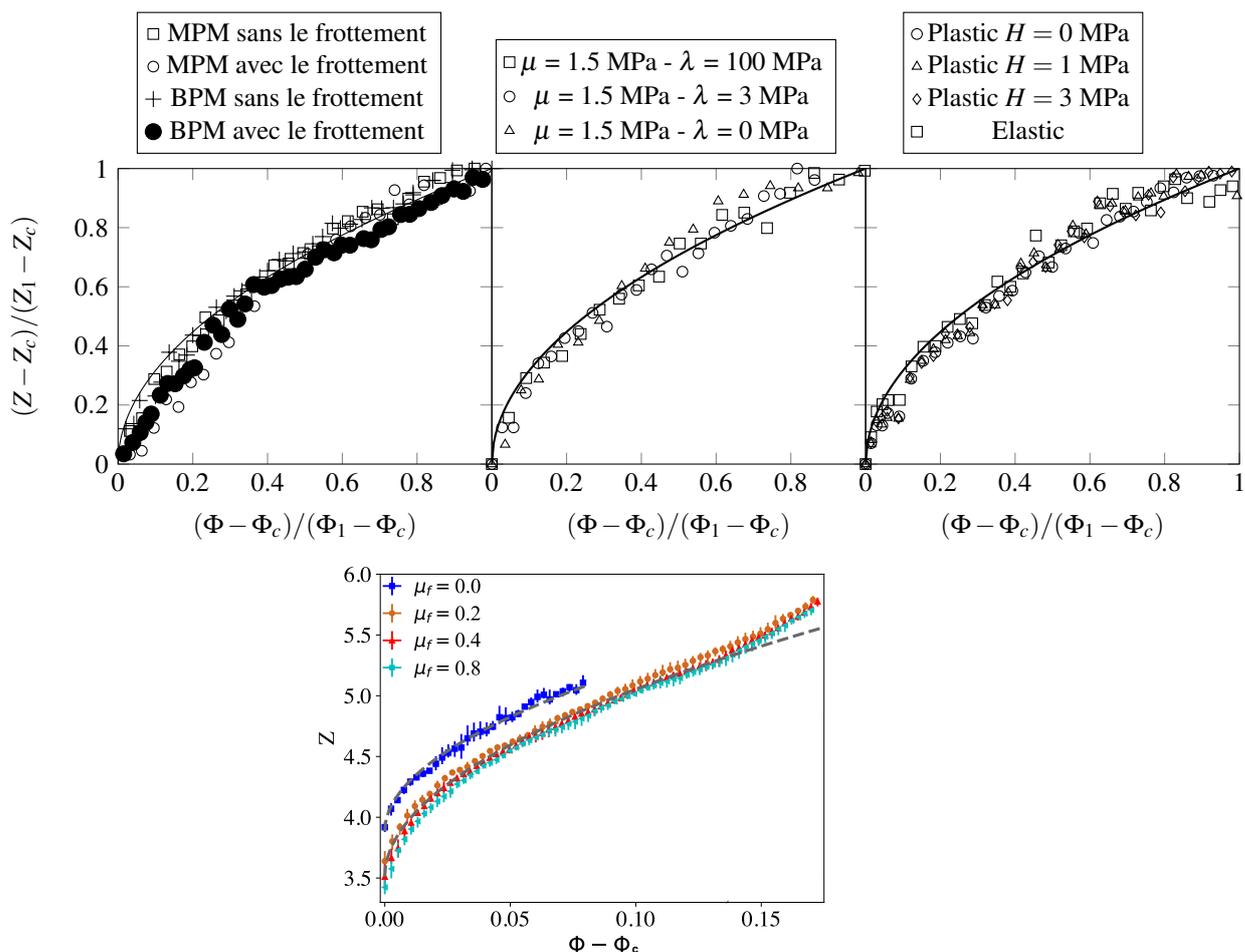


FIGURE 2.13 – Évolution de l’excès de nombre de coordination  $Z - Z_c$  (figures du haut) et le nombre de coordination  $Z$  (figure du bas) en fonction de l’excès de compacité  $\Phi - \Phi_c$  pour les assemblages présentés ci-dessus. Les lignes sont la loi de puissance  $(\Phi - \Phi_c)^{0,5}$ ; voir la relation (2.20) [1, 4, 11, 14, Art].

## 2.1.5 Simulations vs. Expériences

Dans le cadre de la thèse de *Thi-Lo Vu*, on s’est intéressé également à la modélisation expérimentales des matériaux à particules déformables. Pour cela, une nouvelle méthode de mesure adaptée à ces matériaux en 2D est développée. Avant d’étudier expérimentalement le comportement d’un assemblage de particules déformables, une expérience de compression d’une particule (cylindrique en silicone), associée à un appareil d’imagerie à haute résolution a été mise en place. Le champ de déplacement sur la surface de la particule hyper-élastique peut être mesuré par un algorithme de corrélation d’images numériques (*Digital Image Correlation* : DIC) rapide et adapté pour prendre en compte les grandes déformations. Le champ de déformation a été dérivé du champ de déplacement et comparé à des résultats numériques obtenus par des simulations FEM-CD. Un bon accord qualitatif a été observé. Vous pouvez trouver plus des détails dans [9, Art].

Nous avons appliqué cette méthode expérimentale à trois assemblages de particules soumis à la compression uni-axiale; voir la figure 2.14. A cause de la taille du dispositif expérimental, un nombre de particules limité est considéré (100 particules). Les particules cylindriques sont fabriquées en silicone réticulé avec deux rayons différents  $D_1 = 20 \text{ mm}$  (70 particules) et  $D_2 = 30 \text{ mm}$  (30 particules), et avec la même épaisseur  $H$ . Les particules peuvent être décrites par le modèle néo-Hookéen isotrope. Le module de ci-

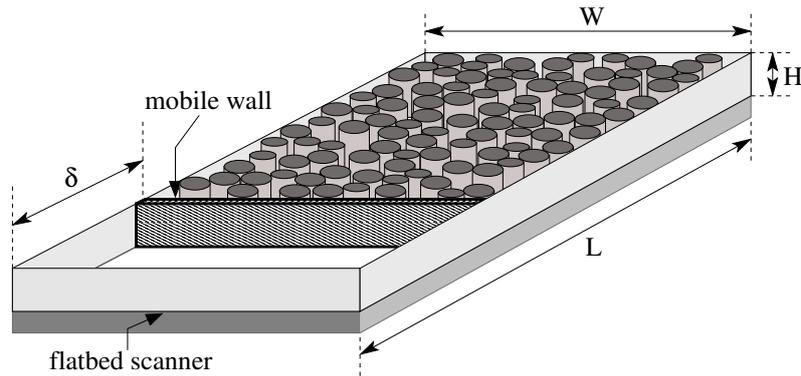


FIGURE 2.14 – Schéma du dispositif expérimental : un assemblage bi-disperse de 100 particules cylindriques en silicone réticulé de diamètres  $D_1 = 20$  mm et  $D_2 = 30$  mm, et d'épaisseur  $H$ , reposé sur la surface plane d'un scanner optique. L'assemblage est comprimé pas à pas par une paroi mobile tandis que la face inférieure des particules cylindriques est scannée. Les dimensions du dispositif sont  $L = 286$  mm et  $W = 202$  mm.

saillement de ces particules est égal à  $\mu = 0,15$  MPa et les particules sont quasi-incompressibles ( $\nu \simeq 0,5$ ). Leur densité est  $\rho = 1180\text{kg/m}^3$ . De l'huile végétale qui n'est pas absorbable par le silicone est ajoutée entre les particules, entre les particules et les parois et entre les particules et le plancher de la cellule afin de lubrifier les contacts et d'améliorer la transmission optique. Nous effectuons les expériences de compression pour trois systèmes équivalents, mais avec des configurations initiales différentes. Cela permet d'avoir une idée de l'influence de la configuration initiale sur les paramètres mesurés, et ainsi d'avoir quelques éléments statistiques.

Pour réaliser des simulations numériques par la méthode FEM-CD correspondant à ces expériences avec un temps de calcul raisonnable, nous considérons une approximation qui consiste à approcher les systèmes réels (expérimentaux) par des systèmes numériques à deux dimensions dans le cadre de l'hypothèse de déformations planes. Par ailleurs, comme les déformations dans le système expérimental ne sont pas planes, afin d'établir la correspondance entre les deux systèmes, les particules réelles qui sont quasi-incompressibles sont modélisées par un matériau effectif ayant le coefficient de Poisson égale à  $1/3$  [8, Art].

Une comparaison systématique des mesures expérimentales et de résultats numériques obtenus est réalisée. Un des paramètres importants à déterminer dans le système expérimental est le coefficient de frottement. Plusieurs tests numériques effectués en changeant le coefficient de frottement,  $\mu_f = [0, 0,1, 0,2, 0,3, 0,7, 1]$ , nous ont permis de retenir  $\mu_f = 0,3$  qui correspond le mieux aux résultats expérimentaux [8, Art]. La figure 2.15 présente trois états de la compaction d'un assemblage de particules néo-Hookéen obtenus par les simulations numériques (figures du haut) et par les expériences (figures du bas). Ces deux assemblages ont la même configuration initiale. En raison de la nature intrinsèquement désordonnée de ces assemblages et de leur grande sensibilité aux fluctuations, les simulations numériques et les expériences ne conduisent pas à des états identiques à l'échelle des particules individuelles, comme le montrent les positions différentes des particules ou des chaînes de force.

La figure 2.16 montre l'énergie de déformation stockée dans les particules en fonction de la compacité pour les simulations numériques et les expériences. Ces résultats sont obtenus en calculant la moyenne de l'énergie de déformation sur les trois configurations initiales. Nous observons que, comme indiqué précédemment, en comparant avec les résultats numériques pour les coefficients de frottement  $\mu_f = 0,1$  et  $\mu_f = 0,7$  (voir l'encart), le meilleur accord est trouvé pour le coefficient de frottement  $\mu_f = 0,3$ .

Comme paramètre micro-structural, les nombres de coordination  $Z$  numérique et expérimental sont présentés en fonction de la compacité sur la figure 2.17 pour une configuration initiale unique. La simulation numérique est effectuée en prenant  $\mu_f = 0,3$ . Nous observons un accord quantitatif entre les deux approches. On constate également que la relation (2.20) peut bien ajuster le résultat expérimental [8, Art].

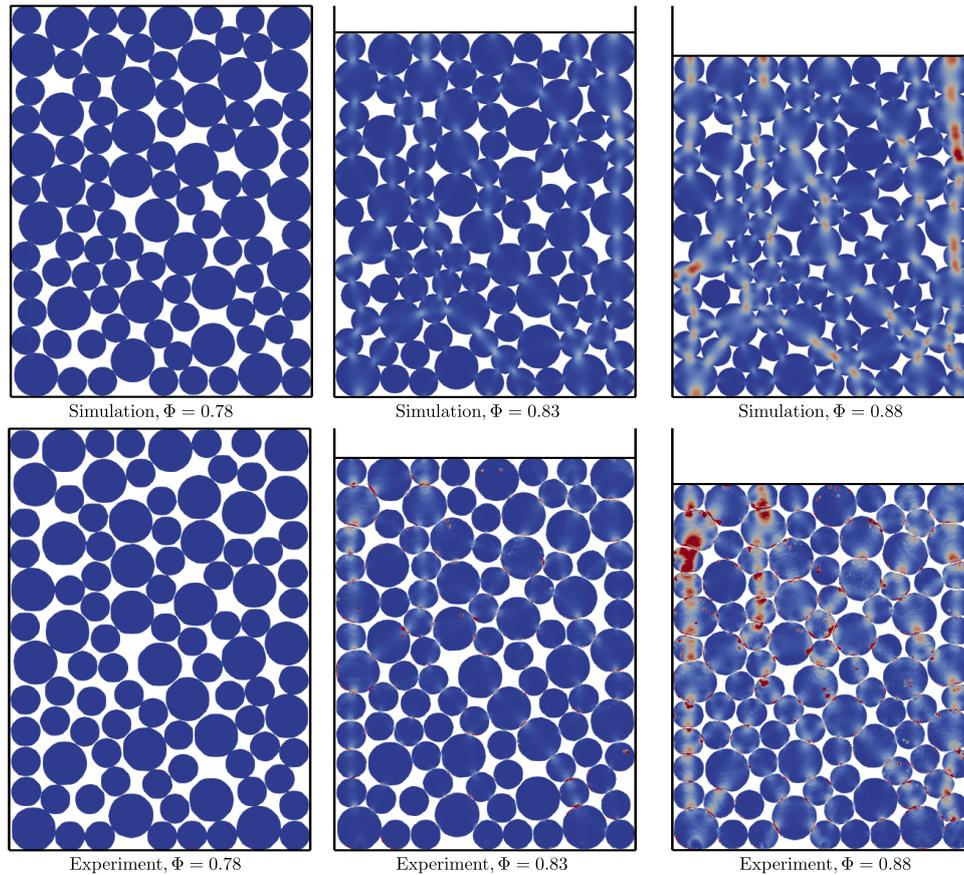


FIGURE 2.15 – Trois états de compaction lors de la compression uni-axiale d’un assemblage de particules à silicium. Le code de couleurs est la valeur de la densité d’énergie de déformation  $\Psi$  calculée à partir des champs de déformations et des équations constitutives des matériaux considérés. Les trois images représentées en haut sont issues d’une simulation numérique avec  $\mu_f = 0,3$ . Les trois images du bas sont issues des expériences analysées par DIC [8, Art].

## 2.2 Compression bi-axiale d’assemblages de particules molles

L’analyse du comportement des assemblages de particules molles soumis à la compression uni-axiale présentée plus haut a montré 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 cette section, on étudie la compression bi-axiale des assemblages de particules molles à partir d’une configuration initiale préparée par compression isotrope en utilisant la méthode BPM. Les résultats présentés ici sont basés sur la thèse de *Thanh Hai Nguyen*.

### 2.2.1 Compression isotrope

Nous considérons le même assemblage que celui présenté dans la section 2.1.1. La discrétisation par particules primaires est similaire aux simulations de la compaction utilisant la BPM avec la même interaction cohésive. Il n’y a aucun frottement entre les particules et entre les particules et les parois. Avant l’étude de la compression bi-axiale, nous préparons des échantillons par compression isotrope pour différentes valeurs de la pression de confinement;  $p_c = 0,2, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 1, 1,1, 1,2, 1,6, 2, 2,4, 2,8, 3,2$  et  $3,6$  MPa. L’assemblage est soumis à  $p_c$  sur la paroi supérieure et sur la paroi de droite, les deux autres parois étant toujours fixes; voir la figure 2.18. Le système devient isotrope lorsque l’équi-

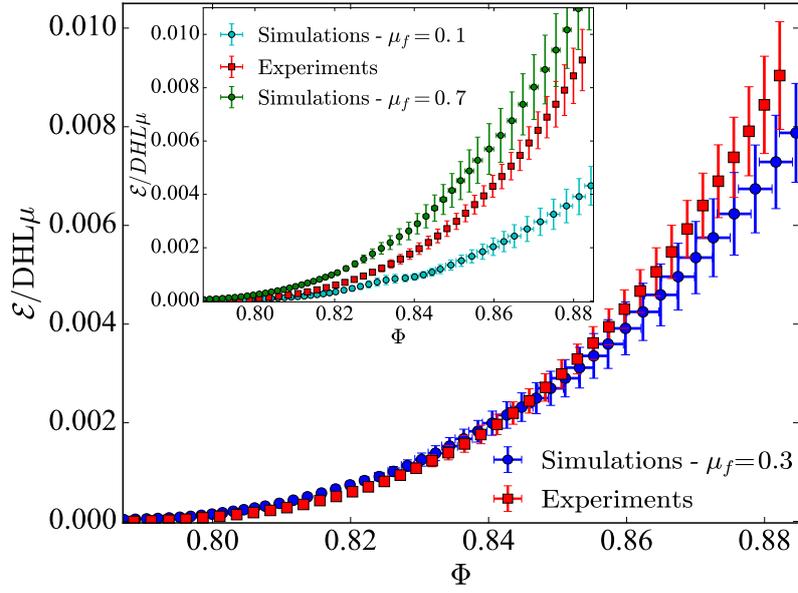


FIGURE 2.16 – Énergie de déformation totale en fonction de la compacité lors de la compaction d'un assemblage de particules néo-Hookéennes. Les données numériques sont calculées avec le coefficient de frottement  $\mu_f = 0,3$ . Encart : comparaison expérience-numérique de l'énergie de déformation en prenant cette fois des coefficients de frottement  $\mu_f = 0,1$  et  $\mu_f = 0,7$  [8, Art].

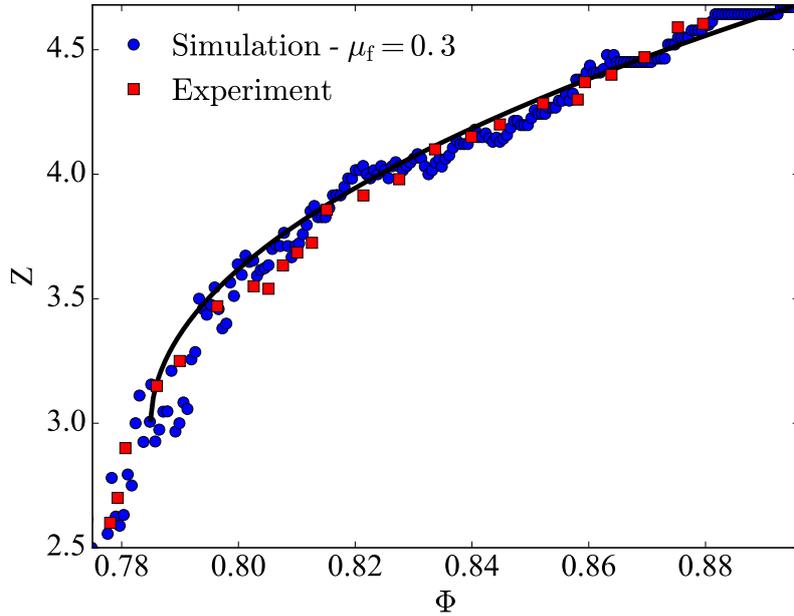


FIGURE 2.17 – Évolution des nombres de coordination  $Z$  numérique et expérimentale en fonction de la compacité  $\Phi$ . La ligne continue correspond à la relation (2.20).

libre atteint; *c'est-à-dire*,  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = p_c$ . Par ailleurs, la contrainte caractéristique (ou le seuil plastique  $p_I = F_0/a_0$ ) dans le modèle BPM pour cet assemblage varie entre 0,77 MPa et 1,43 MPa en considérant que  $F_0 = 100$  N et les diamètres des particules primaires sont entre 0,07 et 0,13 mm. En prenant la valeur moyenne  $\langle a_0 \rangle$  de la distance entre particules primaires, on obtient une contrainte caractéristique de  $p_I \simeq 1$  MPa. Notons que les valeurs de la pression de confinement  $p_c$  considérées sont inférieures ou supérieures

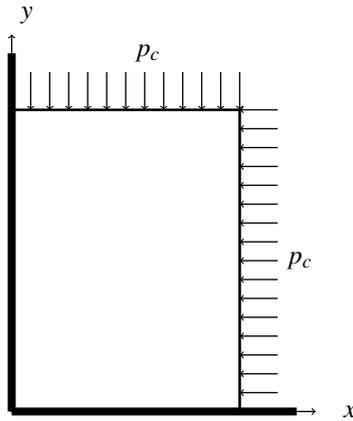


FIGURE 2.18 – Schéma de la compaction isotrope.

à  $p_I$ . Ceci nous permettra d'analyser plus clairement l'influence de la pression de confinement par rapport à la contrainte caractéristique.

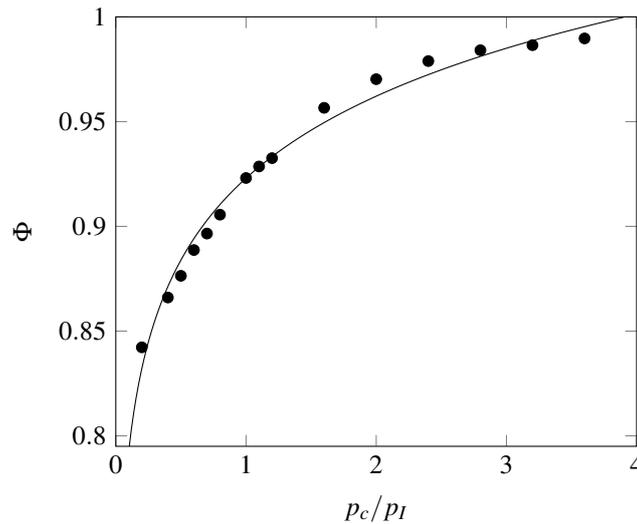


FIGURE 2.19 – Compacité  $\Phi$  en fonction de la pression de confinement  $p_c$  dans l'état isotrope, normalisée par la contrainte caractéristique  $p_I$ .

La figure 2.19 montre la compacité  $\Phi$  dans l'état isotrope à l'équilibre en fonction de la pression de confinement  $p_c$ . Nous constatons que les valeurs de  $\Phi$ , dans tous les cas, dépassent la compacité de l'état RCP. On observe aussi que  $\Phi$  augmente de façon quasi-logarithmique en fonction de  $p_c$  :

$$\Phi = \Phi(p_I) + C_\Phi \log_{10} \frac{p_c}{p_I}, \quad (2.21)$$

avec  $C_\Phi \simeq 0,13$  et  $\Phi(p_I) \simeq 0,92$ .

Afin de comparer nos résultats avec ceux obtenus en mécanique des sols, on considère l'évolution de l'indice de vide  $e$  ( $e = 1/\Phi - 1$ ) en fonction de  $p_c$  comme sur la figure 2.20. On constate également une évolution logarithmique comme c'est le cas dans la mécanique des sols [137] :

$$e = e(p_I) - C_e \log_{10} \frac{p_c}{p_I}, \quad (2.22)$$

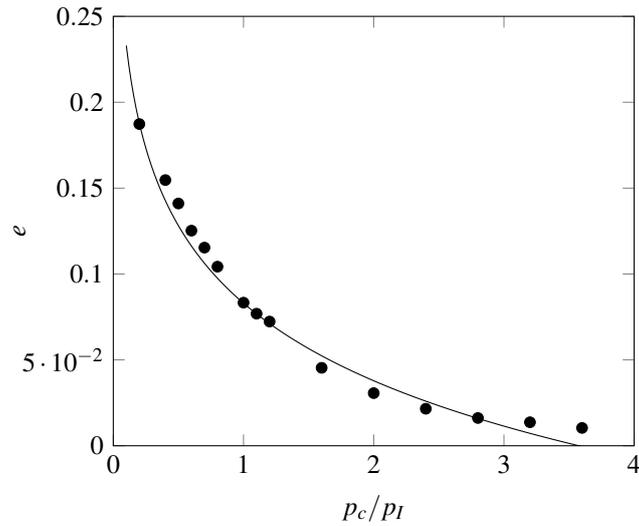


FIGURE 2.20 – Indice des vides  $e$  en fonction de la pression de confinement  $p_c$  dans l'état isotrope, normalisée par la contrainte caractéristique  $p_I$ .

avec  $C_e \simeq 0,15$  et  $e(p_I) \simeq 0,08$ . Pour les argiles qui subissent les variations importantes de volume, cette dépendance logarithmique a été bien démontrée. En effet, les argiles sont composés d'agrégats qui peuvent se déformer plastiquement sous l'effet des contraintes comme dans notre système modèle; voir la figure 2.24(a-b). Cette forme logarithmique peut physiquement s'expliquer par la variation du volume des pores qui est d'autant plus faible que ce volume est petit.

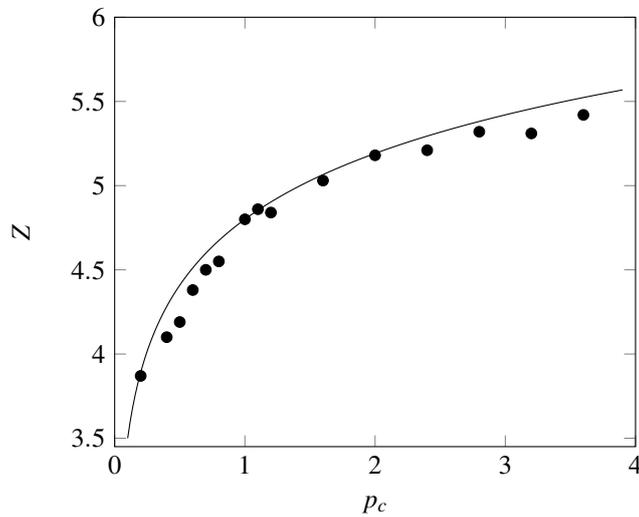


FIGURE 2.21 – Nombre de coordination  $Z$  en fonction de la pression de confinement  $p_c$  dans l'état isotrope, normalisée par la contrainte caractéristique  $p_I$ .

On voit sur la figure 2.21 que le nombre de coordination  $Z$  varie également logarithmiquement avec la pression de confinement  $p_c$  :

$$Z = Z(p_I) + C_Z \log_{10} \frac{p_c}{p_I}, \quad (2.23)$$

avec  $C_Z \simeq 1,3$  et  $Z(p_I) \simeq 4,8$ . Il est intéressant de noter que l'on peut écrire une relation linéaire entre  $Z$  et

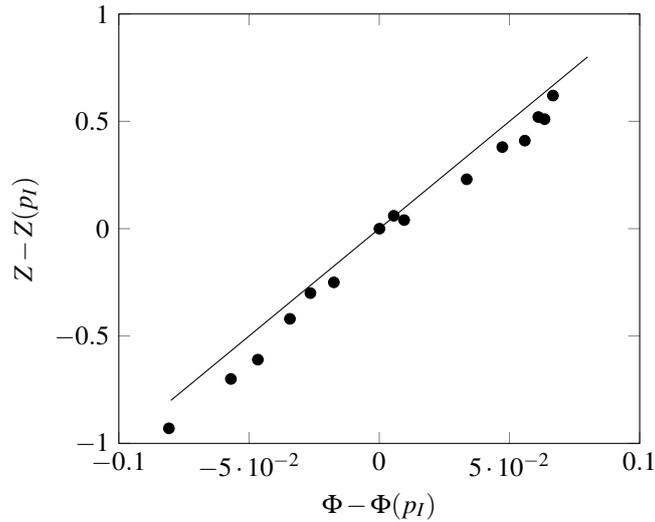


FIGURE 2.22 – Nombre de coordination  $Z$  en fonction de la compacité  $\Phi$  dans l'état isotrope.

$\Phi$  en considérant les équations (2.21) et (2.23) :

$$Z - Z(p_I) = \frac{C_Z}{C_\Phi} (\Phi - \Phi(p_I)) . \quad (2.24)$$

On peut voir sur la figure 2.22, que cette relation est très bien vérifiée avec une ligne droite de pente  $C_Z/C_\Phi \simeq 10$ . Cependant, elle est contraire à la loi de puissance proposée dans la section 2.1.4 pour la compression uni-axiale. Cela montre que la relation entre la connectivité et la compacité dépend du chemin de chargement. Ce point mérite donc d'être approfondi en considérant des assemblages de particules molles soumis aux différents chargements.

## 2.2.2 Compression bi-axiale

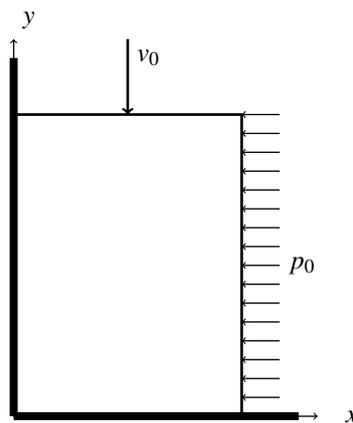


FIGURE 2.23 – Schéma de la compaction bi-axiale.

La compression bi-axiale est appliquée aux assemblages obtenus précédemment par compression isotrope en imposant la pression de confinement constante  $p_c$  sur la paroi de droite et en déplaçant la paroi

supérieure vers le bas à une vitesse constante  $v_0$  ; voir la figure 2.23. Pour assurer la condition quasi-statique des simulations, la vitesse appliquée est fixée à  $v_0 = 0,01$  m/s. Cela permet au paramètre d'inertie  $I$  d'être inférieur à  $10^{-3}$  pour toutes les valeurs de  $p_c$  [33]. Chaque assemblage est cisailé jusqu'à ce que l'état stationnaire soit atteint. La figure 2.24 montre deux états de la compression bi-axiale pour la pression de confinement  $p_c = 0,4$  et  $1,6$  MPa.

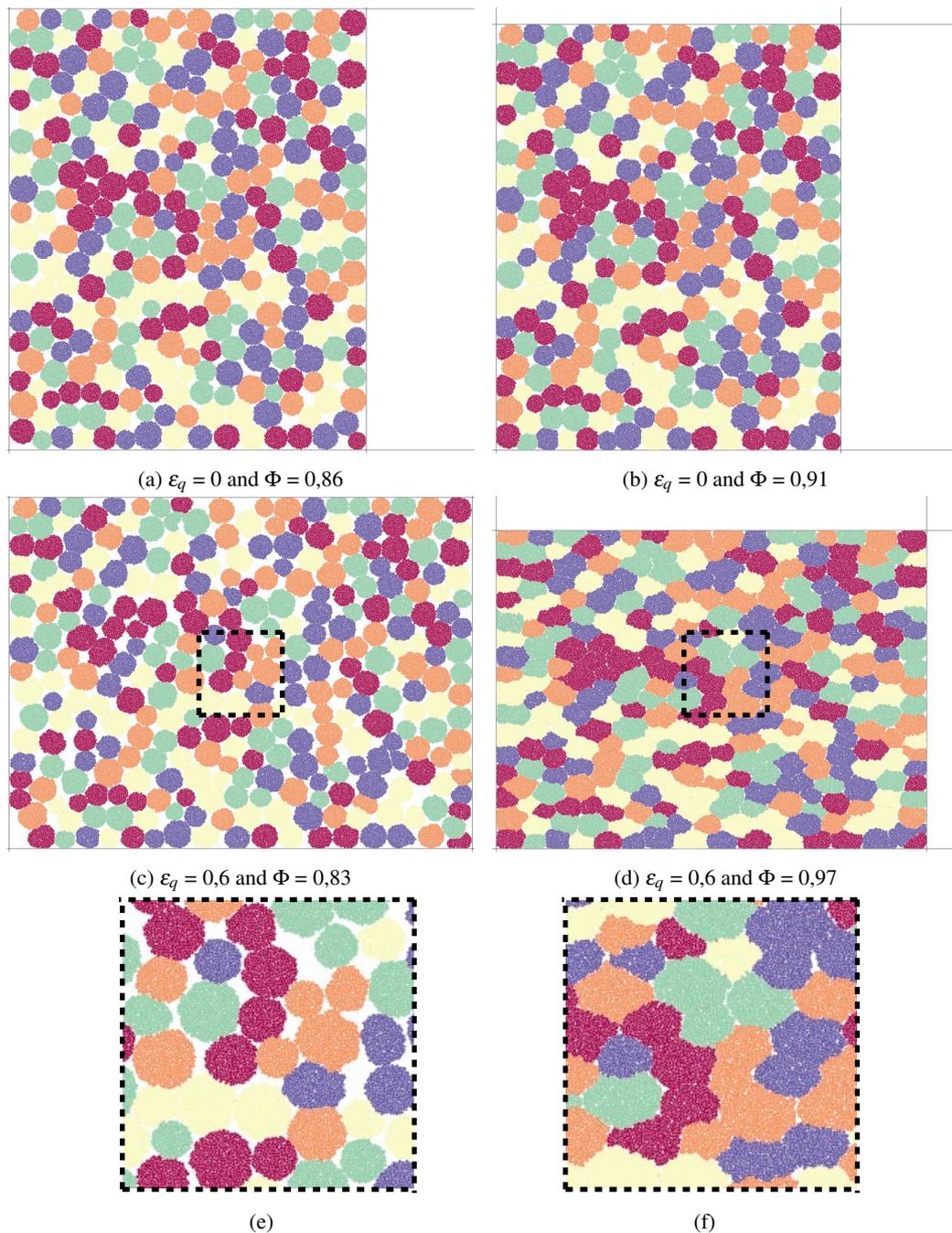


FIGURE 2.24 – Clichés de deux états au cours de la compression bi-axiale d'un assemblage de particules molles pour les pressions de confinement  $p_c = 0,4$  MPa (a, c) and  $p_c = 1,6$  MPa (b, d). Ces états correspondent aux déformations de cisaillement  $\varepsilon_q = 0$  et  $0,6$  ; zoom sur l'image des derniers états de cisaillement (e, f). Les cercles pleins sont les particules primaires rigides des particules.

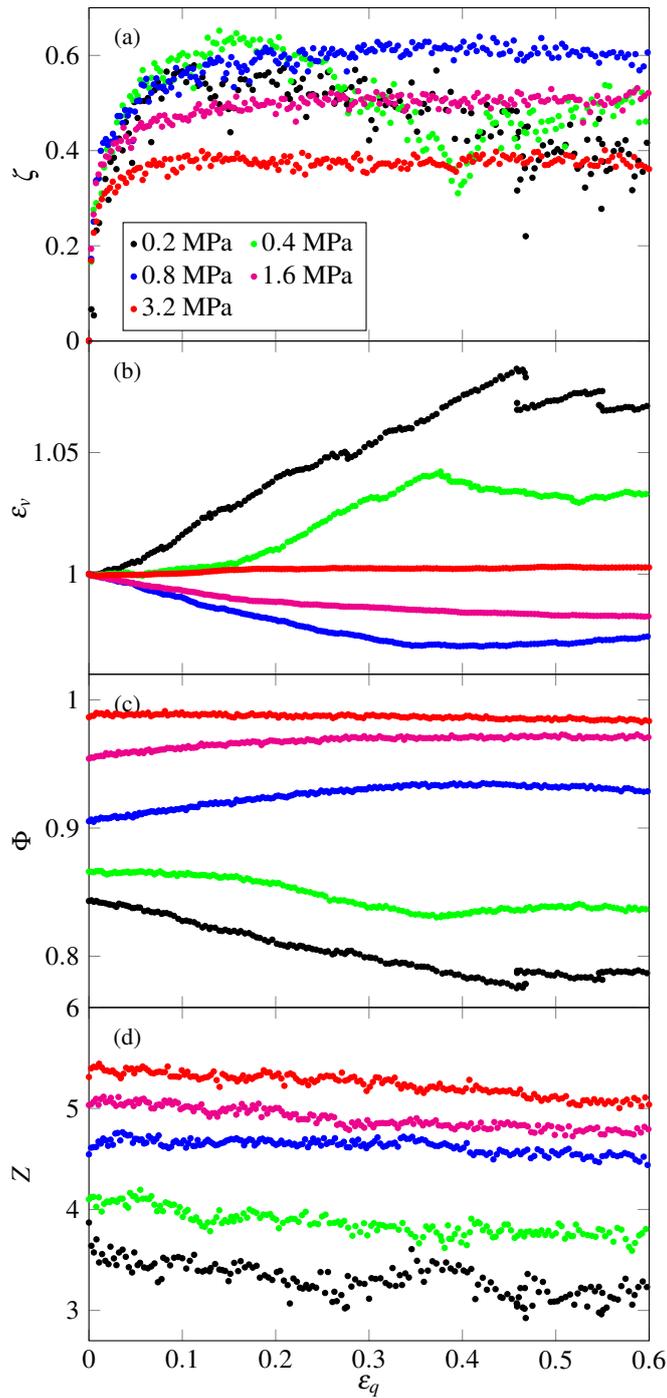


FIGURE 2.25 – Rapport de contrainte  $\zeta$ , la déformation volumique  $\epsilon_v$ , la compacité  $\Phi$  et le nombre de coordination  $Z$  en fonction de la déformation de cisaillement  $\epsilon_q$  pour les pressions de confinement  $p_c = 0, 2, 0, 4, 0, 8, 1, 6$  et  $3, 2$  MPa.

Dans un essai de compression bi-axiale, les contraintes et les déformations principales sont orientées suivant les directions de compression (ici,  $y$ ) et d'extension (ici,  $x$ ). Dans ce cas, pour décrire le comporte-

ment des assemblages, on utilise la pression moyenne  $p$  et le déviateur des contraintes  $q$  :

$$p = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) , \quad (2.25)$$

$$q = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) , \quad (2.26)$$

où  $\sigma_1 = \sigma_{yy}$  et  $\sigma_2 = \sigma_{xx} = p_c$ . De la même façon,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_{yy}$  et  $\varepsilon_2 = \varepsilon_{xx}$ . On définit donc la déformation de cisaillement  $\varepsilon_q$  et la déformation volumique  $\varepsilon_v$  comme suit :

$$\varepsilon_q = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 , \quad (2.27)$$

$$\varepsilon_v = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 . \quad (2.28)$$

L'évolution du déviateur des contraintes  $q$  normalisé par la pression moyenne  $p$ ,  $\zeta = q/p$ , de la déformation volumique  $\varepsilon_v$ , de la compacité  $\Phi$  et de la connectivité  $Z$  en fonction de la déformation de cisaillement  $\varepsilon_q$  est présentée sur la figure 2.25 pour quelques valeurs de la pression de confinement  $p_c$ .  $\zeta$  augmente pendant la compression bi-axiale et passe par un pic pour les valeurs de  $p_c$  inférieures à la contrainte caractéristique  $p_I$ , et se stabilise à une valeur  $\zeta^*$  constante dans l'état stationnaire. Pour  $p_c > p_I$ ,  $\zeta$  croît de façon monotone vers sa valeur  $\zeta^*$  avec beaucoup moins de fluctuations. Les fluctuations pour de faibles valeurs de  $p_c$  sont dues au 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 a pour conséquence de réduire les fluctuations.

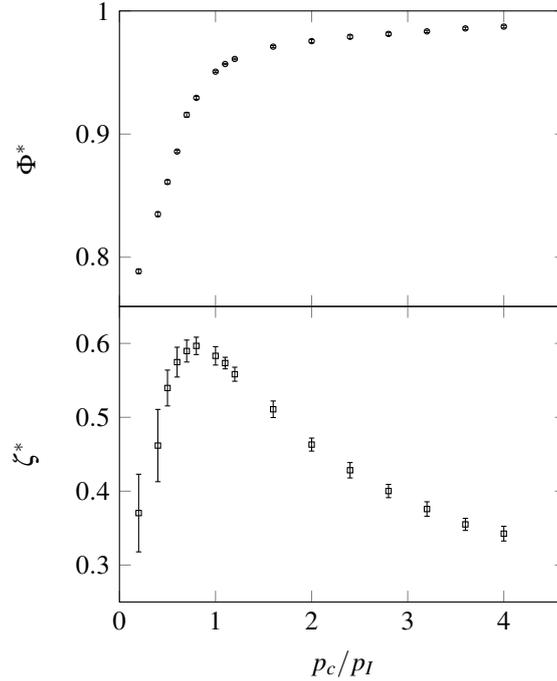


FIGURE 2.26 – Valeurs stationnaires de la compacité  $\Phi^*$  et du rapport de contrainte  $\zeta^*$  en fonction de la pression de confinement  $p_c$ .

Par ailleurs, nous observons une dilatance positive (dilatation) pour des valeurs faibles de  $p_c$  et une dilatance négative (contraction) pour des valeurs grandes de  $p_c$ ; voir la figure 2.25(b-c). Il est intéressant de constater que la dilatance tend à s'annuler lorsque la pression de confinement augmente. Cela peut

s'expliquer par le fait que pour des valeurs plus grandes de  $p_c$ , le très faible volume des pores (par exemple,  $\Phi_{iso} \simeq 0,98$  pour  $p_c = 3,2$  MPa) ne permet pas une large variation de volume.

Dans le cas des assemblages des particules rigides non-frottantes, les assemblages présentent une résistance au cisaillement non-nulle mais une dilatance nulle [23]. Cette résistance est due à des exclusions stériques entre particules et à la dissipation par collisions inélastiques. Bien que l'on constate le même phénomène pour nos particules molles, des valeurs de  $\zeta$  sont plus élevées. Ces valeurs élevées peuvent être le résultat de la déformation plastique des particules et aussi partiellement des interactions par des contacts rugueux entre particules primaires. Cependant, contrairement au cas des particules rigides, l'évolution de  $\zeta$  dépend de la pression  $p$  pour les particules molles. En effet, lorsque la pression  $p$  augmente, la variation de  $\zeta$  change ; voir la figure 2.25(a).

La figure 2.26 montre les valeurs stationnaires de  $\Phi^*$  et de  $\zeta^*$  en fonction de  $p_c$ . La compacité  $\Phi^*$  augmente de manière régulière avec  $p_c$  et tend vers 1. Cependant,  $\zeta^*$  ne varie pas de façon monotone avec  $p_c$ . Pour les valeurs de  $p_c$  inférieures à  $p_I$ , la valeur de  $\zeta^*$  augmente et pour  $p_c > p_I$ , elle diminue. Ce comportement non-trivial peut être expliqué par les mécanismes de cisaillement de particules molles. Pour les valeurs  $p_c < p_I$ , puisque la déformation des particules est faible, le comportement au cisaillement d'assemblages est dominé par réarrangements des particules. L'augmentation de  $p_c$  augmente donc les facteurs jouant sur la résistance au cisaillement : le nombre des contacts, l'anisotropie du réseau des contacts et les chaînes de forces. Pour les valeurs élevées de  $p_c$ , la déformation plastique des particules induisant leur changement de forme diminue l'anisotropie du réseau des contacts. Donc, la variation de  $\zeta^*$  est proportionnelle à  $p_I/p_c$  et elle diminue avec l'augmentation de  $p_c$ . Dans la limite de très grandes pressions de confinement, le comportement de l'assemblage devient proche d'un système continu et sa résistance globale est égale à celle des particules.

## Chapitre 3

# Milieux granulaires humides

Dans ce chapitre, on s'intéresse au comportement rhéologique des matériaux granulaires humides insaturés. Les matériaux granulaires évoluent la plupart du temps en milieu humide dans des processus industriels tels que l'industrie sidérurgique, la métallurgie des poudres ou la fabrication pharmaceutique, ainsi qu'en géologie et en génie civil, ou dans des phénomènes naturels tels que les glissements de terrain et les avalanches. Les matériaux granulaires insaturés présentent une résistance plus élevée que ceux qui sont à l'état sec ou totalement saturé, et cet effet de renforcement dépend de la quantité de liquide ou du degré de saturation. En termes de quantité de liquide, les matériaux granulaires insaturés peuvent se trouver dans trois états différents : l'état pendulaire, l'état funiculaire et l'état capillaire (voir la figure 1.3), la phase liquide passant progressivement de ponts liquides isolés vers des amas de liquide [74, 47].

Dans le cadre de la thèse de *Thanh Trung Vo*, nous avons étudié par simulations numériques la rhéologie et le processus d'agglomération de matériaux granulaires humides, en présence d'une petite quantité de liquide à l'état pendulaire. Dans cet état, ces matériaux sont caractérisés par un réseau de liaisons capillaires, qui donnent lieu à une force de cohésion capillaire et à une force visqueuse entre les particules. Dans les simulations DEM, cela implique des interactions cohésives et visqueuses venant s'ajouter à celles de contact-frottant entre particules ; voir la section 1.1.1. On présente par la suite les résultats importants issus de cette thèse qui sont publiés sous la forme de 4 articles [12, 10, 2, 3, Art].

### 3.1 Écoulement des matériaux granulaires humides

La plupart des études sur la rhéologie des matériaux granulaires, menées au cours des trois dernières décennies, ont porté sur les matériaux secs. Par exemple, le comportement en régime permanent a fait l'objet d'études approfondies et des modèles basés sur le nombre inertiel  $I$  ont été proposés et appliqués à diverses géométries d'écoulement [33, 27]. Ces modèles sont basés sur des milieux granulaires composés de particules rigides avec seulement des interactions de contact frottant. Dans ce cas, l'écoulement génère une pression inertielle (ou cinétique)  $\sigma_i \sim \rho_s \langle d \rangle^2 \dot{\gamma}^2$ , où  $\rho_s$  est la densité des particules,  $\langle d \rangle$  représente le diamètre moyen des particules, et  $\dot{\gamma}$  est le taux de cisaillement. Par conséquent, le coefficient de frottement apparent  $\mu = \tau / \sigma_p$  (le rapport entre la contrainte de cisaillement  $\tau$  et la contrainte de confinement  $\sigma_p$ ) et la compacité  $\Phi$  peuvent uniquement être exprimés en fonction du rapport  $I^2 \equiv \sigma_i / \sigma_p$ , qui représente les effets concurrents de l'inertie et du confinement de particules.

Pour les matériaux granulaires cohésifs, les interactions des particules ne sont pas purement frictionnelles et la force de contact cohésive  $f_c$  existe entre particules. Dans ces matériaux, l'action moyenne de la contrainte cohésive résultante  $\sigma_c \sim f_c / d^2$  est similaire à une contrainte de confinement [104, 106]. Comme les contraintes sont additives, on peut prendre en compte la contrainte cohésive au même titre que la contrainte de confinement en remplaçant  $\sigma_p$  par une combinaison linéaire des contraintes de cohésion et de confinement,  $\sigma_n = \sigma_p + \alpha \sigma_c$ . Par conséquent, on peut remplacer  $I^2$  par  $I_c^2 \equiv \sigma_i / \sigma_n = I^2 / (1 + \alpha \xi)$ , où  $\xi = \sigma_c / \sigma_p$  est l'indice de cohésion [14]. De même, dans les écoulements granulaires immergés, où la force de résistance visqueuse  $\sigma_v$  est présente,  $\sigma_i$  peut être remplacé par une combinaison linéaire  $\sigma_i + \beta \sigma_v$ , conduisant à un nombre visco-inertiel  $I_v^2 \equiv (\sigma_i + \beta \sigma_v) / \sigma_p = I^2 (1 + \beta / \text{St})$ , où  $\text{St} \equiv \sigma_i / \sigma_v$  est le nombre de

Stokes. Dans les suspensions denses,  $I_v$  s'avère être le paramètre de contrôle pour  $\mu$  et  $\Phi$  [130, 5].

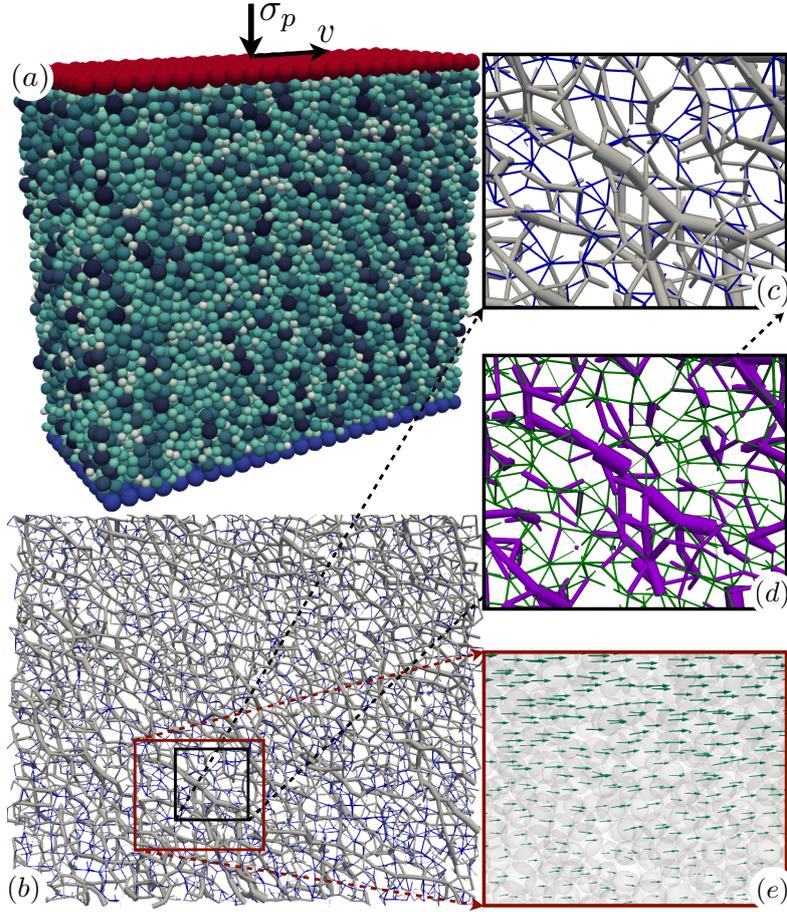


FIGURE 3.1 – (a) Système simulé de particules sphériques humides soumis à une pression de confinement constante  $\sigma_p$  et cisailé par une vitesse horizontale constante  $v$  de la paroi supérieure rugueuse. Les couleurs des particules sont proportionnelles aux diamètres des particules ; (b, c) Instantané des chaînes de force de compression (grises) et de traction (bleues). L'épaisseur de la ligne est proportionnelle à la force normale ; (d) Instantané des forces de contact (violette) et des forces capillaires sans contact (vertes) ; (e) Instantané du champ de vitesse des particules en écoulement continu.

Dans [2, Art], afin de définir une description unifiée de l'écoulement des matériaux granulaires complexes, nous avons réalisé des simulations 3D de cisaillement en régime d'écoulement stationnaire d'assemblages granulaires composés de près de 20 000 particules sphériques en utilisant le modèle numérique présenté dans la section 1.1.1. Dans ces simulations, une large gamme de valeurs de viscosité  $\eta$ , de tension superficielle  $\gamma_s$ , de contrainte de confinement  $\sigma_p$  et de taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  a été utilisée. Les clichés de la figure 3.1 montrent les conditions aux limites, les chaînes de force de compression et de traction, les forces de contact et à distance (dues aux ponts capillaires) et les vitesses des particules en écoulement continu.

La figure 3.2 présente le coefficient de frottement apparent  $\mu$  et la compacité  $\Phi$  en fonction du nombre inertiel  $I$  pour toutes nos 281 simulations. La contrainte de confinement  $\sigma_p$  a varié dans la plage [15 , 1000] Pa, l'indice de cohésion  $\xi$  dans la plage [0 , 3] (en faisant varier  $\gamma_s$  ou  $\sigma_p$ ), la viscosité de liquide  $\eta$  dans la plage [ $\eta_w$ ,  $800\eta_w$ ], où  $\eta_w$  est la viscosité de l'eau, et le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  dans la plage étendue [0,31 , 10,6]  $s^{-1}$ . Comme dans les écoulements secs [27],  $\mu$  augmente et  $\Phi$  diminue avec l'augmentation de  $I$ , mais avec des valeurs différentes et à taux différents en fonction de la viscosité  $\eta$  et l'indice de cohésion  $\xi$ . Ces différences sont observées à la fois à de faibles valeurs (débit quasi-statique) et à des valeurs élevées (écoulement inertiel) de  $I$ , et la variabilité de  $\mu$  et  $\Phi$  avec la variation de  $I$  est du même

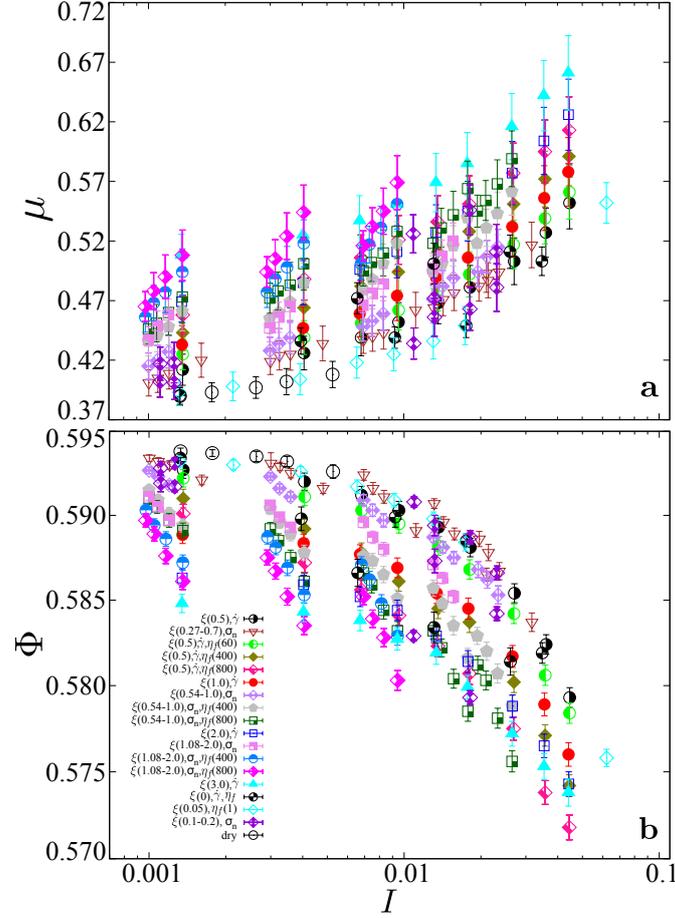


FIGURE 3.2 – Le coefficient de frottement apparent  $\mu$  (a) et la compacité  $\Phi$  (b) en fonction du nombre inertiel  $I$ . La moyenne des valeurs est calculée sur l'état d'équilibre. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des données dans chaque simulation. Pour chaque ensemble de simulations, les symboles et leurs couleurs correspondent aux paramètres qui varient avec leurs pages, tous les autres paramètres étant maintenus constants.

ordre de grandeur que pour les paramètres visqueux et cohésifs.

Comme on peut voir sur la figure 3.3, toutes ces différentes valeurs du frottement apparent et de la compacité peuvent être mises à l'échelle en fonction d'un nombre inertiel modifié  $I_m$  qui combine la tension superficielle, la viscosité du liquide, la pression de confinement et le taux de cisaillement :

$$I_m = I \left( \frac{1 + \beta/St}{1 + \alpha\xi} \right)^{1/2}. \quad (3.1)$$

Sur la figure 3.3, les valeurs de  $\mu$  et  $\Phi$  sont normalisées par  $\mu_c$  et  $\Phi_c$ , respectivement, qui correspondent à leurs valeurs quasi-statiques ( $I_m \rightarrow 0$ ) et variées linéairement avec  $\xi$ , comme indiqué dans les deux encarts de la figure 3.3. Les valeurs des paramètres constants  $\alpha \simeq 0.062$  et  $\beta \simeq 0.075$ , ont été déterminées à partir de deux séries de simulations, mais nous constatons qu'elles conduisent à des résultats permettant la superposition des données pour toutes les autres simulations. Ils reflètent les rôles relatifs des forces visqueuses, inertielles et cohésives dans les mécanismes de dissipation collective. Ces courbes sont bien ajustées par les relations suivantes :

$$\frac{\mu}{\mu_c} = 1 + \frac{\Delta\mu}{1 + I_\mu/I_m}, \quad (3.2)$$

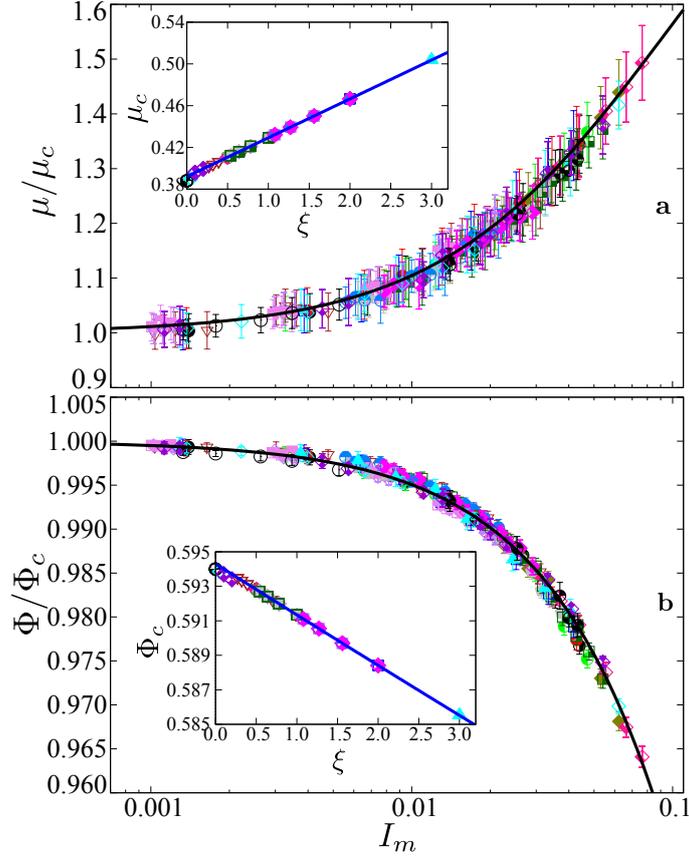


FIGURE 3.3 – (a) Le coefficient de frottement effectif normalisé  $\mu/\mu_c$  et (b) la compacité effective normalisée  $\phi/\phi_c$  en fonction du nombre inertiel modifié  $I_m$  défini par l'équation (3.1) avec  $\alpha \simeq 0,062$  et  $\beta \simeq 0,075$ . Les barres d'erreur représentent l'écart-type de l'état d'équilibre. Les lignes continues noires sont les expressions analytiques (3.2) et (3.3). Les encarts montrent l'évolution des fonctions quasi-statiques  $\mu_c$  et  $\Phi_c$  avec l'indice de cohésion  $\xi$ , avec des ajustements linéaires (lignes bleu-solides).

$$\frac{\Phi}{\Phi_c} = \frac{1}{1 + I_m/I_\Phi}, \quad (3.3)$$

avec  $\Delta\mu \simeq 1,100$ ,  $I_\mu \simeq 0,095$  et  $I_\Phi \simeq 2,010$ . Il est intéressant de noter que ces relations sont les mêmes que dans les écoulements granulaires secs lorsque  $I_m$  est remplacé par  $I$ . Notons également que  $I_m$  n'est pas seulement le paramètre d'échelle pour les variables macroscopiques ( $\mu$  et  $\phi$ ), mais aussi pour les variables micro-structurelles (pour plus de détails, voir [2, Art]).

La rhéologie additive des matériaux granulaires est une conséquence de la nature des matériaux granulaires, dans lesquels les interactions des particules se produisent au niveau de points de contact, et la dynamique locale est contrôlée par le taux de cisaillement. Ainsi, en distinguant soigneusement les contraintes en fonction du taux de cisaillement ( $\sigma_i$  et  $\sigma_v$ ) de celles qui en sont indépendantes ( $\sigma_p$  et  $\sigma_c$ ), on peut définir un seul paramètre au moyen de la propriété d'additivité des contraintes. A cet égard, le nombre visco-cohésif-inertiel obtenu  $I_m$  généralise le nombre inertiel classique  $I$  et étend la validité de ce cadre théorique aux cas des interactions humides entre particules. Notons que son application aux écoulements cohésifs nécessite la normalisation de la compacité et du coefficient de frottement apparent par leurs valeurs dans la limite quasi-statique (valeurs qui dépendent uniquement de l'indice de cohésion); voir la figure 3.3.

## 3.2 Agglomération des matériaux granulaires humides

L'agglomération humide de particules solides fines en particules plus grosses, appelées granules ou agglomérats, est une technique très répandue dans les procédés industriels tels que la fabrication de produits pharmaceutiques [47, 21], engrais et produits alimentaires [107, 13], métallurgie [88] et fabrication du fer [111, 3]. L'augmentation de la taille des granules modifie les propriétés rhéologiques du matériau granulaire et peut améliorer les propriétés d'écoulement, réduire la ségrégation de différents types de particules primaires ou améliorer la perméabilité au gaz interstitiel entre les grains [107, 109, 122, 41, 64, 63]. Le mouillage des particules primaires est réalisé soit en les mélangeant avec un liquide de liaison avant le procédé, soit en égouttant ou en pulvérisant le liquide sur le matériau pendant le procédé [63, 138, 4, 16, 28, 93, 95, 94]. Les granules se forment à la suite des interactions collisionnelles-frictionnelles/capillaires-visqueuses des particules primaires humides et grandissent ensuite en taille par incorporation du liquide disponible, accréation de particules primaires plus fines et coalescence avec les autres granules [31]. Les granules existants peuvent survivre, croître ou disparaître, selon la quantité de liquide disponible et le taux d'érosion par rapport à celui de l'accréation (stratification) et coalescence [47, 119].

Dans ce contexte, la nécessité de développer des approches systématiques de modélisation et d'analyse afin de bien comprendre le processus d'agglomération, ont largement motivé le travail de thèse de *Thanh Trung Vo*. Nous avons réalisé une vaste étude paramétrique des écoulements cohésifs par simulations DEM 3D en tenant compte de l'agglomération des particules. Cette étude qui a été menée dans le cas d'écoulements simples [3, Art] et de tambours tournants [10, Art], a permis de traiter, de façon générique, plusieurs questions liées aux matériaux granulaires cohésifs. De plus, une étude de la résistance mécanique des agglomérats a été effectuée [12, Art]. Dans cette section, nous décrivons brièvement ces travaux basés sur des simulations utilisant la méthode numérique dans la section 1.1.1.

### 3.2.1 Évolution d'un agglomérat dans un tambour tournant

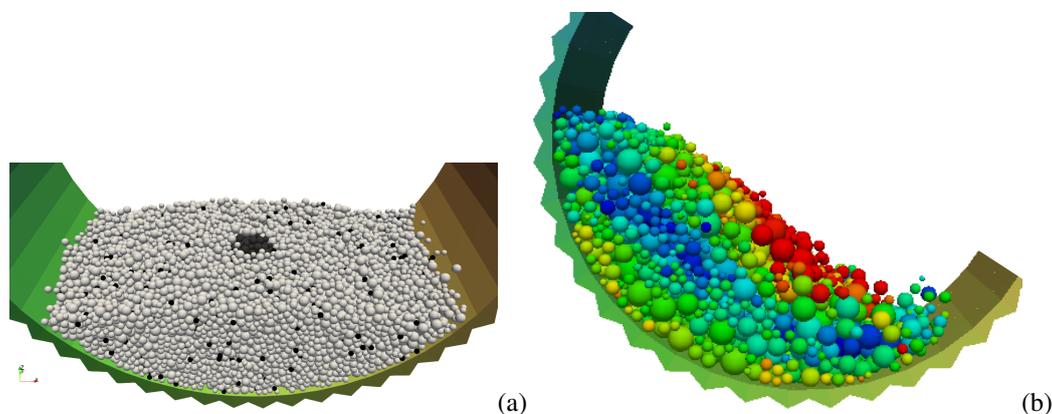


FIGURE 3.4 – (a) Schéma du lit granulaire composé de 5000 particules au total et 100 pour le granule : Il montre la répartition des particules sèches (en blanc), et des particules humides (en noir) à la fois celles qui se trouvent initialement à l'intérieur du granule défini au centre du lit et celles qui se trouvent à l'extérieur du lit ; (b) Instantané de l'écoulement stable dans le tambour. Les couleurs montrent l'amplitude des vitesses de particules variant de rouge (particules rapides à la surface libre) à bleu (particules les plus lentes au milieu du tambour).

Dans [10, Art], nous avons étudié la croissance/érosion d'agglomérats dans un tambour tournant. La géométrie du tambour permet de créer un écoulement dense et régulier de particules sphériques afin d'étudier la croissance d'un seul granule pré-nucléé composé de particules humides agissant comme un grain ; voir la figure 3.4. Notons que le régime d'écoulement dans le tambour tournant dépend principalement de la valeur du nombre de Froude ( $Fr = \omega^2 d_c / 2g$ , où  $\omega$  et  $d_c$  sont la vitesse de rotation et le diamètre du tambour, respectivement, et  $g$  l'accélération gravitationnelle). Pour les particules sèches, la valeur  $Fr = 0,5$

conduit à un régime d'écoulement intermédiaire entre les régimes de roulement et de cascade. Comme ces régimes ont été établis pour les particules sèches, nous avons étudié l'effet des particules humides en comparant les profils de vitesse pour les particules sèches, d'une part, et en présence de particules humides, d'autre part, pour  $Fr = 0,5$ . Nous avons observé pratiquement les mêmes profils de vitesse dans les deux cas ; voir [10, Art].

Le granule peut croître en capturant les particules humides libres à l'intérieur de l'écoulement granulaire, ou rétrécir en perdant ses particules humides. L'hypothèse importante faite ici est que le liquide disponible est transporté par les particules et que celles-ci ne forment des liaisons capillaires qu'entre particules « humides ». Bien que l'évolution de la distribution du liquide composant les liaisons soit un aspect clé du processus d'agglomération, il est important de distinguer deux échelles temporelles : 1) un temps associé au mouillage et à la redistribution du liquide, et 2) un temps associé au cisaillement. Dans nos simulations, nous avons supposé que tout le liquide est au préalable distribué dans l'échantillon granulaire, à la fois à l'intérieur du granule et au niveau de particules individuelles dispersées uniformément dans le matériau. Dans les écoulements inertiels, le temps de redistribution est supérieur au temps d'écoulement. Par conséquent, une particule mouillée transportera le liquide et ne pourra le partager qu'avec une autre particule humide. Avec ces hypothèses, la capture progressive des particules humides libres conduit à une croissance du granule exponentielle avec le nombre de rotations du tambour. Il est intéressant de noter qu'au contraire, le nombre de particules érodées augmente linéairement avec le temps ; voir les figures 3.5 et 3.6. Comme le liquide disponible (ou le nombre équivalent de particules humides) est limité, la taille des granules tend vers une valeur constante.

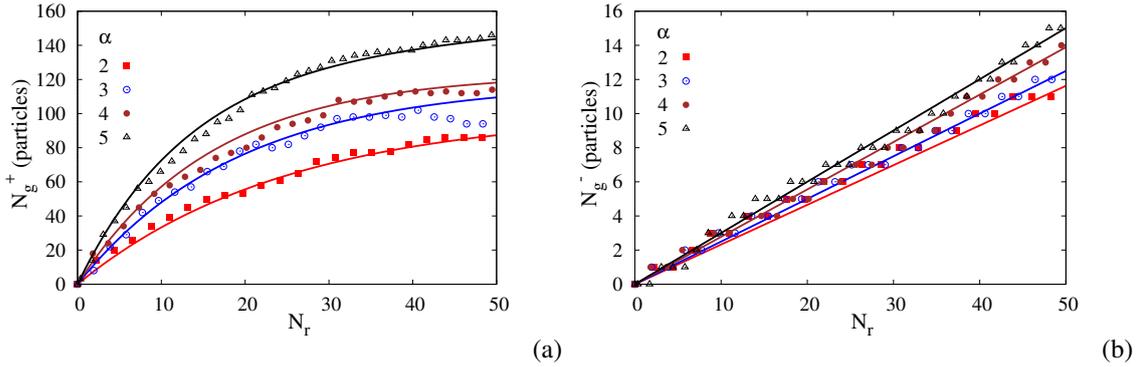


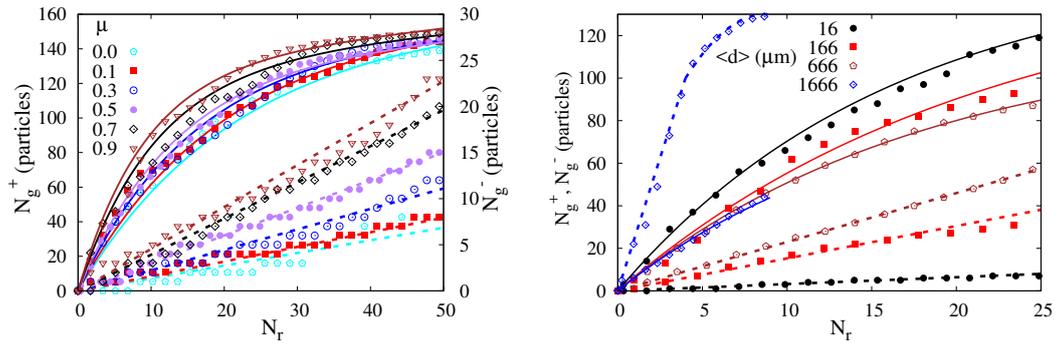
FIGURE 3.5 – L'accrétion (a) et l'érosion (b) cumulés des particules en fonction du nombre de rotations du tambour  $N_r$  pour différentes valeurs du rapport de taille  $\alpha$ ,  $d_{min} = 10 \mu m$ ,  $\eta = 1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$  et  $\mu = 0.5$ . Les lignes sont des fonctions d'ajustement par les équations (3.4) et (3.5).

Nous avons étudié l'effet des 4 paramètres du matériau sur l'accrétion et l'érosion des particules : le rapport de taille des particules ( $\alpha = d_{max}/d_{min}$ ), la taille moyenne des particules  $\langle d \rangle$ , le coefficient de frottement entre particules  $\mu$  et la viscosité du liquide  $\eta$ . L'effet de ces paramètres est parfois contre-intuitif. L'accrétion et l'érosion augmentent avec le rapport de taille ou le coefficient de frottement (les figures 3.5 et 3.6a). Par contre, l'accrétion diminue alors que l'érosion augmente lorsque la taille moyenne des particules augmente (la figure 3.6b). L'accrétion augmente alors que l'érosion diminue lorsque la viscosité du liquide augmente (la figure 3.6c). Par ailleurs, les nombres de particules accrétées  $N_g^+$  et érodées  $N_g^-$  varient avec le nombre de rotations du tambour  $N_r$  comme suit [12, Art] :

$$N_g^- = k^- N_r \quad (3.4)$$

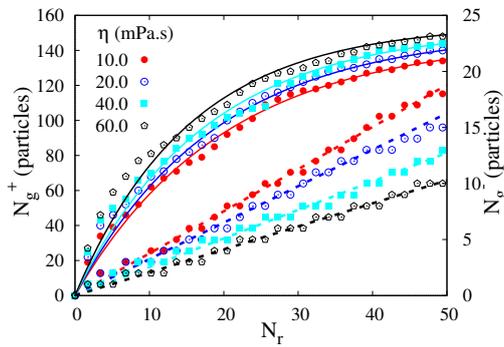
$$N_g^+ = \{N_w(1 - k^-/k^+) - N_{g0}\}(1 - e^{-\frac{k^+}{N_w}N_r}) + k^- N_r \quad (3.5)$$

où  $k^+$  et  $k^-$  sont les taux relatifs d'accrétion et d'érosion, respectivement,  $N_w$  est le nombre de particules humides et  $N_{g0}$  représente le nombre de particules constituant le granule initial. Ces relations ajustent bien les résultats numériques. Nous avons également déterminé le diagramme de phase de l'agglomération



(a)  $\alpha = 5$ ,  $d_{min} = 10 \mu\text{m}$  et  $\eta = 1 \text{ mPa.s}$

(b)  $\alpha = 5$ ,  $\eta = 1 \text{ mPa.s}$  et  $\mu = 0,5$



(c)  $\alpha = 5$ ,  $d_{min} = 10 \mu\text{m}$  et  $\mu = 0,5$

FIGURE 3.6 – L'accrétion (lignes pleines) et l'érosion (lignes pointillées) cumulative de particules humides en fonction du nombre de rotation du tambour  $N_r$  pour différentes valeurs du coefficient de frottement  $\mu$  (a), de la taille moyenne des particules  $\langle d \rangle$  (b), et de la viscosité du liquide  $\eta$  (c). Les lignes sont les fonctions d'ajustement données par les équations (3.4) et (3.5).

en variant systématiquement le rapport de taille des particules et leur taille moyenne; voir la figure 3.7. Notons que, bien que nous ayons pu analyser séparément les processus d'accrétion et d'érosion, il n'a pas été possible d'effectuer une analyse détaillée des mécanismes à l'échelle des particules en raison de la complexité de l'écoulement dans le tambour tournant.

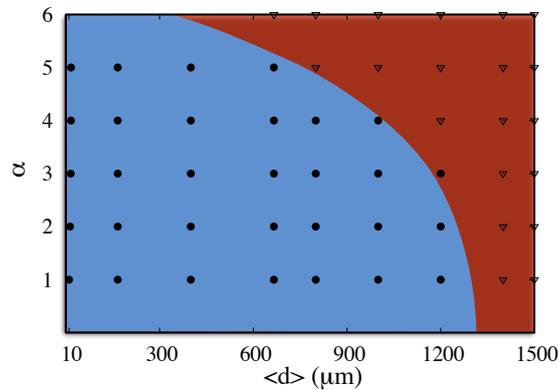


FIGURE 3.7 – Diagramme de phase du croissance des granules dans l'espace paramétrique de  $\langle d \rangle$  vs.  $\alpha$  pour  $\eta = 1 \text{ mPa.s}$  et  $\mu = 0,5$ . Le granule ne croît que dans la région bleu clair et disparaît ailleurs.

### 3.2.2 Évolution d'un agglomérat en écoulement de cisaillement

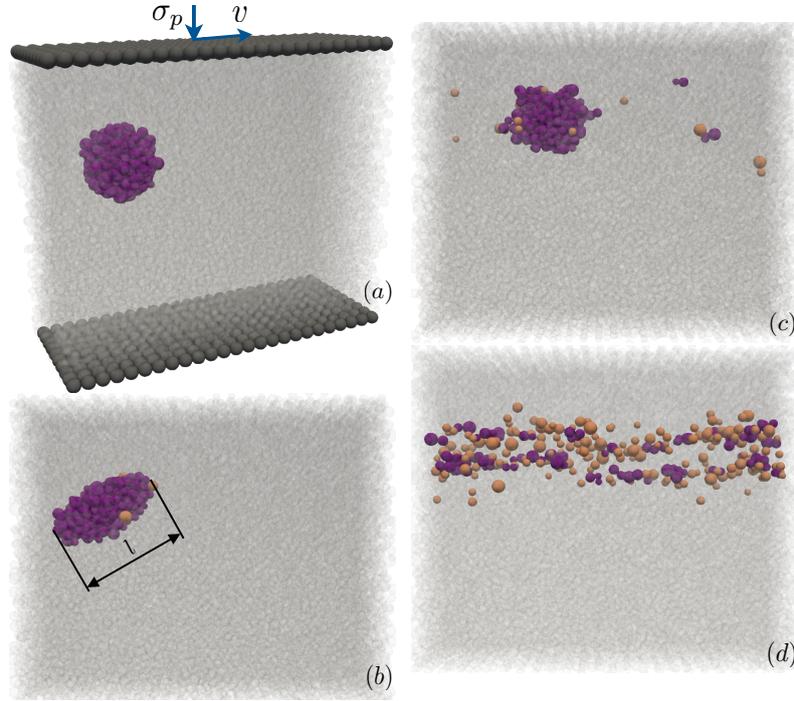


FIGURE 3.8 – (a) Système simulé d'un agglomérat humide dans un lit granulaire de particules sèches soumises à un écoulement de cisaillement homogène ; (b) L'allongement et l'érosion de l'agglomérat ; (c) L'allongement, l'érosion et l'endommagement ; (d) La dispersion spontanée des particules humides.

Dans [3, Art], l'étude de l'érosion et de la déformation d'un agglomérat cohésif unique est abordée en conditions périodique d'écoulement sous l'effet d'un cisaillement simple ; voir la figure 3.8(a). Contrairement au cas du tambour tournant cette configuration fournit des conditions aux limites presque homogènes, rendant plus facile la caractérisation de l'évolution du granule. Une question importante est de préciser comment l'indice de cohésion et le nombre inertiel contrôlent cette l'évolution. En effet, un granule peut survivre sous l'effet du cisaillement, sans déformation ni érosion, être allongés sans dommage (perte de contacts cohésifs), être endommagé, érodé ou simplement disparaître ; voir la figure 3.8(b-d). Les taux d'allongement  $K_g$ , d'érosion  $K_e$  ou d'endommagement  $K_b$  (définis dans [3, Art] pour une étude paramétrique de l'évolution de l'agglomérat) sont montrés sur la figure 3.9(a,b,c). Comme prévu, les trois taux augmentent avec  $I$  et diminuent avec  $\xi$ . Alors que  $K_g$  augmente presque linéairement,  $K_b$  et  $K_e$  augmentent non-linéairement en fonction de  $I$  pour toutes les valeurs de  $\xi$ . Contrairement à l'allongement et à l'endommagement, pour chaque valeur de  $\xi$ , il y a une limite inférieure de  $I$  en dessous de laquelle aucune érosion ne se produit. Cette limite inférieure augmente avec  $\xi$ .

Afin de superposer tous les résultats sur une courbe maîtresse, le taux d'évolution de chaque mécanisme peut être décrit par une fonction maîtresse d'une variable d'échelle combinant  $I$  et  $\xi$ . Ces derniers sont les nombres sans dimension, mais  $K_g$ ,  $K_e$  et  $K_b$  ont la dimension de l'inverse du temps. Nous utilisons donc le temps de cisaillement  $t_i = \dot{\gamma}^{-1}$  pour adimensionner ces taux :  $K_g t_i$ ,  $K_b t_i$  et  $K_e t_i$ . On peut prendre un paramètre général de mise à l'échelle  $I^\alpha \xi^\beta$  et rechercher les valeurs des exposants  $\alpha$  et  $\beta$ . Si les résultats se superposent sur une seule courbe pour une certaine valeur de ces exposants, ils se superposent alors pour toute puissance de  $I^\alpha \xi^\beta$ , ce qui signifie que seul le ratio  $\alpha/\beta$  est pertinent. Par conséquent, on définit la valeur de  $\beta$  et on détermine  $\alpha$  pour chaque taux noté par un indice ( $g$  pour l'allongement,  $b$  pour l'endommagement et  $e$  pour l'érosion). Les figures 3.9(d,e,f) montrent ces courbes de mise à l'échelles en échelles linéaire et log-log. Pour l'allongement et l'endommagement, nous fixons  $\beta_g = \beta_b = 1$ . Dans la limite de notre précision statistique, on obtient  $\alpha_g = \alpha_b \simeq 1$  avec une bonne approximation. Cela signifie

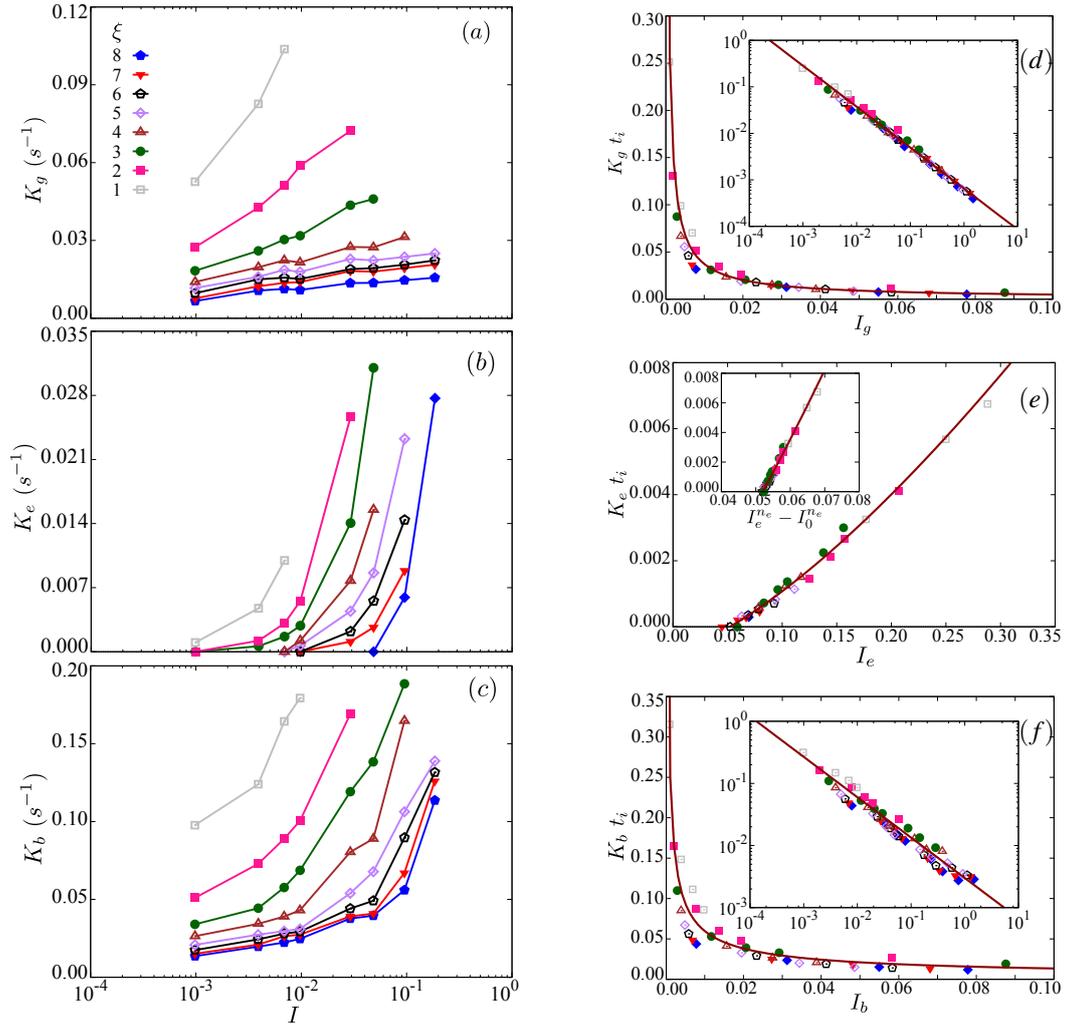


FIGURE 3.9 – Taux d’allongement  $K_g$  (a), d’érosion  $K_e$  (b) et de l’endommagement  $K_b$  (c) de l’agglomérat humide en fonction du nombre inertiel  $I$  pour différentes valeurs de l’indice de cohésion  $\xi$ ; (d) Le taux d’allongement  $K_g t_i$  en fonction du paramètre d’échelle  $I_g = I\xi$ ; (e) Le taux d’érosion  $K_e t_i$  en fonction du paramètre d’échelle  $I_e = I^{1/4}\xi^{-1}$ , et (f) Le taux d’endommagement  $K_b t_i$  en fonction du paramètre d’échelle  $I_b = I\xi$  pour toutes nos simulations. Les lignes solides sont les fonctions d’ajustement présentées dans les équations (3.7), (3.10) et (3.8).

que les paramètres d’échelle pour l’allongement et l’endommagement sont :

$$I_g = I_b \simeq \xi I, \quad (3.6)$$

et les relations d’ajustement sont :

$$K_g t_i = A_g I_g^{n_g}, \quad (3.7)$$

avec  $A_g \simeq 6,5 \times 10^{-4}$  et  $n_g \simeq -0,88$ , et

$$K_b t_i = A_b I_b^{n_b}, \quad (3.8)$$

avec  $A_b \simeq 3,0 \times 10^{-3}$  et  $n_b \simeq -0,65$ . Pour le paramètre d’échelle de l’érosion, on pose  $\beta_e = -1$ , et les résultats se superposent pour  $\alpha_e \simeq 1/4$  :

$$I_e \simeq I^{\alpha_e} \xi^{\beta_e}, \quad (3.9)$$

et comme on peut voir sur la figure 3.9(e), la courbe peut être ajustée par une loi de puissance tronquée :

$$K_e t_i = A_e (I_e^{n_e} - I_0^{n_e}), \quad (3.10)$$

avec  $A_e \simeq 4,5 \times 10^{-2}$ ,  $I_0 \simeq 5,2 \times 10^{-2}$ , et  $n_e \simeq 1,4$ . Le seuil de coupure  $I_0$  est la valeur de  $I_e$  en dessous de laquelle aucune érosion ne se produit.

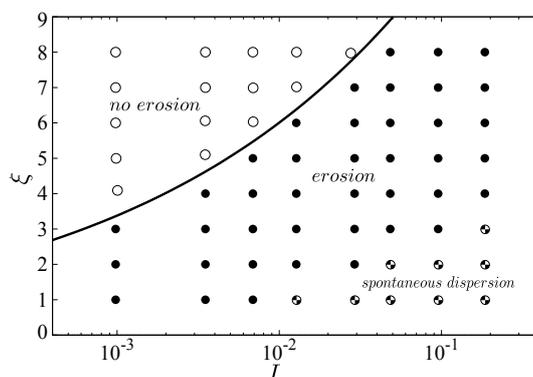


FIGURE 3.10 – Diagramme de phase des états d'érosion dans l'espace de phase  $(I, \xi)$ . Les symboles remplis et vides représentent les états d'érosion et de disparition de l'agglomérat, respectivement, pour toutes les valeurs simulées de  $I$  et  $\xi$  avec une frontière de la loi de puissance  $\xi = I^{1/4}/I_0$ . Les symboles à moitié remplis correspondent aux simulations où l'agglomérat se désagrège spontanément; c'est-à-dire, sur un pas de temps.

Ces résultats ont permis de proposer un diagramme de phases dans l'espace paramétrique (le nombre inertiel  $I$  - l'indice de cohésion  $\xi$ ); voir la figure 3.10. On voit que même pour de grandes valeurs de l'indice de cohésion, le granule peut être érodé si le nombre inertiel est suffisamment élevé. Cela montre que le détachement des particules humides du granule est fortement dépendant des fluctuations de forces et accentué par l'inertie des particules. On observe également que l'allongement pur du granule ne se produit que dans le régime à faible inertie. Cependant, au cours de cet allongement, le granule est progressivement endommagé par la perte irréversible de contacts cohésifs. Par ailleurs, la fonction  $\xi = I^{\alpha_e}/I_0$  définit la limite entre les états d'érosion (en dessous de la courbe) et la disparition de l'érosion (au-dessus de la courbe).

En conclusion, les taux d'allongement, d'endommagement ou d'érosion ne sont pas de fonctions simple d'un paramètre d'échelle combinant le nombre inertiel et l'indice de cohésion. En effet, le nombre inertiel décrit l'écoulement de particules non-cohésives, et non l'inertie à l'intérieur du granule. Par conséquent, les effets inertiels sont surtout pertinents pour caractériser le niveau d'érosion plutôt que pour l'allongement et l'endommagement. Finalement, on notera que l'image générale que l'on a pu se faire de la « simplicité » des écoulements granulaire humides - en ce sens qu'un seul paramètre d'échelle tient compte des effets de toutes les interactions - doit être nuancée. En effet, cette image ne s'applique pas facilement à l'agglomération de particules qui est un processus non-homogène impliquant à la fois des interactions entre particules cohésives et non cohésives. Dans de telles conditions, la représentation en diagramme de phase se révèle être un outil précieux pour classer les différents comportements en lien avec les paramètres tels que le nombre inertiel et l'indice de cohésion.

### 3.2.3 Résistance d'agglomérats granulaires humides

Dans [12, Art], la cohésion des agglomérats a été étudiée en réalisant des essais de compression diamétrale sur des granules sphériques pour une large gamme de valeurs de la taille de particules ( $\alpha = d_{\max}/d_{\min}$ ) et de distance de décollement ( $d_{\text{rupt}}$ ) (liée à la quantité de liquide); voir la figure 3.11. La figure 3.12 montre que la courbe contrainte-déformation présente un plateau plastique avant apparition de la rupture. Nous avons montré que la résistance plastique  $\sigma_p$  est proportionnelle à une contrainte capillaire caractéristique

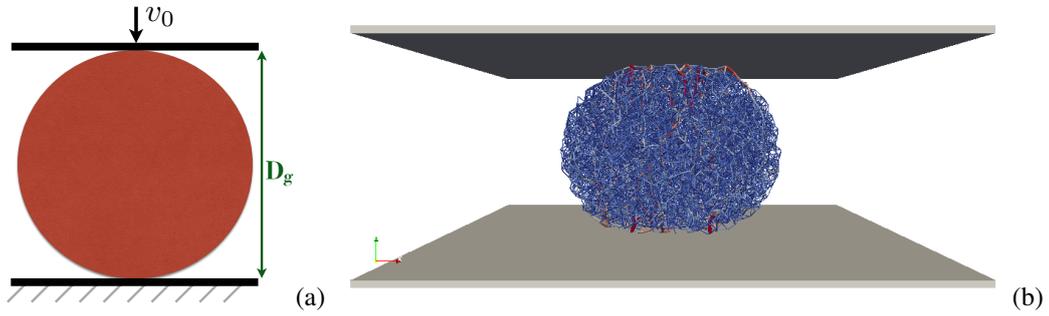


FIGURE 3.11 – (a) Représentation schématique de l’essai de compression diamétrale des granules composés de 5 000 particules sphériques primaires ( $\alpha = 1, 2$  et  $5$ ). Instantané d’un granule sous compression diamétrale pour  $\alpha = 1$ . Les lignes sont des chaînes de force reliant les centres de particules.

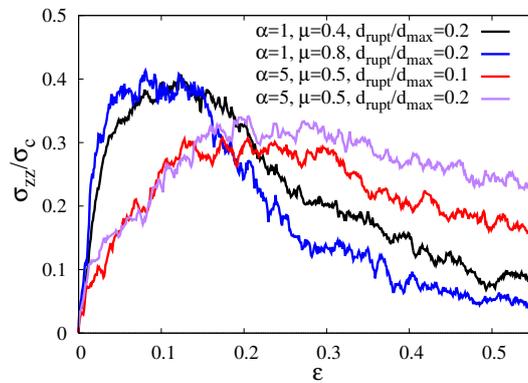


FIGURE 3.12 – Résistance verticale  $\sigma_{zz}$  normalisée par la contrainte de référence  $\sigma_c$  en fonction de la contrainte verticale cumulative  $\epsilon$  pour différentes valeurs du coefficient de frottement  $\mu$ , du rapport de taille  $\alpha$  et de la distance de décollement  $d_{rupt}$ .

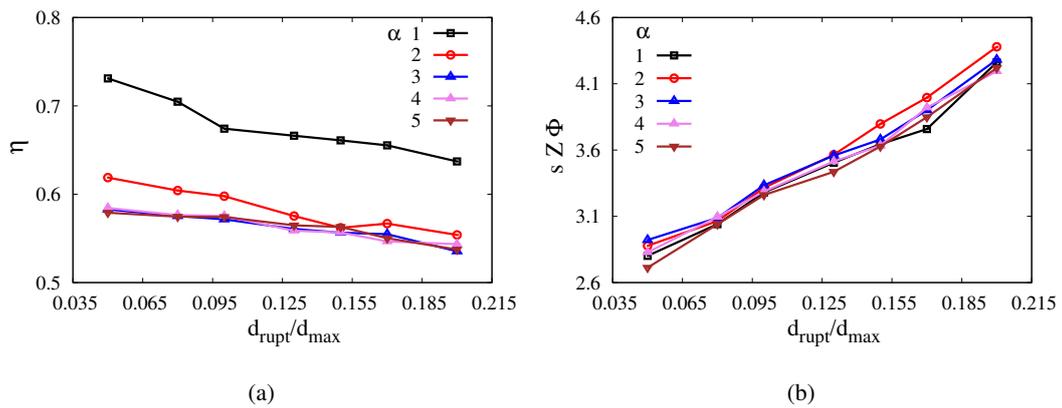


FIGURE 3.13 – Pré-facteur  $\eta$  (a) et  $sZ\Phi$  (b) dans l’équation (3.11) en fonction de la distance de décollement  $d_{rupt}$  pour différentes valeurs  $\alpha$ .

$\sigma_c$ , à un pré-facteur  $\eta$ , à la compacité, au nombre de coordination humide, à la polydispersité des particules

s et à la distance de décollement :

$$\sigma_p = \eta \frac{sZ\Phi}{2\pi} \sigma_c, \quad (3.11)$$

avec

$$s = \frac{\langle d^{1/2} \rangle \langle d \rangle \langle d^{3/2} \rangle}{\langle d^3 \rangle}. \quad (3.12)$$

Notons que  $\eta$  est quasi-indépendant du frottement inter-particulaire, mais dépend linéairement de la distance de décollement, et augmente avec le rapport taille ; voir la figure 3.13(a). Avec ce pré-facteur, l'équation (3.11) prédit que la dépendance de la résistance plastique normalisée  $\sigma_p/\sigma_c$  à  $\alpha$  et  $d_{\text{rupt}}$  est arbitrée par celle de  $sZ\Phi$ . La figure 3.13(b) montre  $sZ\Phi$  en fonction de  $d_{\text{rupt}}/d_{\text{max}}$  pour différentes valeurs de  $\alpha$ . Il est intéressant de noter que  $sZ\Phi$  est quasi-indépendant de  $\alpha$  et une fonction presque linéaire de  $d_{\text{rupt}}/d_{\text{max}}$ .

Ce "granule modèle" peut être considéré comme un système de référence permettant une comparaison directe sur la base des principaux paramètres physiques influant dans les expériences de granulation. C'est le cas notamment pour les produits issus de granulateurs à tambour à particules fines comme les granules de minerai de fer marquées par une structure complexe (essentiellement imputable à une large distribution granulométrique de leurs particules primaires). Même dans ce cas, la résistance calculée grâce aux granules modèles est en bon accord avec les tendances observées moyennant un pré-facteur que nous avons estimé à partir des données numériques [12, Art].

# Conclusions

L'objet de ce document scientifique a été de présenter un bilan de mes travaux de recherche qui portent sur l'étude des matériaux particulaires complexes. Ces travaux sont basés sur des méthodes numériques et des outils de modélisation développés pour l'étude de la rhéologie et de la texture de ces matériaux en prenant en compte la déformation réelle des particules et leurs interactions.

Les matériaux à particules molles sont très répandus. On peut citer par exemple les pâtes colloïdales, vésicules, tissus biologiques, microgels, suspensions ainsi que de nombreuses poudres. La diversité de ces matériaux et leur nombreuses utilisations technologiques les rend incontournables dans de nombreux domaines scientifiques et industriels. Du point de vue de leur microstructure, ces matériaux sont composés d'un réseau désordonné de particules discrètes, qui peuvent subir de larges déformations mécaniques (élastique ou inélastique). L'interaction entre le désordre, qui régit également les propriétés structurales des matériaux à particules dures, et les grandes déformations des particules molles conduit à de nouvelles propriétés physiques et mécaniques qui sont hors de portée des modèles classiques de particules dures. La grande déformabilité des particules molles sous une faible pression de confinement permet d'atteindre par changement de forme des particules des compacités au-delà de celle d'un assemblage de particules dures. Les matériaux à particules hautement déformables diffèrent des matériaux à particules dures dont le comportement plastique résulte principalement des réarrangements et des glissements et dont la compacité ne peut pas dépasser celle du Random Close Packing (RCP). Les particules molles peuvent atteindre un taux de remplissage plus élevé par changement de forme des particules ainsi que par écoulement plastique.

Afin de modéliser des systèmes à particules déformables, des méthodologies fondées sur la méthode des éléments discrets (DEM) dans laquelle les éléments (particules) sont modélisés par la méthode des points matériels (MPM) ou la méthode des éléments finis (FEM) ont été proposées. Une autre approche, appelée méthode de particules liées (BPM), a également été développée. Dans cette approche, chaque particule déformable est représentée comme un agrégat de particules primaires rigides. Ces dernières interagissent par des forces d'attraction de type Lennard-Jones et par des contacts inélastiques non-frottants. Même en l'absence de frottement entre particules primaires, les particules molles se caractérisent par un comportement élasto-plastique avec une contrainte seuil plastique égale à une contrainte caractéristique.

Ces méthodologies numériques ont été utilisées pour étudier les propriétés de compaction et de cisaillement d'assemblages de particules molles en considérant différentes lois de comportement pour les particules (élastique ou plastique). Nos résultats ont permis de mettre en évidence le caractère non-linéaire de la compressibilité lorsque la compacité augmente progressivement au-delà de celles des assemblages de particules dures. Sous cisaillement, un état critique est atteint avec une dilataance contrôlée par la pression de confinement. Une modélisation expérimentale des matériaux à particules molles a été également effectuée. Pour cela, une méthode de mesure adaptée à ces matériaux en 2D a été développée. Un accord quantitatif entre cette technique et la méthode FEM a été montré, qui permet de valider à la fois la méthode expérimentale pour l'étude de milieux granulaires à particules déformables, et d'autre part l'approche numérique.

Un autre volet de mes travaux a concerné la rhéologie et le processus d'agglomération de matériaux granulaires humides. Pour cela, des simulations numériques 3D ont été réalisées sur la base de la modélisation discrète avec des interactions cohésives et visqueuses. Les simulations d'écoulements en cisaillement ont montré que les variables caractérisant le comportement (coefficient de frottement effectif et compacité) ainsi que celles décrivant la texture (nombre de coordination et anisotropie) peuvent être décrites comme fonction d'un nombre sans dimension, incorporant les forces inertielles, cohésives et visqueuses. L'évolution d'un agglomérat à l'intérieur d'un écoulement de particules sèches cisillées ainsi que dans un tambour

tournant contenant des particules humides a été analysée. La dépendance de la dynamique d'accrétion et d'érosion de l'agrégat aux interactions cohésives a été observée. On a présenté des diagrammes de phase en termes de croissance, de déformation, d'endommagement et d'érosion en fonction de l'indice de cohésion et du nombre inertiel. Enfin, on a montré que la résistance des agglomérats sous compression diamétrale est proportionnelle à la force d'adhésion entre particules avec un pré-facteur qui dépend de la connectivité des particules primaire.

# Projet de recherche

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ouvrent la voie à de nombreux développements. Certains constituent une poursuite directe des travaux en cours. D'autres définissent des perspectives à plus ou moins long terme. Quelques perspectives, qui me semblent d'un intérêt particulier, sont présentées ici.

## Particules molles

Les particules molles ont été et restent un thème majeur de mes travaux de recherche. Dans ce cadre, j'ai déposé plusieurs projets de recherche (plusieurs ANR JCJC, Agropolis fondation...). Récemment, j'ai déposé un projet ANR JCJC et un projet local MUSE (*Montpellier Université d'Excellence*) actuellement en deuxième phase d'évaluation. Dans le cadre de ces deux projets, je souhaite également développer plus loin notre collaboration avec l'Université de Leeds. De plus, j'ai initié une collaboration avec la faculté de Pharmacie de l'UM sur la problématique de la compaction des poudres dans le cadre du projet MUSE. Dans la suite, quelques pistes d'études sont proposées.

### *Methodologie*

Nous avons montré tout le potentiel de l'approche MPM-CD pour simuler le comportement des matériaux à particules molles. Les études effectuées restent toutefois limitées au cas bidimensionnel et aux interactions de contact frottant sans cohésion. Or, les mécanismes locaux d'enchevêtrement, d'imbrication, de changement de forme, ont une expression spécifique en 3D qui n'apparaît pas dans une géométrie bidimensionnelle. Cette modélisation 3D nécessite de repenser l'approche déjà développée. En effet, le coût en termes de temps de calcul et d'espace de stockage est beaucoup plus important qu'en 2D, ce qui a un impact considérable sur la taille des systèmes à simuler. A court terme, il est illusoire de vouloir simuler le comportement de grands systèmes pour lesquels les effets de paroi sont négligeables. Pour surmonter ce problème, il est nécessaire de développer des conditions aux limites périodiques dans les 3 directions de l'espace avec la possibilité de changements de volume pour tenir compte du comportement d'expansion ou de contraction des systèmes de particules molles. Son principe consiste à appliquer une déformation ou contrainte homogène (champ affine) à l'assemblage des particules en annulant la valeur moyenne des champs non affines (fluctuations). Une parallélisation efficace de notre approche permettra également de réduire de façon significative le temps de calcul. Notons que l'approche MPM-CD a déjà été parallélisée [11, Art], mais une optimisation reste nécessaire.

Nous avons observé une convergence rapide de la formulation implicite de la MPM dans les travaux précédents (voir le chapitre 1). Afin d'améliorer et d'optimiser l'approche MPM-CD, une résolution explicite de la MPM [11] sera adoptée, ce qui permet de réduire le coût de calcul (en particulier la mémoire de calcul). Cependant, une résolution implicite de contact basée sur la méthode CD sera considérée pour chaque étape explicite de la MPM. Ce nouvel algorithme de contact traitera les interactions entre particules à l'échelle des points matériels, contrairement à l'algorithme de contact développé dans les travaux précédents. Ainsi, il pourra modéliser efficacement les contacts frottant-cohésifs. En outre, le nouvel algorithme de contact permet de calculer plus précisément les forces de contact (forces normales, de frottement et cohésives) et la surface de contact, et de définir différentes interactions de frottement et de cohésion à courte ou longue distance (van der Waals, capillaire ou électrostatique) entre points matériels en contact. Un avantage majeur de l'approche MPM-CD est que les interactions entre particules sont indépendantes de leurs formes. Pour cette raison, l'utilisation d'une forme de particule arbitraire ne représente pas un coût de

calcul supplémentaire. La stratégie développée peut être enrichie en le couplant avec la méthode CD pour les particules rigides et la méthode BCM [85] pour les particules fragiles. Cela permettra de modéliser des mélanges de particules dures, fragiles et molles dans un cadre unifié.

### **Compaction**

Cette méthodologie pourra être appliquée aux différentes problématiques liées aux matériaux particuliers. Dans ce contexte, la compaction des matériaux particuliers est l'un des procédés industriels les plus importants [116]. Elle est utilisée pour fabriquer des composants de forme nette ou quasi-nette à géométrie complexe et à haute tolérance, pour une large gamme d'applications, telles que les comprimés pharmaceutiques, la métallurgie des poudres, les barres et les pastilles nucléaires, les composants céramiques, etc. Ces composants peuvent être fabriqués avec peu ou pas d'usinage et différents matériaux peuvent être mélangés pour obtenir les propriétés voulues du matériau, qui peuvent être difficiles à obtenir par d'autres moyens. En effet, le procédé de compaction transforme un matériau particulaire lâche en un produit compacté d'une densité plus élevée.

Au début de la compaction, les particules se déplacent et une déformation localisée se produit aux points de contact entre les particules. Ce réarrangement produit une déformation globale de l'assemblage et réduit considérablement la porosité bien que l'assemblage soit encore lâche. A mesure que la pression appliquée de compaction augmente, les particules qui sont coincées commencent à subir une déformation plastique si elles sont ductiles, ou à se fragmenter si elles sont fragiles. La déformation plastique permet d'augmenter le nombre de contacts et les surfaces de contact entre les particules et donc, de remplir les porosités inter-particulaires. Ainsi, le matériau compacté peut théoriquement atteindre une compacité voisine de 1. De même, la fragmentation conduit à une nouvelle phase de réarrangement et donc, à l'augmentation de la compacité. Notons que, pendant la compaction, la cohésion et le frottement entre les particules, et entre les particules et la paroi de la matrice jouent également un rôle clé dans les variations locales de densité du comprimé.

Lors de la décompaction (l'éjection dans le procédé de compaction), l'énergie emmagasinée est libérée, ce qui conduit à une déformation élastique du composant. Il est donc essentiel que les particules se déforment plastiquement ou se fragmentent pour réduire les contraintes élastiques stockées, qui agissent pour affaiblir la résistance du comprimé lors du déchargement. Le comprimé peut également être soumis à des contraintes de traction provenant de la matrice. En effet, de fortes contraintes de traction peuvent évoluer lors de l'éjection, ce qui peut entraîner une altération du composant ou des propriétés indésirables.

Il est évident que les propriétés du composant final produit par le procédé de compaction dépendent fortement des comportements individuels des particules. En effet, la variation des propriétés et du comportement des particules conduit à des propriétés rhéologiques et microstructurelles complexes, qui ont été peu explorées en raison du manque d'outils numériques et expérimentaux appropriés. Dans ce cadre, notre méthodologie numérique permettra d'étudier la relation entre le comportement mécanique macroscopique et les caractéristiques physiques des matériaux particuliers soumis au chargement et au déchargement par compaction.

### **Écoulement**

Une autre problématique importante est l'écoulement des matériaux granulaires. En effet, une prédiction réaliste de leur écoulement est une étape essentielle au développement et à l'optimisation des processus industriels afin de maîtriser les aléas et les risques, et de limiter les énergies consommées en production ou de répondre aux exigences de plus en plus contraignantes d'éco-conception. La plupart des recherches passées sur les systèmes divisés se sont concentrées sur les particules dures ou rigide-fragiles [33, 86], et les matériaux à particules molles, malgré leur importance dans divers domaines et applications, ont reçu peu d'attention. L'approche MPM-CD permettra donc une modélisation réaliste de l'écoulement des particules molles et de leurs assemblages en tenant compte du changement de forme des particules.

Une question clé dans ce contexte est de comprendre l'influence de la pression de confinement sur la relation contrainte-déformation, la dilatation et l'état critique de cisaillement. Comme le montre la thèse de *Thanh Hai Nguyen*, puisque la déformabilité et le changement de forme des particules dépendent de leur contrainte caractéristique – *c'est-à-dire*, de leur comportement matériel –, la résistance au cisaillement ne s'adapte pas à la pression de confinement et il n'est donc pas possible de caractériser l'état critique de cisaillement par un simple coefficient de frottement interne comme dans les assemblages de particules dures.

L'état de cisaillement peut en outre être caractérisé en appliquant des chemins de déformation complexes (cisaillement cyclique...), ce qui dans le cas des particules plastiques peut révéler le rôle du changement de forme des particules sur l'hystérésis de cisaillement.

## Milieux granulaires cohésifs

Le sable humide, la neige ou le café moulu sont des exemples de milieux granulaires, constitués de particules cohésives liées par différentes forces. Des ponts capillaires peuvent se former en utilisant la tension de surface de l'eau contenue dans les matériaux, ce qui fait qu'un château de sable doit être mouillé pour ne pas s'effondrer, mais on retrouve également des forces de van der Waals ou électrostatiques, issues d'interactions de surface, ainsi que des forces de frottement et de cisaillement. Le détail de leur rôle est mal connu, ce qui complique la modélisation et la compréhension de la rhéologie des milieux granulaires.

Dans ce cadre, un paramètre important est la taille des particules dans un milieu granulaire. Par exemple, pour une poudre fine sèche, les forces de van der Waals et électrostatiques entre particules peuvent dépasser le poids des particules de plusieurs ordres de grandeur. En présence d'humidité, les forces capillaires et visqueuses peuvent également s'ajouter à ces forces. Nous avons déjà montré que pour un milieu granulaire humide dominé par les forces capillaires et visqueuses, un nombre visco-cohésif peut rendre compte des propriétés des écoulements. Lorsque les forces liées à la cohésion et à la viscosité s'annulent, on retrouve le nombre inertiel, déjà utilisé pour les écoulements de matériaux granulaires non cohésifs. Le nombre visco-cohésif est ainsi une généralisation de ce nombre inertiel, unifiant ainsi les modèles de matériaux granulaires humides et secs pour décrire leur comportement dans un même cadre [2, Art]. Il est donc intéressant de proposer un nouveau paramètre d'échelle unique pour l'écoulement des poudres fines en prenant en compte également les forces de van der Waals et électrostatiques.

Un autre sujet de recherche dans le cadre des milieux granulaires cohésifs est de simuler le comportement des matériaux granulaires dans des situations où l'auto-gravité doit être prise en compte. La connaissance des propriétés physique des petits corps du système solaire, tels que les astéroïdes ou les comètes, est essentielle notamment dans le cadre de l'étude de la formation et de l'évolution du système solaire, car ces derniers sont des reliquats de son époque primordiale. Cependant, la structure interne de ces corps demeure très mal connue. Une grande partie d'entre eux se présenterait sous la forme d'agrégats gravitationnels de matière sans cohésion interne, poreux, capable d'endurer des déformations plastiques [102, 43]. La modélisation discrète peut donc être adoptée aux agrégats gravitationnels. On a commencé une étude préliminaire dans le cadre du stage de *Pierre-Eloi Nielen* [M25] et les résultats sont encourageants (voir la figure 1). Les études plus approfondies sont nécessaires en considérant un grand nombre de particules de taille différente et de forme variée.

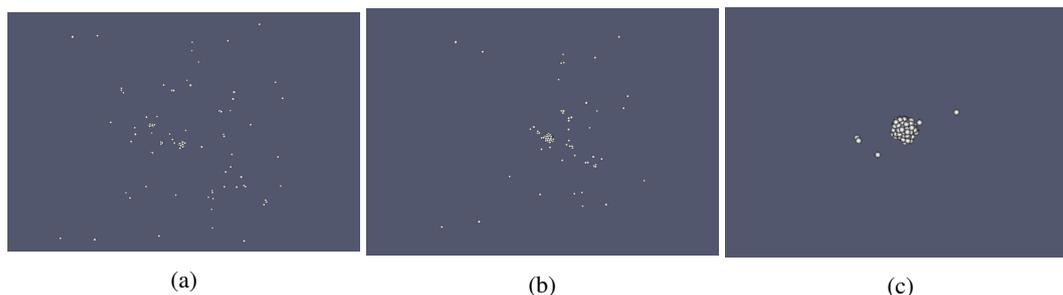


FIGURE 1 – Des étapes de l'effondrement du nuage de particules, avec d'abord la formation de petits agglomérats (a), puis la formation de ce qui va devenir le corps final (b) et qui attire vers lui ce qu'il reste de particules. À la fin, certaines particules sont satellisées ou éjectées (c).

Enfin, la modélisation des argiles est également un sujet émergent dans notre équipe PMMD. Les argiles ont été modélisées en utilisant la méthode de Dynamiques Moléculaires et en représentant des interactions entre particules d'argiles par le potentiel de Lennard-Jones [46]. Ce potentiel est complété par le potentiel répulsif de Coulomb. Cette problématique était déjà abordée dans un projet ERC (SOMEF) dans notre

équipe et j'ai pu participer à l'encadrement d'un post-doctorant (*Komlanvi Lampoh*) sur ce sujet. Notons que la méthode utilisée est proche de l'approche BPM (Thèse de *Thanh Hai Nguyen*). Nous nous sommes intéressés à la compaction et l'écoulement, et l'évolution de la microstructure. Ces simulations ont été effectuées en 2D. Récemment, dans le cadre de notre collaboration avec l'INRAE, on s'est intéressé à la modélisation 3D des argiles et les travaux sont en cours (Figure 2).

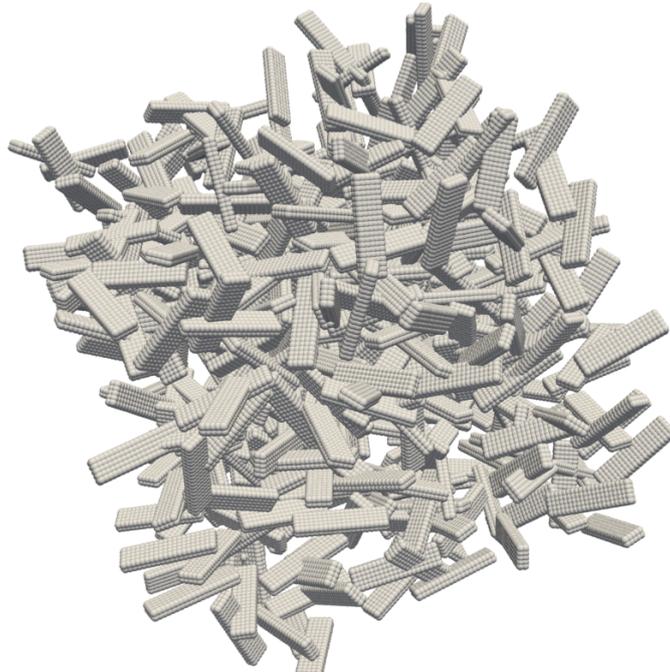


FIGURE 2 – Modèle 3D des plaques d'argile sous développement.

## Milieus cellulaires

Les milieux cellulaires sont des milieux biphasés composés d'une phase solide et d'une phase liquide ou gazeuse. Dans ces milieux, les propriétés mécaniques dépendent de la composition des parois cellulaires et de la microstructure à l'échelle de la cellule. Divers matériaux cellulaires sont rencontrés dans les tissus végétaux ou animaux [35, 26], mais aussi dans les processus industriels comme les solides cellulaires [36], les mousses métalliques [10, 110] ou les matériaux cellulaires architecturés [114]... Dans le cas du bois, par exemple, les cellules sont vides (lumen) et peuvent jouer un rôle dans le déclenchement de la rupture (Figure 3). Les matériaux cellulaires n'ont pas de matrice homogène bien définie et leurs propriétés mécaniques ne peuvent pas être entièrement comprises à partir des champs de contrainte locaux induits par les pores [59]. Elles dépendent plutôt du désordre géométrique (distribution de la taille et de la forme des constituants) et du désordre topologique (connectivité et interactions des constituants) de la microstructure. Ces propriétés de texture locale contrôlent la capacité de résistance aux contraintes, les modules d'élasticité et le comportement à la rupture de ces matériaux. De plus, les matériaux cellulaires peuvent s'effondrer ou subir des instabilités de flambage, et leur ténacité s'échelonne comme une loi de puissance avec l'épaisseur des parois cellulaires.

L'importance de ces matériaux m'a amené à initier l'axe transversal *Modélisation des Milieux Cellulaires* (M2Cell) avec l'objectif de fournir un cadre d'échanges et de collaborations au LMGC autour de la modélisation mécanique des milieux cellulaires à différentes échelles. Les milieux tels que les mousses solides ou liquides et tissus biologiques intéressent plusieurs équipes du laboratoire et demandent des modélisations nouvelles. Dans ce cadre, je me suis intéressé à deux problématiques biologiques. La première concerne la croissance (et la dégradation), l'organisation et les réarrangements des cellules et tissus épithé-

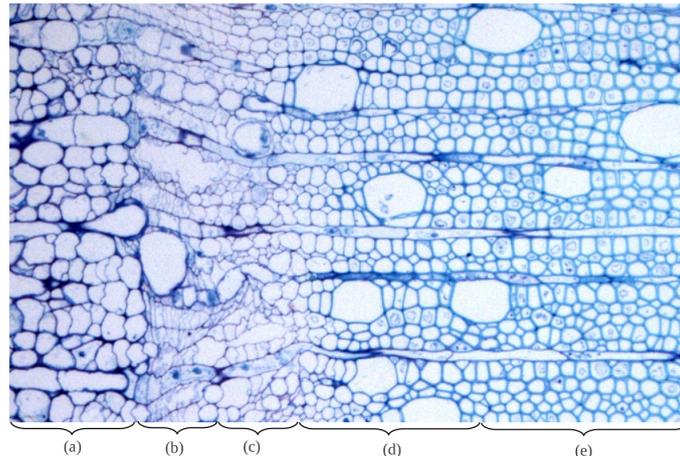


FIGURE 3 – Coupe transverse montrant de bois en formation (b-e) confiné par l'écorce (a) : (b) division cellulaire, (c) grossissement cellulaire, (d) rigidification, et (e) bois mature.

liaux, et leur comportement rhéologique. Il s'agit en particulier d'estimer le rôle des contraintes mécaniques extérieures ou issues des interactions entre cellules sur la structuration du cytosquelette et sur la morphogénèse tissulaire. La deuxième problématique est l'étude à la fois du comportement mécanique du bois et la biomécanique de sa formation lors de la croissance de l'arbre, qui se produit par division, croissance et rigidification des cellules en milieu semi-confiné (Figure 3). Pour la modélisation de ces milieux cellulaires, la MPM semble être un outil particulièrement adapté, car elle permet de simuler un gain ou une perte de masse par le retrait ou l'ajout de points matériels, et les processus de rigidification par l'adaptation de la loi de comportement de chaque point matériel. Dans ce cadre, des collaborations ont été initiées principalement avec *J. Averseng* [16, 11, Art] et *T. Alméras* du LMGC et *X. Frank* de l'INRAE [11, Art], et 3 projets ANR et régional ont été déposés. Ces efforts seront poursuivis afin de développer une approche numérique adéquate pour l'étude des milieux cellulaires biologiques. La MPM peut être utilisée de façon générale pour la modélisation des milieux cellulaires en grandes déformations.

Un autre aspect du comportement des milieux cellulaires qui mérite d'être étudié est la résistance et les propriétés de rupture de ces milieux. Cette problématique sera présentée plus bas.

## Rupture des matériaux poreux

Les matériaux poreux sont classiquement décrits comme une matrice homogène comprenant des pores connectés ou déconnectés (ouverts) et associés à des modèles d'homogénéisation essentiellement basés sur l'analyse d'un seul pore ou d'une seule fissure. Cette description ne couvre pas une large classe de matériaux poreux dans lesquels la porosité est une propriété intrinsèque de leur microstructure de base en tant qu'assemblage dense de constituants élémentaires. Ces matériaux poreux structurés comprennent les solides granulaires, fibreux et cellulaires. La compréhension de l'influence de la microstructure à petite échelle sur les propriétés élastiques et la rupture des matériaux poreux structurés présente un intérêt pratique pour de nombreuses applications telles que la rupture du béton, les composites chargés de particules denses, la fracture des roches et la mouture des céréales.

Pour étudier la rupture des matériaux poreux, on s'intéresse à deux approches numériques : la méthode LEM (*Lattice Element Method*) [127] et la méthode peridynamique [7, Art]. Dans la LEM, la discrétisation FEM élémentaire est remplacée par une simple représentation d'un matériau élastique avec des noeuds en treillis interagissant par une énergie potentielle linéaire ou non linéaire. Elle présente l'avantage de permettre l'endommagement et la rupture du matériau d'une manière "naturelle". Dans la méthode peridynamique, comme dans la LEM, le matériau est représenté comme un réseau de noeuds en interaction. Mais, contrairement à la LEM dans laquelle la dynamique est locale et les interactions sont confinées aux premiers voisins, la méthode de peridynamique est basée sur une formulation non locale (intégrale) des

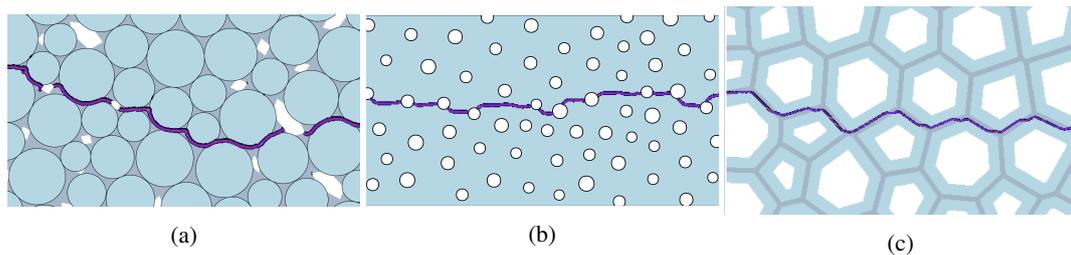


FIGURE 4 – Propagation des fissures sous force de traction dans un matériau granulaire cimenté (a), un matériau poreux (b), et un matériau cellulaire (c). Les simulation sont effectuées en utilisant la méthode de peridynamiques par *X. Frank* (INRAE) [12, 13, Conf].

équations de la dynamique à l’intérieur d’un “horizon” donné. Les événements de rupture des liaisons conduisent à des dommages ou à une rupture lorsqu’un nombre critique de liaisons est endommagé.

Notons que, dans ce cadre, en plus de la collaboration actuelle avec l’INRAE, une collaboration est en train d’être développée avec l’université de Newcastle en encadrant un étudiant de Master, *Jack Collishaw* [M<sub>26</sub>]. La problématique étudiée concerne la rupture dans les géo-matériaux cohésifs en utilisant la méthode LEM. Les résultats numériques obtenus seront comparés avec les résultats des expériences de la compression tri-axiale observés par le micro-tomographie aux rayons X (Figure 5).

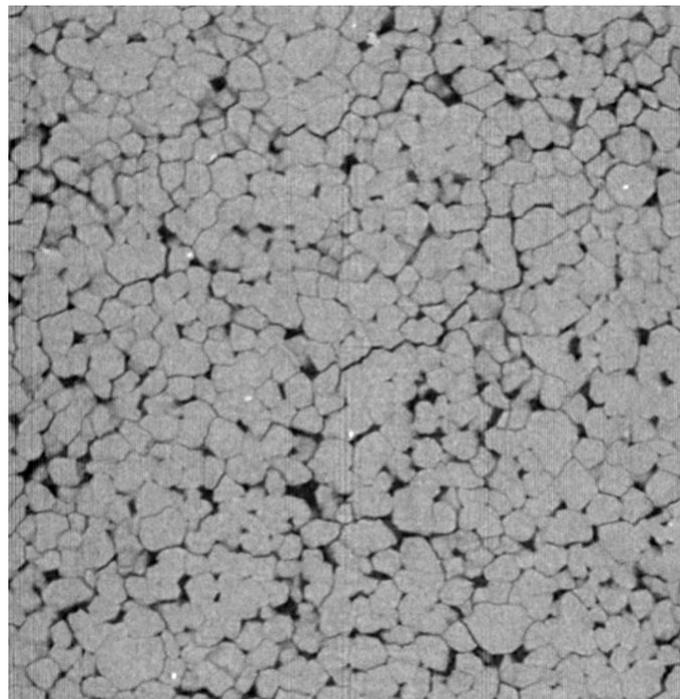


FIGURE 5 – Image topographique d’une couche du géo-matériau étudié.





# Bibliographie

Dans le but de faciliter la distinction entre les travaux personnels et ceux de la littérature et pour permettre une meilleure identification des collaborations, les références issues de la bibliographie sont simplement numérotées, et les références personnelles sont numérotées dans le texte avec un suffixe 'Art' pour les articles 'Ouvr' pour les ouvrages et 'Conf' pour les communication des conférences.

- [1] S. Abe and K. Mair. Effects of gouge fragment shape on fault friction : New 3D modelling results. *Geophysical Research Letters*, 36 :L23302, 2009.
- [2] V. Acary and M. Jean. Numerical simulation of monuments by the contact dynamics method. In DGEMN-LNEC-JRC, editor, *Monument-98, Workshop on Seismic Performance of Monuments*, pages 12–14. LNEC, 1998.
- [3] R. Aguado, S. Roudier, and L. Delagado, editors. *Best available techniques (BAT) reference document for iron and steel production*. Joint Research Centre of the European Commission. Luxembourg : Publications Office of the European Union, 2013.
- [4] B. Alchikh-Sulaiman, M. Alian, F. Ein-Mozaffari, A. Lohi, and S. R. Upreti. Using the discrete element method to assess the mixing of polydisperse solid particles in a rotary drum. *Particuology*, 25 :133 – 142, 2016.
- [5] L. Amarsid, J.-Y. Delenne, P. Mutabaruka, Y. Monerie, F. Perales, and F. Radjai. Viscoinertial regime of immersed granular flows. *Physical Review E*, 96 :012901, 2017.
- [6] ANSYS. *ANSYS theory reference for the mechanical APDL and mechanical applications*. ANSYS Inc., Canonsburg, PA, 12.1 edition, 2009.
- [7] L. P. Argani, D. Misseroni, A. Piccolroaz, Z. Vinco, D. Capuani, and D. Bigoni. Plastically-driven variation of elastic stiffness in green bodies during powder compaction : Part I. Experiments and elastoplastic coupling. *Journal of the European Ceramic Society*, 36 :2159–2167, 2016.
- [8] E. Azéma and F. Radjai. Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Physical Review E*, 81 :051304, 2010.
- [9] E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, and G. Saussine. Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Physical Review E*, 76 :011301, 2007.
- [10] J. Banhart. Manufacture, characterisation and application of cellular metals and metal foams. *Progress in Materials Science*, 46 :559 –632, 2001.
- [11] S.G. Bardenhagen, J.U. Brackbill, and D. Sulsky. The material-point method for granular materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 187 :529–541, 2000.
- [12] S.G. Bardenhagen, J.E. Guilkey, K.M. Roessig, J.U. Brackbill, W.M. Witzel, and 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.
- [13] A. Barkouti, E. Rondet, M. Delalonde, and T. Ruiz. Influence of physicochemical binder properties on agglomeration of wheat powder in couscous grain. *Journal of Food Engineering*, 111 :234–240, 2012.
- [14] N. Berger, E. Azéma, J.-F. Douce, and F. Radjai. Scaling behaviour of cohesive granular flows. *Europhysics Letters*, 112 :64004, 2016.

- [15] R.T. Bonnecaze and M. Cloitre. Micromechanics of soft particle glasses. *Advances in Polymer Science*, 236 :117–161, 2010.
- [16] A.M. Bouwman, M.J. Henstra, D. Westerman, J.T. Chung, Z. Zhang, A. Ingram, J.P.K. Seville, and H.W. Frijlink. The effect of the amount of binder liquid on the granulation mechanisms and structure of microcrystalline cellulose granules prepared by high shear granulation. *International Journal of Pharmaceutics*, 290 :129 – –136, 2005.
- [17] I. Bratberg, F. Radjai, and A. Hansen. Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds. *Physical Review E*, 66 :031303–1, 2002.
- [18] B. Budiansky and N. A. Fleck. Compressive failure of fibre composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41 :183–211, 1993.
- [19] CEGEO, B. Saint-Cyr, K. Szarf, C. Voivret, E. Azéma, V. Richefeu, J.-Y. Delenne, G. Combe, C. Noguier-Lehon, P. Villard, P. Sornay, M. Chaze, and F. Radjai. Particle shape dependence in granular media. *Europhysics Letters*, 98 :44008, 2012.
- [20] Z. Chen, R. Feng, X. Xin, and L. Shen. A computational model for impact failure with shear-induced dilatancy. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56 :1979–1997, 2003.
- [21] S. H. Chien, G. Carmona, L. I. Prochnow, and E. R. Austin. Cadmium availability from granulated and bulk-blended phosphate-potassium fertilizers. *Journal of Environmental Quality*, 32 :1911–1914, 2003.
- [22] M. Cloitre, R. Borrega, F. Monti, and Leibler L. Glassy dynamics and flow properties of soft colloidal pastes. *Physical Review Letters*, 90 :068303, 2003.
- [23] G. Combe and J.-N. Roux. Strain versus stress in a model granular material : A devil’s staircase. *Physical Review Letters*, 85 :3628–3631, 2000.
- [24] S.J. Cummins and J.U. Brackbill. An implicit particle-in-cell method for granular materials. *Journal of Computational Physics*, 180 :506–548, 2002.
- [25] P.A. Cundall and O.D.L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29 :47–65, 1979.
- [26] J. D. Currey. The structure and mechanics of bone. *Journal of Materials Science*, 47 :41–54, 2012.
- [27] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, and F. Chevoir. Rheophysics of dense granular materials : discrete simulation of plane shear flows. *Physical Review E*, 72 :021309, 2005.
- [28] J. Degrève, J. Baeyens, M. Van de Velden, and S. De Laet. Spray-agglomeration of NPK-fertilizer in a rotating drum granulator. *Powder Technology*, 163 :188–195, 2006.
- [29] J.-Y. Delenne, V. Richefeu, and F. Radjai. Liquid clustering and capillary pressure in granular media. *Journal of Fluid Mechanics*, 762 :R5, 2015.
- [30] S. Dippel, G. G. Batrouni, and D. E. Wolf. How transversal fluctuations affect the friction of a particle on a rough incline. *Physical Review E*, 56 :3645–3656, 1997.
- [31] B. J. Ennis, G. Tardos, and R. Pfeffer. A microlevel-based characterization of granulation phenomena. *Powder Technology*, 65 :257–272, 1991.
- [32] G. Gagneux and O. Millet. Analytic calculation of capillary bridge properties deduced as an inverse problem from experimental data. *Transport in Porous Media*, 105 :117–139, 2014.
- [33] GDR-MiDi. On dense granular flows. *European Physical Journal E*, 14 :341–365, 2004.
- [34] D.T Gethin, R.S Ransing, R.W Lewis, M. Dutko, and 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.
- [35] L. J. Gibson. The hierarchical structure and mechanics of plant materials. *Journal of The Royal Society Interface*, 9 :2749–2766, 2012.
- [36] L. J. Gibson and M. F. Ashby. *Cellular solids : structure and properties*. Cambridge university press, 1999.

- [37] Y.J. Guo and J.A. Narin. Three-dimensional dynamic fracture analysis using the material point method. *Computer Modelling in Engineering and Sciences*, 16 :141–156, 2006.
- [38] J. Happel and H. Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Martinus Nijhoff Publishers, The Hague, the Netherlands, 1983.
- [39] A. Hassanpour, S.J. Antony, and M. Ghadiri. Effect of size ratio on the behaviour of agglomerates embedded in a bed of particles subjected to shearing :dem analysis. *Chemical engineering science*, 62 :935–942, 2006.
- [40] A. Hassanpour and M. Ghadiri. Distinct element analysis and experimental evaluation of the heckel analysis of bulk powder compression. *Powder Technology*, 141 :251–261, 2004.
- [41] S. Herminghaus. Dynamics of wet granular matter. *Advances in Physics*, 54 :221–261, 2005.
- [42] H. J. Herrmann, R. Mahmoodi Baram, and M. Wackenhut. Searching for the perfect packing. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 330 :77–82, 2003.
- [43] D. Hestroffer, P. Sánchez, L. Staron, A. Campo Bagatin, S. Eggl, W. Losert, N. Murdoch, E. Opso-mer, F. Radjai, D. C. Richardson, M. Salazar, D. J. Scheeres, S. Schwartz, N. Taberlet, and H. Yano. Small solar system bodies as granular media. *The Astronomy and Astrophysics Review*, 27 :6, 2019.
- [44] P. Huang, X. Zhang, S. Ma, and 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.
- [45] K. Ioannidou, R. Pellenq, and E. Del Gado. Controlling local packing and growth in calcium–silicate–hydrate gels. *Soft Matter*, 10 :1121–1133, 2014.
- [46] J.N. Israelachvili. *Intermolecular and surface forces*. Academic Press, London, 1993.
- [47] S. M. Iveson, J. D. Litster, K. Hapgood, and B. J. Ennis. Nucleation, growth and breakage phenomena in agitated wet granulation processes : a review. *Powder Technology*, 117 :3–39, 2001.
- [48] H. M. Jaeger, S.R. Nagel, and R.P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68 :1259, 1996.
- [49] M. Jean. Unilateral contact and dry friction : time and space variables discretization. *Archives of Mechanics, Warszawa*, 40 :677–691, 1988.
- [50] M. Jean. *Frictional contact in rigid or deformable bodies : numerical simulation of geomaterials*, pages 463–486. Elsevier Science Publisher, Amsterdam, 1995.
- [51] M. Jean. The non smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanic and Engineering*, 177 :235–257, 1999.
- [52] M. Jean, F. Jourdan, and B. Tathi. Numerical dynamics for the simulation of deep drawing. In *The International Deep Drawing Research Group (IDDRG 1994)*. Handbooks on Theory and Engineering Applications of Computational Methods, 1994.
- [53] M. Jean and J. J. Moreau. Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In *Contact Mechanics International Symposium*, pages 31–48, Lausanne, Switzerland, 1992.
- [54] M. Jean and E. Pratt. A system of rigid bodies with dry friction. *International Journal of Engineering Science*, pages 497–513, 1985.
- [55] S. Khamseh, J.-N. Roux, and F. Chevoir. Flow of wet granular materials : A numerical study. *Physical Review E*, 92 :022201, 2015.
- [56] J. Kováčik. Correlation between Young’s modulus and porosity in porous materials. *Journal of Materials Science Letters*, 8 :1007–1010, 1999.
- [57] J. Kováčik. Correlation between shear modulus and porosity in porous materials. *Journal of Materials Science Letters*, 20 :1953–1955, 2001.
- [58] J.W. Landry, G.S. Grest, L.E. Silbert, and S.J. Plimpton. Confined granular packings : structure, stress, and forces. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 67 :041303, 2003.

- [59] H. Laubie, F. Radjai, R. Pellenq, and F.-J. Ulm. Stress transmission and failure in disordered porous media. *Physical Review Letters*, 119 :075501, 2017.
- [60] G. Lefebvre and P. Jop. Erosion dynamics of a wet granular medium. *Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 8 :032205, 2013.
- [61] G. Lian and J. Seville. The capillary bridge between two spheres : New closed-form equations in a two century old problem. *Advances in Colloid and Interface Science*, 227 :53–62, 2016.
- [62] G. Lian, C. Thornton, and M. Adams. A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies. *Journal of Colloid and Interface Science*, 161 :138–147, 1993.
- [63] C.C. Liao, S.S. Hsiau, and S.F. Wen. Effect of adding a small amount of liquid on density-induced wet granular segregation in a rotating drum. *Advanced Powder Technology*, 27 :1265 – 1271, 2016.
- [64] J. Litster and B. Ennis. *The Science and Engineering of Granulation Processes*, volume 15. Springer Netherlands, 2014.
- [65] LMGC90. *Lmgc90*. <https://git-xen.lmgc.univ-montp2.fr/lmgc90/lmgc90-user/wikis/home>, 2018.
- [66] S. Luding. Collisions and contacts between two particles. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, page 285, Dordrecht, 1998. Kluwer Academic Publishers.
- [67] G. Ma, W. Zhou, and X.L. Chang. Modeling the particle breakage of rockfill materials with the cohesive crack model. *Computers and Geotechnics*, 61 :132–143, 2014.
- [68] T. S. Majmudar and R. P. Behringer. Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, 435 :7045, 2005.
- [69] T.S. Majmudar, M. Sperl, S. Luding, and R.P. Behringer. Jamming transition in granular systems. *Physical Review Letters*, 98 :058001, 2007.
- [70] S.C. McNamara and H. J. Herrmann. Measurement of indeterminacy in packings of perfectly rigid disks. *Physical Review E*, 70 :061303, 2004.
- [71] P. Menut, S. Seiffert, J. Sprakelae, and D.A. Weitz. Does size matter? elasticity of compressed suspensions of colloidal- and granular-scale microgels. *Soft Matter*, 8 :156–164, 2012.
- [72] T. Mikami, H. Kamiya, and M. Horio. Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 53 :1927–1940, 1998.
- [73] A.A Mirghasemi, L. Rothenburg, and E.L Maryas. Influence of particle shape on engineering properties of assemblies of two-dimensional polygon-shaped particles. *Géotechnique*, 52 :209–217, 2002.
- [74] N. Mitarai and F. Nori. Wet granular materials. *Advances in Physics*, 55 :1–45, 2006.
- [75] J. J. Moreau. Evolution problem associated with a moving convex set in a hilbert space. *Journal of Differential Equations*, 26 :347–374, 1977.
- [76] J. J. Moreau. Liasons unilatérales sans frottement et chocs inélastiques. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 296 :1473–1476, 1983.
- [77] J. J. Moreau. Bounded variation in time. In P.D. Panagiotopoulos and G Strang, editors, *Topics in Nonsmooth Mechanics*, pages 1–74. Birkhäuser, Basel, 1988.
- [78] J. J. Moreau. New computation methods in granular dynamics. In C. Thornton, editor, *Powders & Grains 93*, pages 227–232. August Aimé Balkema, Rotterdam, 1993.
- [79] J. J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. In D. E. Wolf and P. Grassberger, editors, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, pages 233–247. World Scientific, Singapore, 1997.
- [80] J.J. Moreau. *Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics*, volume 302 of *International Centre for Mechanical Sciences, Courses and Lectures*. Springer, Vienna, 1988.
- [81] J.J. Moreau. Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials. *European Journal of Mechanics A - Solids*, 13 :93–114, 1994.

- [82] A. A. Munjiza. *The Combined Finite-Discrete Element Method*. Wiley, Chichester, 2004.
- [83] A.A. Munjiza, D.R.J. Owen, and N. Bicanic. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Engineering Computations*, 12 :145–174, 1995.
- [84] P. Mutabaruka, J.-Y. Delenne, K. Soga, and F. Radjai. Initiation of immersed granular avalanches. *Physical Review E*, 89 :052203, 2014.
- [85] D.-H. Nguyen, E. Azéma, P. Sornay, and F. Radjai. Bonded-cell model for particle fracture. *Physical Review E*, 91 :022203, 2015.
- [86] D.-H. Nguyen, E. Azéma, P. Sornay, and F. Radjai. Rheology of granular materials composed of crushable particles. *European Physical Journal E*, 41 :50, 2015.
- [87] S. Nineb, P. Alart, and D. Dureisseix. Approche multi-échelle des systèmes de tenségrité. *Revue Européenne de Mécanique Numérique*, 15 :319–328, 2006.
- [88] A. Nosrati, J. Addai-Mensah, and D. J. Robinson. Drum agglomeration behavior of nickel laterite ore : Effect of process variables. *Hydrometallurgy*, 125–126 :90–99, 2012.
- [89] C. Nougier-Lehon, B. Cambou, and 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.
- [90] M. Oda and K. Iwashita, editors. *Mechanics of Granular Materials*. A. A. Balkema, Rotterdam, 1999.
- [91] C.S. O’Hern, A.L. Langer, A.J. Liu, and S.R. Nagel. Random packings of frictionless particles. *Physical Review Letters*, 88 :075507, 2002.
- [92] C.S. O’Hern, L.E. Silbert, A.J. Liu, and S.R. Nagel. Jamming at zero temperature and zero applied stress : The epitome of disorder. *Physical Review E*, 68 :011306, 2003.
- [93] J. D. Osborne, R. P. J. Sochon, J. J. Cartwright, D. G. Doughty, M. J. Hounslow, and A. D. Salman. Binder addition methods and binder distribution in high shear and fluidised bed granulation. *Chemical Engineering Research and Design*, 89 :553–559, 2011.
- [94] R. Pashminehazar, A. Kharaghani, and E. Tsotsas. Three dimensional characterization of morphology and internal structure of soft material agglomerates produced in spray fluidized bed by x-ray tomography. *Powder Technology*, 300 :46 – 60, 2016.
- [95] S. K. Pawar, F. Henrikson, G. Finotello, J. T. Padding, N. G. Deen, A. Jongsma, F. Innings, and J.A.M. H. Kuipers. An experimental study of droplet-particle collisions. *Powder Technology*, 300 :157–163, 2016.
- [96] J.-C. Quezada, P. Breul, G. Saussine, and F. Radjai. Stability, deformation, and variability of granular fills composed of polyhedral particles. *Physical Review E*, 86 :031308, 2012.
- [97] F. Radjai, M. Jean, J.J. Moreau, and S. Roux. Force distributions in dense two-dimensional granular systems. *Physical Review Letters*, 77 :274, 1996.
- [98] F. Radjaï and V. Richefeu. Bond anisotropy and cohesion of wet granular materials. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 367 :5123–5138, 2009.
- [99] F. Radjaï and S. Roux. Turbulentlike fluctuations in quasistatic flow of granular media. *Physical Review Letters*, 89 :064302, 2002.
- [100] F. Radjai, V. Topin, V. Richefeu, C. Voivret, J.-Y. Delenne, E. Azéma, and M. S. El Youssoufi. Force transmission in cohesive granular media. In J. D. Goddard, J. T. Jenkins, and P. Giovine, editors, *Mathematical Modeling and Physical Instances of granular Flows*, pages 240–260. AIP, 2010.
- [101] F. Radjai, D. Wolf, M. Jean, and J.J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Physical Review Letters*, 90 :61, 1998.
- [102] D. Richardson, Z. Leinhardt, H. Melosh, W. Bottke, and E. Asphaug. Gravitational ag- gregates : evidence and evolution. *Asteroids III*, 1 :501–515, 2002.
- [103] V. Richefeu, M. S. El Youssoufi, and F. Radjai. Shear strength of unsaturated soils : Experiments, dem simulations, and micromechanical analysis. In *Theoretical and Numerical Unsaturated Soil Mechanics*, pages 83–91. Springer, 2007.

- [104] V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, and F. Radjai. Shear strength properties of wet granular materials. *Physical Review E*, 73 :051304, 2006.
- [105] V. Richefeu, F. Radjai, and M. S. El Youssoufi. Stress transmission in wet granular materials. *European Physical Journal E*, 21 :359–369, 2007.
- [106] P. G. Rognon, J.-N. Roux, D. Wolf, M. Naaim, and F. Chevoir. Rheophysics of cohesive granular materials. *Europhysics Letters*, 74 :644, 2006.
- [107] E. Rondet, M. Delalonde, T. Ruiz, and J.-P. Desfoursb. Fractal formation description of agglomeration in low shear mixer. *Chemical Engineering Journal*, 164 :376–382, 2010.
- [108] B. Saint-Cyr, J.-Y. Delenne, C. Voivret, F. Radjai, and P. Sornay. Rheology of granular materials composed of nonconvex particles. *Physical Review E*, 84 :041302, 2011.
- [109] K. Saleh and P. Guigon. *Handbook of Powder Technology, Granulation*, volume 11, chapter Coating and encapsulation processes in powder technology, pages 323–375. Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [110] A. Salimon, Y. Bréchet, M. F. Ashby, and A. L. Greer. Potential applications for steel and titanium metal foams. *Journal of Materials Science*, 40 :5793–5799, 2005.
- [111] K. V. S. Sastry, P. Dontula, and C. Hosten. Investigation of the layering mechanism of agglomerate growth during drum pelletization. *Powder Technology*, 130 :231–237, 2003.
- [112] N. Sator, S. Mechkov, and F. Sausset. Generic behaviours in impact fragmentation. *Europhysics Letters*, 81 :44,002, 2008.
- [113] G. Saussine, C. Cholet, P.E. Gautier, F. Dubois, C. Bohatier, and 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.
- [114] T. A. Schaedler and W. B. Carter. Architected cellular materials. *Annual Review of Materials Research*, 46 :187–210, 2016.
- [115] J. Schäfer, S. Dippel, and D. E. Wolf. Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de Physique I*, 6 :5–20, 1996.
- [116] L.C.R. Schneider. *Compaction and yield behaviour of particulate materials*. PhD thesis, University of Leicester, UK, 2003.
- [117] I.C. Sinka. Modelling powder compaction. *KONA Powder and Particle Journal*, 25 :4–22, 2007.
- [118] F. Soulié, F. Cherblanc, M.S. El Youssoufi, and C. Saix. Influence of liquid bridges on the mechanical behaviour of polydisperse granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 30 :213–228, 2006.
- [119] F. Štěpánek, P. Rajniak, C. Mancinelli, R.T. Chern, and R. Ramachandran. Distribution and accessibility of binder in wet granules. *Powder Technology*, 189 :376 – 384, 2009.
- [120] D. Sulsky, Z. Chen, and H.L. Schreyer. A particle method for history-dependent materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 118 :179–196, 1994.
- [121] D. Sulsky, S.J. Zhou, and H.L. Schreyer. Application of a particle-in-cell method to solid mechanics. *Computer Physics Communications*, 87 :136–252, 1995.
- [122] P. Suresh, I. Sreedhar, R. Vaidhiswaran, and A. Venugopal. A comprehensive review on process and engineering aspects of pharmaceutical wet granulation. *Chemical Engineering Journal*, 328 :785–815, 2017.
- [123] A. Taboada, K. J. Chang, F. Radjai, and 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.
- [124] H. Tan and J.A. Narin. Hierarchical, adaptive, material point method for dynamic energy release rate calculations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191 :19–20, 2002.
- [125] C. Thornton, M. T. Ciomocos, and M. J. Adams. Numerical simulations of diametrical compression tests on agglomerates. *Powder Technology*, 140 :258–267, 2004.

- [126] V. Topin, Y. Monerie, F. Perales, and F. Radjai. Collapse dynamics and runout of dense granular materials in a fluid. *Physical Review Letters*, 109 :188001, 2012.
- [127] V. Topin, F. Radjai, J.-Y. Delenne, and F. Mabilie. Mechanical modeling of wheat hardness and fragmentation. *Powder Technology*, 190 :215–220., 2009.
- [128] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials – Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer-Verlag New York, 2002.
- [129] N. Triantafyllidis and B.N. Maker. On the comparison between microscopic and macroscopic instability mechanisms in a class of fiber-reinforced composites. *Journal of Applied Mechanics*, 52 :794–800, 1985.
- [130] M. Trulsson, B. Andreotti, and P. Claudin. Transition from the viscous to inertial regime in dense suspensions. *Physical Review Letters*, 109 :118305, 2012.
- [131] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder technology*, 77 :79–87, 1993.
- [132] U. Tüzün and D. M. Heyes. Distinct element simulations and dynamic microstructural imaging of slow shearing granular flows. In N. A. Fleck and A. C. E. Cocks, editors, *IUTAM Symposium on Mechanics of Granular and Porous Materials*, pages 263–274. Kluwer Academic Publishers, 1997.
- [133] M. van Hecke. Jamming of soft particles : geometry, mechanics, scaling and isostaticity. *Journal of Physics : Condensed Matter*, page 033101, 22.
- [134] C. Voivret, F. Radjai, J.-Y. Delenne, and M.S. El Youssoufi. Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, 76 :021301, 2007.
- [135] J. Wang and 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.
- [136] Z. Wiekowski. The material point method in large strain engineering problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :4417–4438, 2004.
- [137] D.M. Wood. *Soil behaviour and critical state soil mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, England, 1990.
- [138] Xiangwu Xiao, Yuanqiang Tan, Hao Zhang, Rong Deng, and Shengqiang Jiang. Experimental and dem studies on the particle mixing performance in rotating drums : Effect of area ratio. *Powder Technology*, 314 :182–194, 2017.
- [139] J. Yvonnet. A fast method for solving microstructural problems defined by digital images : a space Lippmann–Schwinger scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 92 :178–205, 2012.
- [140] J. Yvonnet and G. Bonnet. A consistent nonlocal scheme based on filters for the homogenization of heterogeneous linear materials with non-separated scales. *International Journal of Solids and Structures*, 51 :196–209, 2014.
- [141] J. Zhang, T. S. Majmudar, M. Sperl, and R.P. Behringer. Jamming for a 2D granular material. *Soft Matter*, 6 :2982–2991, 2010.
- [142] T. Zhao, F. Dai, and N.-W. Xu. Coupled DEM-CFD investigation on the formation of landslide dams in narrow rivers. *Landslides*, 14 :189–201, 2017.
- [143] T. Zhao, S. Utili, and G. B. Crosta. Rockslide and impulse wave modelling in the vajont reservoir by DEM-CFD analyses. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 49 :2437–2456, 2016.
- [144] F. Zou, S. Huang, M. Zhou, Y. Lei, , S. Yan, J. Zhang, and B. Wang. Constitutive model and compaction equation for aluminum alloy powder during compaction. *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing*, 13 :JAMDSM0015–JAMDSM0015, 2019.



# Articles dans des revues internationales

- [1] T.-L. Vu, S. Nezamabadi, and S. Mora. Compaction of elastic granular materials : inter-particles friction effects and plastic events. *Soft Matter*, 16 :679–687, 2020.
- [2] T.T. Vo, S. Nezamabadi, P. Mutabaruka, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Additive rheology of complex granular flows. *Nature Communications*, 11 :1–8, 2020.
- [3] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Evolution of a wet agglomerate in shear flow of dry particles. *Physical Review E*, 101, 2020.
- [4] S. Nezamabadi, M. Ghadiri, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Modelling the compaction of a packing of plastic particles. *Submitted*, 2020.
- [5] M. Ghadiri, M. Pasha, W. Nan, C. Hare, V. Vivacqua, U. Zafar, S. Nezamabadi, A. Lopez, M. Pasha, and S. Nadimi. Rheometry of cohesive powder flow. *The Micromeritics (Funsai Journal)*, 63 :1–10, 2020.
- [6] M. Ghadiri, M. Pasha, W. Nan, C. Hare, V. Vivacqua, U. Zafar, S. Nezamabadi, A. Lopez, M. Pasha, and S. Nadimi. Cohesive powder flow : Trends and challenges in characterisation and analysis. *KONA Powder and Particle Journal*, 37 :3–18, 2020.
- [7] X. Frank, F. Radjai, S. Nezamabadi, and J.-Y. Delenne. Tensile strength of granular aggregates : stress chains across particle phase vs. stress concentration by pores. *Submitted*, 2020.
- [8] T.-L. Vu, J. Barés, S. Mora, and S. Nezamabadi. Numerical simulations of the compaction of assemblies of rubberlike particles : A quantitative comparison with experiments. *Physical Review E*, 99 :062903, 2019.
- [9] T.-L. Vu, J. Barés, S. Mora, and S. Nezamabadi. Deformation field in diametrically loaded soft cylinders. *Experimental Mechanics*, 59 :453–467, 2019.
- [10] T.T. Vo, S. Nezamabadi, P. Mutabaruka, J.-Y. Delenne, E. Izard, R. Pellenq, and F. Radjai. Agglomeration of wet particles in dense granular flows. *European Physical Journal E*, 42 :127, 2019.
- [11] S. Nezamabadi, X. Frank, J.-Y. Delenne, J. Averseng, and F. Radjai. Parallel implicit contact algorithm for soft particle systems. *Computer Physics Communications*, 237 :17–25, 2019.
- [12] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, E. Izard, R. Pellenq, and F. Radjai. Mechanical strength of wet particle agglomerates. *Mechanics Research Communications*, 92 :1–7, 2018.
- [13] M. Barnabé, N. Blanc, T. Chabin, J.-Y. Delenne, A. Duri, X. Frank, V. Hugouvieux, E. Lutton, F. Mabilille, S. Nezamabadi, N. Perrot, F. Radjai, T. Ruiz, and A. Tonda. Multiscale modeling for bioresources and bioproducts. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 46 :41–53, 2018.
- [14] S. Nezamabadi, T.H. Nguyen, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Modeling soft granular materials. *Granular Matter*, 19 :8, 2017.
- [15] M. Potier-Ferry, F. Mohri, F. Xu, N. Damil, B. Braikat, K. Mhada, H. Hu, Q. Huang, and S. Nezamabadi. Cellular instabilities analyzed by multi-scale fourier series : a review. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, 9 :585–597, 2016.
- [16] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, and J.-Y. Delenne. Implicit frictional-contact model for soft particle systems. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 83 :72–87, 2015.
- [17] S. Nezamabadi, M. Potier-Ferry, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Compressive failure of composites : A computational homogenization approach. *Composite Structures*, 332 :725–739, 2015.

- [18] Y. Cong, S. Nezamabadi, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Multiscale computational homogenization of heterogeneous shells at small strains with extensions to finite displacements and buckling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104 :235–259, 2015.
- [19] K. Attipou, S. Nezamabadi, H. Zahrouni, and E. M. Daya. A multiscale approach for the vibration analysis of heterogeneous materials : Application to passive damping. *Journal of sound and vibration*, 332 :725–739, 2013.
- [20] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Multiscale analysis of instabilities in heterogeneous materials using ANM and multilevel FEM. *European Journal of Computational Mechanics*, 21 :280–289, 2012.
- [21] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Solving hyperelastic material problems by Asymptotic Numerical Method. *Computational Mechanics*, 47 :77–92, 2011.
- [22] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. A multiscale finite element approach for buckling analysis of elastoplastic long fiber composites. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 8 :287–301, 2010.
- [23] S. Nezamabadi, J. Yvonnet, H. Zahrouni, and M. Potier-Ferry. A multilevel computational strategy for microscopic and macroscopic instabilities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198 :2099–2110, 2009.

# Ouvrages et chapitres d'ouvrages

- [1] F. Radjai, S. Nezamabadi, S. Luding, and J.-Y. Delenne. Powders & grains 2017 - 8th international conference on micromechanics on granular media. volume 140 - 396 Papers, 2017.



# Communications dans des congrès

- [1] T.-L. Vu, S. Nezamabadi, and S. Mora. Behavior of highly deformable particle systems subjected to uni-axial compression. In *Powders and Granular Materials : Challenges and Future Trends (PGM2019)*, Montpellier, France, 2019.
- [2] T.-L. Vu, S. Mora, and S. Nezamabadi. Numerical investigation of highly deformable particle systems. In *8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*, Enschede, Pays-Bas, 2019.
- [3] T.T. Vo, S. Nezamabadi, P. Mutabaruka, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Granulation of wet granular media in rotating drum. In *14ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2019)*, Giens, France, 2019.
- [4] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Numerical modeling of wet agglomerates. In *8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*, Enschede, Pays-Bas, 2019.
- [5] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Granulation of wet granular media. In *9th International Granulation Workshop*, Lausanne, Swiss, 2019.
- [6] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. DEM simulations of granulation process in 3D rotating drum. In *8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*, Enschede, Pays-Bas, 2019.
- [7] T.T. Vo., P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. The ductile behavior and microstructure of wet agglomerates. In *Powders and Granular Materials : Challenges and Future Trends (PGM2019)*, Montpellier, France, 2019.
- [8] S. Nezamabadi, F. Radjai, X. Frank, J.-Y. Delenne, and J. Averseng. Modélisation parallèle des milieux granulaires à particules déformables. In *14ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2019)*, Giens, France, 2019.
- [9] S. Nezamabadi, F. Radjai, X. Frank, and J.-Y. Delenne. Modelling soft granular materials : Compaction behaviour. In *Joint GeoMech-M2UN Workshop on Upscaling for Strategic Materials*, Montpellier, France, 2019.
- [10] S. Nezamabadi, T.H. Nguyen, X. Frank, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Modeling and rheology of soft granular materials. In *8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*, Enschede, Pays-Bas, 2019.
- [11] S. Nezamabadi, M. Ghadiri, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Compaction modelling of soft particle materials. In *Compaction Simulation Forum*, Bordeaux, France, 2019.
- [12] X. Frank, J.-Y. Delenne, S. Nezamabadi, and F. Radjai. Strength and fracture of porous, granular and cellular materials by peridynamic simulations. In *8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*, Enschede, Pays-Bas, 2019.
- [13] X. Frank, J.-Y. Delenne, S. Nezamabadi, and F. Radjai. Strength and fracture of heterogeneous materials by peridynamic simulations. In *Powders and Granular Materials : Challenges and Future Trends (PGM2019)*, Montpellier, France, 2019.
- [14] T.T. Vo, S. Nezamabadi, P. Mutabaruka, J.-Y. Delenne, R. Pellenq, E. Izard, and F. Radjai. Micro-mechanics of the granulation process in wet granular flows. In *2018 EMI International Conference*, Boston, USA, 2018.

- [15] T.T. Vo, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Agglomeration of wet granular materials. In *29th ALERT Geomaterials Workshop*, Aussois, France, 2018.
- [16] T.T. Vo, P. Mutabaruka, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. 3D simulations of the granulation of wet granular materials. In *Second Yet Another Discrete Element Workshop*, Aix-en-Provence, France, 2018.
- [17] T.-L. Vu, S. Mora, S. Nezamabadi, and J. Barés. Highly deformed grain : from the Hertz contact limitation to a new strain field description in 2D and 3D. In *28th ALERT Geomaterials Workshop*, Aussois, France, 2017.
- [18] T.-L. Vu, S. Mora, S. Nezamabadi, and J. Barés. Contact entre particules déformables : de la limite de Hertz aux grandes déformations. In *23ème Congrès Français de Mécanique (CFM 2017)*, Lille, France, 2017.
- [19] T.T. Vo, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Agglomeration process of wet granular material : Effects of size distribution and Froude numbe. In *28th ALERT Geomaterials Workshop*, Aussois, France, 2017.
- [20] T.T. Vo, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, R. Pellenq, and F. Radjai. Agglomeration of wet granular materials. In *Multiscale Materials under the Nanoscope 2017 (M2UN)*, Athènes, Grèce, 2017.
- [21] F. van Loo, J.-Y. Delenne, S. Nezamabadi, J.-F. Douce, A. Koltsov, E. Izard, E. Azéma, and F. Radjai. Effect of raw material properties on iron ores granulation : experimental study and analysis of granules breakage. In *2016 EMI International Conference*, Metz, France, 2016.
- [22] M. Potier-Ferry and S. Nezamabadi. Modélisation multi-échelle des instabilités et rupture en compression. In *Journée Scientifique et Technique de l'AMAC : Compression, instabilités et ruine dans la direction des fibres de matériaux et structures composites*, Safran Paris Saclay, 2016.
- [23] T.H. Nguyen, S. Nezamabadi, F. Radjai, and J.-Y. Delenne. Compaction and shearing of soft-particle granular media. In *2016 EMI International Conference*, Metz, France, 2016.
- [24] S. Nezamabadi and J. Yvonnet. A filter-based computational homogenization for nonlinear heterogeneous cellular media. In *2016 EMI International Conference*, Metz, France, 2016.
- [25] S. Nezamabadi, T.H. Nguyen, J.-Y. Delenne, J. Averseng, X.Frank, and F.Radjai. Textural analysis of soft granular materials. In *Gordon Research Conference*, Easton, MA, USA, 2016.
- [26] T.-H. Nguyen, S. Nezamabadi, J.-Y. Delenne, and F. Radjai. Numerical modeling and homogenization of soft-particle granular media. In *IVth International Conference on Particle-Based Methods (Particles 2015)*, 28-30.09.2015,, Barcelone, Espagne, 2015.
- [27] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, and J.-Y. Delenne. Modelling soft-particle materials. In *Geomechanics from Micro to Macro*, volume 1, page 43. CRC Press, 2015.
- [28] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, and J.-Y. Delenne. Modélisation des matériaux à particules hautement déformables. In *12ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2015)*, Giens, France, 2015.
- [29] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, and J.-Y. Delenne. Modeling ultrasoft-particle media. In *IVth International Conference on Particle-Based Methods (Particles 2015)*, 28-30.09.2015,, Barcelone, Espagne, 2015.
- [30] S. Nezamabadi, M. Potier-Ferry, Y. Cong, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Compressive failure of composites : A computational homogenization approach. In *4th International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC 2015)*, Cachan, France, 2015.
- [31] T.H. Nguyen, F. Radjai, and S. Nezamabadi. Numerical modeling and homogenization of soft granular media. In *ALERT International Workshop 2014*, Aussois, France, 2014.
- [32] S. Nezamabadi, F. Radjai, J.-Y. Delenne, and J. Averseng. Modélisation des matériaux à particules hautement déformables. In *Congrès Matériaux 2014*, Montpellier, France, 2014.
- [33] S. Nezamabadi, F. Radjai, J.-Y. Delenne, and J. Averseng. Modeling soft granular media. In *International conference on Modeling Granular Media Across Scales*, Montpellier, France, 2014.

- [34] Y. Cong, S. Nezamabadi, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Multiscale modeling of shells with heterogeneous micro and nano structures. In *11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI) - 5th. European Conference on Computational Mechanics (ECCM V)*, Barcelona, Spain, 2014.
- [35] O. Thomas, S. Nezamabadi, and J.-F. Deü. Calcul de vibrations non linéaires de micro/nano structures piézoélectriques stratifiées par modèles réduits avec correction quasi-statique. In *11ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2013)*, Giens, Var, France, 2013.
- [36] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Analyses multi-échelles du premier et du second ordre des instabilités dans les matériaux hétérogènes. In *11ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2013)*, Giens, France, 2013.
- [37] S. Nezamabadi, K. Sad Saoud, and B. Maurin. Stratégie numérique pour modéliser des plis dans les membranes minces. In *11ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2013)*, Giens, Var, France, 2013.
- [38] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng, and J.-Y. Delenne. An implicit contact algorithm for the material point method : Application to soft granular materials. In *ICCCM 2013*, Lecce – Italy, 2013.
- [39] O. Thomas, S. Nezamabadi, F. Mathieu, L. Nicu, and J.-F. Deü. Finite elements reduced order models of piezoelectric micro-resonators : electric charge computation and nonlinear parametric amplification. In *18ème Symposium Vibrations, Chocs et Bruit (Vibrations, Shocks & Noise, VISHNO)*, Clamart, France, 2012.
- [40] O. Thomas, J.-F. Deü, S. Nezamabadi, and A. Lazarus. Finite elements reduced order models for nonlinear vibrations of stratified piezoelectric beams with application to NEMS. In *18ème Symposium Vibrations, Chocs et Bruit (Vibrations, Shocks & Noise, VISHNO)*, Clamart, France, 2012.
- [41] S. Nezamabadi and J. Yvonnet. Solving microstructural problems defined by digital images in the context of finite strains using a space-Lippmann Schwinger iterative scheme. In *6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012)*, Vienna, Austria, 2012.
- [42] J.-F. Deü, O. Thomas, S. Nezamabadi, and A. Lazarus. Reduced order finite element models for nonlinear vibrations of piezoelectric layered beams with applications to MEMS. In *International Conference on Mechanics of Nano, Micro and Macro Composite Structures (ICNMMCS 2012)*, Turin, Italy, 2012.
- [43] K. Attipou, S. Nezamabadi, E. M. Daya, and H. Zahrouni. A multiscale approach for the vibration analysis of heterogeneous materials with viscoelastic inclusions : Application to passive damping. In *International Conference on Mechanics of Nano, Micro and Macro Composite Structures (ICNMMCS 2012)*, Turin, Italy, 2012.
- [44] O. Thomas, S. Nezamabadi, J.-F. Deü, and A. Lazarus. Réduction de modèles éléments finis pour les vibrations non linéaires : Application à des nano-structures piézoélectriques. In *10ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2011)*, Giens, France, 2011.
- [45] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Matériaux hyperélastique et Méthodes Asymptotique Numérique. In *10ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2011)*, Giens, France, 2011.
- [46] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Multiscale second order homogenization using asymptotic numerical method. In *4th European Congress on Computational Mechanics (ECCM 2010) : Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering*, Paris, France, 2010.
- [47] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Technique multi-échelle pour l'analyse du microflambage des composites. In *19ème Congrès Français de Mécanique (CFM 2009)*, Marseille, France, 2009.
- [48] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Multiscale microbuckling analysis of elastoplastic long fiber composites. In *7th European Solid Mechanics Conference (ESMC 2009)*, Lisbon, Portugal, 2009.
- [49] S. Nezamabadi, J. Yvonnet, H. Zahrouni, and M. Potier-Ferry. MAN et EF<sup>2</sup> pour le flambage des matériaux hétérogènes. In *9ème Congrès de Mécanique Marrakech*, Marrakech, Maroc, 2009.

- [50] S. Nezamabadi, J. Yvonnet, H. Zahrouni, and M. Potier-Ferry. Analyse multi-échelles du flambage des matériaux hétérogènes. In *9ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA2009)*, Giens, France, 2009.
- [51] S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, and M. Potier-Ferry. Multiscale buckling analysis of heterogeneous materials. In *8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) and 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008)*, Venice, Italy, 2008.