



HAL
open science

Modélisation de la compression haute densité des poudres métalliques ductiles par la méthode des éléments discrets

Jean-Francois Jerier

► **To cite this version:**

Jean-Francois Jerier. Modélisation de la compression haute densité des poudres métalliques ductiles par la méthode des éléments discrets. Mécanique [physics.med-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2009. Français. NNT: . tel-00443670v1

HAL Id: tel-00443670

<https://theses.hal.science/tel-00443670v1>

Submitted on 2 Jan 2010 (v1), last revised 3 Jan 2010 (v2)

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

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

UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER DE GRENOBLE - GRENOBLE UNIVERSITÉS

N° attribué par la bibliothèque :

| | | | | | | | | |

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER

Spécialité « 2MGE » :

Matériaux, Mécanique, Génie civil, Electrochimie

préparée au laboratoire SOLS, SOLIDES, STRUCTURES - RISQUES

dans le cadre de *l'Ecole Doctorale « I-MEP2 » :*

Ingénierie - Matériaux Mécanique Energétique Environnement Procédés Production

présentée et soutenue publiquement par

Jean-François JERIER

Le 19 novembre 2009

Modélisation de la compression haute densité des poudres métalliques ductiles par la méthode des éléments discrets

Directeur de thèse : Frédéric-Victor DONZÉ

Co-directeur de thèse : Didier IMBAULT

JURY

M. Christophe	MARTIN	Directeur de recherche au Laboratoire SIMAP	Président
M. Jean-claude	GÉLIN	Professeur à l'ENSMM	Rapporteur
M. Farhang	RADJAI	Directeur de recherche au LMGC	Rapporteur
M. Jean-Noël	ROUX	Professeur au LCPC	Examineur
M. Nicolas	TABERLET	Maître de conférences à l'ENS Lyon	Examineur
M. Pierre	DORÉMUS	Maître de conférences à Grenoble INP (H.D.R.)	Invité
M. Frédéric-Victor	DONZÉ	Professeur à l'UJF	Directeur de thèse
M. Didier	IMBAULT	Maître de conférences à Grenoble INP	Co-directeur

A ma famille,

A Emmanuelle.

Remerciements

Le travail de thèse présenté dans ce mémoire a été effectué au sein des équipes: Mécanique des Matériaux Solides et des Milieux Complexes (2MSMC) et Risques et Vulnérabilité (RV) du Laboratoire Sols, Solides, Structures et Risques (3S-R) de Grenoble sous la direction de Frédéric Donzé, Pierre Dorémus et Didier Imbault.

A mes encadrants, je leur exprime toute ma reconnaissance pour leur disponibilité constante, la confiance qu'ils m'ont accordée, les orientations judicieuses qu'ils m'ont proposées, les conseils avisés qu'ils m'ont donnés.

Je remercie également le président, les rapporteurs et les examinateurs de ma thèse: Christophe Martin, Jean-Claude Gélín, Farhang Radjai ainsi que Jean-Noël Roux et Nicolas Taberlet pour l'attention et l'intérêt qu'ils ont manifestés en acceptant d'expertiser mon travail.

De plus, j'adresse toute ma gratitude à plusieurs maîtres de conférences: Vincent Richefeu, Bruno Chareyre, Gaël Combe et Sylvain Lignon pour toute l'aide qu'ils m'ont apportée et pour les précieux conseils qu'ils m'ont prodigués tout au long de mon étude.

J'ai une pensée pour mes collègues: Barthélémy Harthong, Jerônimo Zanette et Jean-Pierre Vassal avec qui j'ai eu le plaisir et l'immense honneur de collaborer. D'une manière générale, je remercie l'ensemble des thésards du 3S-R et plus particulièrement ceux avec qui j'ai partagé un bureau (florent, stéphane, ludovic et cédric) pour tous les bons moments passés ensemble. Je souhaite aussi remercier affectueusement le personnel administratif (sheherazade, céline, sonia, madeleine, carole, ...) et technique (rémi, jérôme,...) pour leur professionnalisme.

Pour finir, je tiens à remercier de tout mon cœur mes parents et mon frère pour leur indéfectible soutien et leurs encouragements qui m'ont aidés à relever de nombreux challenges. Enfin, je dédie cette thèse à ma compagne Emmanuelle, car elle a su veiller sur moi et m'apporter l'équilibre indispensable à l'accomplissement de ma thèse.

Ce mémoire de thèse synthétise trois années de recherches dédiées à l'étude numérique et théorique de la compression à haute densité de poudres métalliques. Des différentes phases qu'intègrent la métallurgie des poudres, la phase de compression à froid de la poudre est l'une des phases les plus sensibles de ce procédé de fabrication, car elle influence les propriétés mécaniques de la pièce finale. Il est donc nécessaire de mettre en place une approche numérique qui permet de contrôler et d'optimiser la compression de poudre jusqu'à de fortes valeurs de compacité (compacité supérieure à 0.9).

Pour cela, nous proposons de reproduire par la méthode des éléments discrets le comportement de la poudre observé expérimentalement sous différents types de chargement. A ce jour, les simulations via cette méthode sont limitées à une valeur de compacité ne dépassant pas 0.85. Pour dépasser ces limitations, nous présentons un modèle de contact implémenté dans un code éléments discrets libre (Yade). Ce nouveau modèle de contact est développé sur la base de la loi de contact normal qui intègre le terme de densité locale des particules dans son expression, afin de prendre en compte l'incompressibilité des grains se produisant à des valeurs de compacité supérieures à 0.85. Dans le but de procéder à des simulations plus réalistes, un nouvel algorithme géométrique de génération d'empilements de sphères polydisperses est développé. Ce nouvel outil numérique est capable de générer très rapidement de grands assemblages de sphères en contact tout en contrôlant différents paramètres comme la distribution de la compacité, la taille minimale et maximale des sphères.

Avec le modèle de contact capable de reproduire l'interaction entre les grains et la création d'un algorithme pouvant générer des assemblages de sphères similaires à un tas de poudres, nous procédons à des simulations de compression isostatique et en matrice pour différents types de poudres (cuivre, aluminium, fer). Les résultats obtenus sont directement comparés à ceux issus des simulations éléments finis multi-particules et de l'expérience. Ces comparaisons permettent ainsi de valider et de tester la robustesse du modèle de contact développé. Pour finir, nous investiguons sur la base de nos divers développements validés, l'évolution d'une poudre d'aluminium avec un gradient de compacité au cours d'une compression en matrice.

Mots-clés: compression haute densité, métallurgie des poudres, modèles de contact, méthode des éléments discrets, empilement de sphères, algorithme géométrique.

This Ph.D. manuscript synthesises three years of research dedicated to numerical and theoretical studies of high density powder compaction. During cold compaction process, the compaction stage is among the most sensitive powder metallurgy's stages, because it has a strong impact on the mechanical properties of the final part. It is necessary to find a numerical approach to control and to optimize the high density powder compaction (density value above 0.9).

We propose to model by the discrete element method the behaviour of powder which is observed experimentally under different loading paths. To date, the discrete element simulations are not able to model the powder compaction for high density values (density is limited at 0.85). To go beyond this limit, we present a contact model implemented into a discrete element open-source software (Yade). This new contact model is based on a normal contact law which integrates in its expression the local density parameter. This new local variable takes into account the incompressibility of the material which appears at density values above 0.85. In order to realize more realistic simulations, a new geometric algorithm to generate polydisperse sphere packings is developed. This new numerical tool is able to generate very fast large sphere assemblies with different properties controlled by the user as: density distribution, the minimal and maximal size of spheres.

With the contact model capable of reproducing the granular interaction up to high density value and the geometric algorithm which generates sphere assemblies similar to powder, we realize simulations of isostatic and closed die compaction for various types of powder (copper, aluminium, iron). The results are directly compared with those obtained by multi-particle finite element method and by experimental tests. These comparisons allow to validate and test the robustness of the contact model developed here. Finally, we investigate the evolution of aluminium powder assembly composed with an initial graded density distribution during the closed die compaction.

Keywords: high density compaction, powder metallurgy, contact model, discrete element method, sphere packing, geometric algorithm

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	ii
Abstract	iii
Table des matières	vii
Liste des figures	xii
Liste des tableaux	xxii
Introduction générale	1
Chapitre 1 Etat de l'art	5
1.1 Introduction	5
1.2 Les différentes phases de la métallurgie des poudres	6
1.3 Les poudres métalliques	8
1.4 La phase de remplissage de la matrice et de transfert de la poudre	12
1.5 La phase de la compression à froid de la poudre	18
1.5.1 Le principe de densification	18
1.5.1.1 Le réarrangement	18
1.5.1.2 Déformations locales et plastiques des grains	19
1.5.1.3 Chemins de chargement	20
1.5.2 Propriétés et caractérisation du comprimé à vert	22
1.5.2.1 Propriétés élastiques	23
1.5.2.2 Rupture en traction et en compression	24
1.5.2.3 Le comportement plastique	25
1.5.2.4 La distribution de densité et les contraintes résiduelles	25
1.6 La modélisation de la compression de poudres par l'approche continue	26

1.6.1	Les modèles de plasticité incrémentaux	26
1.6.1.1	Le modèle Drucker-Prager/Cap	27
1.6.1.2	Le modèle Cam-Clay	29
1.7	La modélisation de la compression de poudres par l'approche discrète	31
1.7.1	La méthode des éléments finis multi-particules	32
1.7.1.1	Les généralités sur la méthode	32
1.7.1.2	L'étude numérique pour la compression de poudres en 3D	33
1.7.2	La méthode des éléments discrets	38
1.7.3	Les modèles de contacts développés pour le stade 2	39
1.8	Une nouvelle loi de contact normal force-déplacement pour le stade 1 et le stade 2	48
1.9	Conclusion	53
Chapitre 2	Le modèle discret et la génération d'empilements de particules	55
2.1	Introduction	55
2.2	Principe de la méthode des éléments discrets (MED)	56
2.2.1	Loi de mouvements	57
2.2.2	Pas de temps critique	58
2.2.3	Code de calcul Yade	58
2.3	Modèle de contact utilisé pour la compression de poudre	60
2.3.1	Raideur normale de contact	60
2.3.2	Raideur tangentielle de contact	64
2.4	Les empilements numériques représentatif de la poudre réelle	65
2.4.1	Volume élémentaire représentatif et variabilité des résultats	65
2.4.2	La génération d'empilements de sphères	67
2.5	La modélisation numérique d'un tas de grains de poudres dans la littérature	67
2.6	Les algorithmes de générations d'assemblage de sphères	69
2.6.1	Les algorithmes dynamiques	69
2.6.1.1	L'algorithme de compression isotrope	69
2.6.1.2	L'algorithme de grossissement des sphères (méthode d'expansion)	70
2.6.1.3	L'algorithme couplé avec une méthode cinématique	71
2.6.2	Les algorithmes géométriques	73
2.6.2.1	L'algorithme de réarrangement collectif	73
2.6.2.2	L'algorithme de déposition balistique	75
2.7	L'algorithme géométrique de génération d'empilement de sphères basé sur le maillage tetraedrique	76
2.7.1	Description générale de l'algorithme développé	77

2.7.2	La routine géométrique quatre contacts	81
2.7.2.1	La fonction géométrique d'inversion	81
2.7.2.2	La procédure géométrique de placement d'une sphère	82
2.7.3	La routine de placement des sphères virtuelles	84
2.7.4	Synthèse de la procédure de génération d'un empilement	85
2.8	Les différents outils de caractérisation d'un empilement numériques de sphères	87
2.8.1	Compacité ou densité relative	87
2.8.2	Nombre de coordination	88
2.8.3	Tenseur de fabrique	88
2.8.4	Représentation graphique de l'orientation des contacts	89
2.8.5	Fonction de distribution radiale	91
2.9	Conclusion	92
Chapitre 3	Résultats et validations	93
3.1	Introduction	93
3.2	Résultats et propriétés du nouvel algorithme géométrique	94
3.2.1	La diversité des textures générées	95
3.2.2	Caractérisation d'un empilement granulaire	98
3.2.2.1	Effets de la valeur d'interpénétration fixée sur les propriétés de l'empilement généré	98
3.2.2.2	Différents post-traitements appliqués à deux échantillons différents	99
3.2.3	Le temps de calcul de génération d'empilement par rapport à l'algorithme dynamique de grossissement	105
3.3	Validation du modèle de contact utilisé dans l'approche discrète	107
3.3.1	L'interaction paroi-sphère et sphère-sphère	107
3.3.2	Comparaison entre la DEM et la MPFEM pour deux chemins de chargement	109
3.3.3	Sensibilité à la valeur de la raideur tangentielle	114
3.3.4	Comparaison entre la DEM et des résultats expérimentaux	115
3.4	Compression en matrice d'un empilement avec une distribution de la compacité non homogène	122
3.5	Conclusion	130
	Conclusions et perspectives	131
	Annexes	137
Annexe A	Le comportement élastoplastique de matériaux denses ou particuliers	139
A.1	La compression uni-axiale	139

A.2	La déformation sous un état de contraintes multi-axial	141
Annexe B	Modélisation de la compression de poudre par l'approche continue	147
B.1	Modélisation avec le modèle Drucker-Prager/Cap de la compression en ma- trix d'une pièce industrielle	147
Annexe C	La structure numérique de la méthode éléments finis multi-particules	151
C.1	Généralités	151
C.2	Le schéma de résolution numérique de la méthode	152
C.3	La détection des contacts	153
Annexe D	L'étude de la compression de poudres en 2D par la MEFMP	155
Annexe E	Les modèles de contacts adaptés aux stades 0 et 1 de la phase de compression de la poudre	159
Annexe F	Les capacités de l'algorithme géométrique	165
F.1	La densification contrôlée d'un sous-espace de l'empilement	165
F.2	La réalisation de matériaux granulaires composites	166
F.3	L'application de l'algorithme dans la tomographie	167
	Bibliographie	168
	Articles acceptés ou soumis	176

Liste des figures

1.1	Le procédé de fabrication complet de la métallurgie des poudres.	7
1.2	Les différentes phases d'obtention du comprimé.	7
1.3	Morphologies de différents types de poudres métalliques obtenues avec un microscope électronique à balayage. A) Poudre de fer de forme irrégulière (Distaloy AE). B) Poudre de fer de forme régulière (Stainless Steel 316L). C) Poudre de cuivre de forme irrégulière. D) Poudre de cuivre de forme régulière. Images issues des travaux de L.C.R Schneider [Schneider et Cocks (2002)].	10
1.4	Remplissage d'une matrice transparente avec un sabot. Le sabot en plexiglas se translate grâce à un actionneur pneumatique linéaire qui est contrôlé par un automate digital. Ce banc d'essai possède également deux types de poinçons placés en dessous et au dessus de la matrice pour réaliser la phase de transfert.	12
1.5	Ecoulement de la poudre Distaloy AE au sein d'une matrice avec une vitesse du sabot de 200 mm/s de droite à gauche. Les sections entourées en blanc montrent les différentes poches d'air qui sont créées au fur et à mesure du remplissage de la matrice. 13	
1.6	Simulation avec la méthode des éléments discrets de l'écoulement des poudres au sein d'une matrice avec un sabot se tradant à une vitesse de 200 mm/s. Les différentes poches d'air sont similaires à celles observées à la figure 1.5.	14
1.7	A) Modélisation par la DEM de la distribution de la compacité en fin de remplissage de la matrice (Fig. 1.6-f) Wu <i>et al.</i> (2003b). La compacité est calculée numériquement en scindant la matrice par une grille puis en calculant la fraction solide en chaque subdivision de cette grille. B) Représentation schématique des espaces vides (pores) créées par le blocage en forme de voûte des particules Schneider (2003).	15
1.8	Illustration du process de transfert de poudre dans la matrice. Pendant le transfert de la poudre, une fois que le poinçon extérieur haut touche la poudre, il est fixé à cette position, tandis que les poinçons intérieurs sont tradés vers le bas à la même vitesse constante pour réaliser le profil en H.	16
1.9	Evolution de la distribution de la compacité pendant le transfert de poudre Wu <i>et al.</i> (2003b).	17
1.10	Vue schématique des trois stades de la phase de la compression pour une poudre de fer. 19	
1.11	Composante axiale et radiale: (A) les contraintes et (B) les déformations sur un comprimé de poudre de forme axisymétrique.	21
1.12	Chemins de chargement typiques dans le plan p-q (l'espace des contraintes), où q est la contrainte déviatoire et p est la contrainte moyenne ou hydrostatique.	22

1.13	Modèle modifié de Drucker-Prager/Cap représenté dans le plan p-q avec l'introduction d'une limite en traction T. Le critère de Von Mises n'est pas adapté au comportement des comprimés à vert en cours de compression [Coube (1998)].	27
1.14	Modèle modifié de Cam-Clay représenté dans le plan p-q.	30
1.15	Particule discrétisée par des éléments finis hexaédriques et utilisée dans les simulations MEFMP pour des grandes déformations.	32
1.16	Comparaison d'une simulation MEFMP avec l'expérience: A) L'empilement numérique cubique centré réalisé avec des sphères maillées de 1.664 éléments finis. B) La déformation obtenue numériquement de l'empilement jusqu'à une compacité de 0,97. C) La déformation obtenue expérimentalement de l'empilement jusqu'à une compacité de 0,97.	34
1.17	Courbes de force-déplacement du poinçon supérieur réalisées expérimentalement et numériquement sur un empilement cubique centré comprimé en matrice jusqu'à une densité relative de 0,97	35
1.18	Comparaison d'une simulation en compression en matrice cylindrique MEFMP avec l'expérience pour un empilement de 150 sphères polydisperses: A) La déformation obtenue numériquement de l'empilement jusqu'à une densité relative de 0,92. B) La déformation obtenue expérimentalement de l'empilement jusqu'à une densité relative de 0,92.	36
1.19	Courbes de contrainte-densité relative réalisées expérimentalement et numériquement sur un empilement de 150 sphères déformées en matrice	37
1.20	Illustration en deux dimensions des cellules de Voronoï avec les notations développées pour l'étude de la compression.	40
1.21	Simulations MED et cinématique en 2D d'une compression isotrope A) Empilement initial polydisperse de 3183 cylindres. B) Courbe de réponse en contrainte normalisée-densité de l'essai pour une simulation: sans frottement (MED), avec frottement $\mu = 0,1$ (MED), cohésion (MED), cohésion et sans rotation (MED) et affine	42
1.22	Les surfaces de charges d'un empilement polydisperse de cylindres comprimés à une densité relative de 0,85. Différents coefficients de frottements sont utilisés pour les simulations MED et affine. A) Surface générée à partir d'un premier chemin de chargement isotrope B) Surface générée à partir d'un premier chemin de chargement en matrice.	43
1.23	Deux sphères qui s'indentent.	44
1.24	Evolution de la pression isostatique en fonction de la compacité pour la compression d'une poudre de cuivre. Comparaison des simulations MED (Storåkers) avec des données expérimentales (●) de James (1977).	45
1.25	Déformation de la zone de contact lors d'un essai isostatique sur une particule initialement sphérique. A) Situation initiale (les zones de contact sont des points). B) Les surfaces de contact sont circulaires. C) Première situation critique (voir Tab. 1.2). D) Situation intermédiaire (les cercles sont tronqués). E) Situation finale (la sphère initiale devient un cube avec $h_{final} = \sqrt[3]{\frac{\pi}{6}} R_0$).	46
1.26	Déformation de la zone de contact lors d'un essai en matrice sur une particule initialement sphérique. A) Situation initiale (les zones de contact sont des points). B) Les surfaces de contact sont circulaires. C) Première situation critique (les contacts avec les surfaces qui densifient sont tronqués suivant les directions X et Y, tandis que les autres contacts sont tronqués suivant la direction Z) (voir Tab. 1.2). D) Situation intermédiaire. E) Deuxième situation critique (voir Tab. 1.2). F) Situation intermédiaire. G) Situation finale (la sphère initiale est devenue un orthoèdre avec $h_{final} = \frac{\pi}{6} R_0$	47

1.27	Simulation d'un empilement régulier de type cubique simple, en compression triaxiale par une maille élémentaire. Les contacts bille-bille sont remplacés par des contacts billes-plans rigides sans frottement;	48
1.28	Différents types d'essais réalisés par Harthong sur une cellule cubique périodique. Ces essais ont servi à développer la loi de contact analytique normale force-déplacement valide pour les trois stades de compression.	49
1.29	Comparaison entre la courbe ABAQUS force-déplacement avec les courbes issues de la loi de Storåkers et de la première expression de la loi analytique développée (K_1 et K_2). Cette comparaison se fait pour deux types de compression (isostatique (a) et en matrice (b)) sur un empilement cubique à faces centrées représenté par des billes de plomb.	51
1.30	Représentation du polyèdre des contacts définissant le volume de vide (V_{vide}) dans lequel la sphère peut se déformer.	51
1.31	Comparaison entre la courbe ABAQUS force-déplacement avec les courbes issues de la loi analytique modifiée (K_1 , K_2 et K_3). Cette comparaison se fait pour deux types de compression (isostatique et en matrice) sur un empilement cubique à faces centrées représenté par des billes de plomb.	53
2.1	Cycle de calcul de la Méthode des Eléments Discrets.	56
2.2	Représentation des boîtes englobantes (boîtes de couleur verte) dans le code éléments discrets open-source YADE.	59
2.3	L'interaction entre deux particules discrètes en contact. A) Définition des notations et décomposition de la force d'interaction inter-granulaire. B) Interaction de contact selon Cundall et Strack. C) Définition de l'interpénétration (h)	60
2.4	Représentation des cellules Voronoï pour un empilement de 32 sphères.	61
2.5	Courbes force-compacité résultant des différentes expressions k_1 , k_2 et k_3 pour une compression en matrice et isostatique d'une sphère dans un cube. A) Représentation d'une sphère dans un cube sous YADE. B) Compression en matrice d'une sphère. C) Compression isostatique d'une sphère.	63
2.6	Comportement élastoplastique de l'interface entre deux sphères en contact dans la direction normale et tangentielle. A) Loi de contact tangentielle, où Δh_t est le déplacement relatif de 2 sphères en contact dans la direction tangentielle. B) Loi de contact normal, avec k_n la raideur normale et $k_n decharge$ la raideur de décharge. La décharge intervient lorsque deux sphères en contact s'éloignent l'une de l'autre.	64
2.7	Les différents assemblages de sphères de taille unique existant dans la littérature. A) Empilement ordonné de sphères de taille unique (Ordered Close Packing). B) Empilement aléatoire compact de sphères de taille unique (Random Close Packing).	68
2.8	L'algorithme dynamique de génération d'empilement par le rapprochement des murs. A) Placement des sphères avec un rayon prédéfini de façon aléatoire dans un container plus grand. B) Phase de rapprochement des murs (diminution du volume de l'échantillon).	70
2.9	L'algorithme dynamique de génération d'empilement par le grossissement des particules. A) Placement des sphères avec un rayon prédéfini de façon aléatoire dans un container plus grand. B) Phase de grossissement itératif des sphères.	71
2.10	L'algorithme dynamique de génération d'empilement couplé avec une approche cinématique. A) Empilement de sphères après la simulation cinématique. B) Empilement de sphères après la simulation dynamique.	72

2.11	L'algorithme géométrique de réarrangement collectif entre quatre sphères. A) On répertorie les différents recouvrements entre les sphères (S1, S2, S3, S4). B) Puis on diminue le recouvrement le plus important entre la sphère S1 et S2 en déplaçant les sphères le long de la droite passant par leur centre. C) Le recouvrement le plus important se trouve maintenant entre la sphère S1 et la sphère S3. D) Le dernier recouvrement entre deux sphères S2 et S4 sera annulé sans créer de nouveaux recouvrements.	74
2.12	La séquence de placement d'une sphère dans une position stable. A) Une nouvelle sphère touche une sphère fixée. B) La nouvelle sphère roule autour de la sphère fixée jusqu'à atteindre un deuxième contact. C) La nouvelle sphère va ensuite atteindre une position stable en roulant sur ces deux sphères support pour atteindre un troisième contact.	75
2.13	L'algorithme géométrique de construction d'un empilement de sphères par la déposition balistique.	76
2.14	Les différentes étapes de remplissage de deux tétraèdres.	78
2.15	Détection et diminution de l'espace vide contenu dans un tétraèdre formé par quatre sphères. A) Création d'une maille tétraédrique par l'algorithme de Delaunay à partir des quatre sphères présentes dans l'empilement. B) Représentation d'un triangle sphérique à partir d'une sphère placée au sommet du tétraèdre. C) Positionnement d'une sphère sur quatre sphères voisines pour combler l'espace vide.	79
2.16	Les différentes séquences de la génération d'un empilement cubique à partir du nouvel algorithme géométrique développé.	80
2.17	La fonction géométrique d'inversion de centre O et de rapport k appliquée : A) sur un point B en 1D. B) sur une droite (d) en 2D. C) sur un plan (P) en 3D.	81
2.18	Description de la procédure géométrique de placement d'une sphère tangente à quatre autres sphères.	83
2.19	Un assemblage de 10.000 sphères crée par le nouvel algorithme sans la prise en charge des limites physique du container.	84
2.20	La démarche de placement de trois sphères virtuelles par rapport à une face extérieure d'un tétraèdre : 1) L'algorithme détecte un tétraèdre avec une face (A, B, C) qui représente la frontière 2) Les deux normales à cette face sont calculées, ne sera retenu que la normale sortante 3) En fonction de leur rayon et en s'aidant de la position des sommets A, B et C les sphères virtuelles sont placées tangentes à la face.	85
2.21	La synthèse du processus de génération de l'algorithme géométrique.	86
2.22	Empilement de sphères en contact avec les directions de contact données par les directions des segments joignant les centres des grains en contact.	89
2.23	Distribution des orientations de contact dans les plans (xy), (yz) et (xz).	89
2.24	Représentation en 2D de la distribution des contacts d'un empilement avec le concept de sphère cubique. A) Cube avec un maillage surfacique composé de quadrangle. B) Transformation homothétique du cube en une sphère (sphère cubique). C) Représentation des vecteurs de contact unitaire dans la sphère cubique. D-E) Représentation par un code de couleur du nombre de vecteur de contact qui passe dans chaque maille. F) Transformation homothétique inverse pour passer de la sphère cubique au cube maillé. G) Dépliage du cube en un plan.	90
2.25	A) Représentation en 2D de la distribution des contacts d'un empilement anisotropes. B) Empilement de sphères en étoile avec des valeurs propres du tenseur de fabrique égales à: $\beta_1 = 0,3263$, $\beta_2 = 0,3368$ et $\beta_3 = 0,3368$	91
2.26	Représentation de la distribution radiale pour un empilement 2D [Frenkel et Smit (2002)].	92

3.1	Le graphe de compacité et du nombre de coordination en fonction du ratio de taille: A) Les assemblages les plus compacts. B) Les assemblages "poreux" avec une compacité fixée à 0,45.	95
3.2	Les différents empilements cubiques générés en respectant les frontières du domaine: A) Empilement poreux de ratio égal à 2 avec une compacité fixée de 0,45 réalisé en 80s (4.736 sphères). B) Empilement compact de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,8 réalisé en $2,2390 \cdot 10^4$ s (66.000 sphères)	96
3.3	Les histogrammes de la distribution de probabilité cumulée du nombre de contacts par sphère: A) Histogramme correspondant à l'empilement de ratio égal à 2 avec une compacité fixée de 0,45. B) Histogramme correspondant à l'empilement de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,8.	97
3.4	Les courbes de la fonction de distribution radiale: A) L'empilement avec un ratio égal à 7 le plus compact (voir Fig. 3.2-B) présente un fort amortissement des pics. B) L'empilement avec un ratio égal à 1,5 (voir Fig. 3.2-A) présente un amortissement de 50% au niveau des pics.	100
3.5	La distribution de probabilité du nombre de sphères pour les facettes polyédriques de Voronoï. A) Empilement de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,749. B) Empilement de ratio égal à 2 avec une compacité de 0,505	101
3.6	La distribution de probabilité du nombre de sphères en fonction du nombre des facettes polyédriques de Voronoï pour les sphères (129 sphères) ayant un rayon supérieur ou égal à $80\% \times R_{max} = 0,0384$	101
3.7	Le diagramme des orientations des contacts projetés sur les trois plans principaux pour l'empilement de ratio égal à 7	102
3.8	Le diagramme des orientations de contact projetées sur les trois plans principaux pour l'empilement de ratio égal à 1,5	103
3.9	La représentation en 2D de l'orientation des contacts A) Empilement dense de ratio égal à 7 (nombre minimum de vecteurs de contact dans une direction égale à 25, nombre maximum de vecteurs de contact dans une direction égale à 234). B) Empilement compact de ratio égal à 1,5 (nombre minimum de vecteurs de contact dans une direction égale à 0, nombre maximum de vecteurs de contact dans une direction égale à 20).	103
3.10	La distribution de tailles des sphères pour les deux empilements A) Empilement compact de ratio égal à 7. B) Empilement compact de ratio égal à 1,5.	104
3.11	Représentation des différentes configurations initiales utilisées dans les tests de validation des interactions sphères-parois et sphères-sphères. A) Une sphère rigide dans un cube pour les simulations MED. B) Deux sphères rigides dans un parallélogramme pour les simulations MED C) Un quart de sphère maillé dans un cube pour les simulations MEFMP. D) Deux sphères maillées dans un parallélogramme pour les simulations MEFMP	107
3.12	Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression isostatique réalisées par la MED et la MEFMP jusqu'à une valeur de compacité de 0,97 sur: A) une sphère B) deux sphères.	108
3.13	Compression isostatique d'un empilement de 32 sphères de plomb (rayon=0,153) par la MEFMP et la MED. A) Empilement initial de sphères maillées utilisé dans les simulations éléments finis. B) Empilement de sphères maillées comprimé isostatiquement. C) Empilement initial de sphères rigides utilisé dans les simulations aux éléments discrets. D) Empilement de sphères représenté avec les cellules de Voronoï associées. E) Empilement de 32 sphères rigides comprimé isostatiquement par le logiciel Yade.	109

3.14	Compression en matrice d'un empilement de 32 sphères de plomb par la MEFMP et la MED. A) Empilement initial de sphères maillées utilisé dans les simulations éléments finis. B) Empilement de sphères maillées comprimé en matrice. C) Empilement initial de sphères rigides utilisé dans les simulations aux éléments discrets. D) Empilement de 32 sphères rigides comprimé en matrice par le logiciel Yade.	110
3.15	Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression de 32 sphères de plomb réalisées par la MED et la MEFMP. A) Cas d'un chargement isostatique. B) Cas d'un chargement en matrice.	110
3.16	Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression réalisées par la MED à partir de six empilements différents comptant chacun 32 sphères en plomb. A) Courbes pour un chargement isostatique. B) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction X pour un chargement en matrice. C) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction Y pour un chargement en matrice. D) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction Z pour un chargement en matrice.	111
3.17	L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression en matrice. Cette modélisation est effectuée avec les deux méthodes numériques sur un empilement de 32 sphères qui a des propriétés matériaux qui vont changer pour les quatre essais. . .	113
3.18	L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression en matrice. Cette modélisation est effectuée sur un empilement de 32 sphères différent pour les deux méthodes numériques.	114
3.19	L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression isostatique. Cette modélisation est effectuée avec les deux méthodes numériques sur un empilement de 32 sphères qui a des propriétés matériaux qui vont changer pour les deux essais. . . .	115
3.20	Réponses en fonction des différentes valeurs de la raideur tangentielle à la compression en matrice d'un assemblage de 400 sphères de plomb avec un angle de frottement entre les particules et entre les particules et les parois égale à 25° . A) Evolution de la contrainte dans la direction X en fonction de la compacité. A) Evolution de la contrainte dans la direction Y en fonction de la compacité. C) A) Evolution de la contrainte dans la direction Z en fonction de la compacité. D) Représentation des différentes réponses dans le plan p-q.	116
3.21	Images des particules de poudres. A) l'aluminium. B) la distaloy AE. C) le cuivre. . .	117
3.22	Courbes de compression isotrope sur des poudres réelles, des résultats issus de l'expérience ou de la simulation sur différents empilements de sphères.	118
3.23	Empilement de 1.000 sphères de même taille avec les cellules de Voronoï associées. Cet empilement est utilisé dans les simulations aux éléments discrets.	119
3.24	Courbes de compression en matrice sur des poudres réelles, des résultats issus de l'expérience ou de la simulation sur différents empilements de sphères.	121
3.25	Empilement initial avec un gradient de compacité généré dans un cube ($1 \times 1 \times 1$). A) L'empilement initial composé de 5000 sphères (ratio de taille égal à 2). B) Coupe de l'empilement initial où le code de couleur représente la densité locale des sphères (la section est réalisée à partir du logiciel Mgpost développée par Richefeu).	123
3.26	L'évolution de la densité locale pour chaque sphère dans la cas d'une compression en matrice. A) L'empilement initial. B) L'empilement a une compacité de 0,93.	124

3.27	L'évolution de l'amplitude de déplacement de chaque sphère dans le plan XOY au cours de la compression en matrice. A) L'empilement initial. B) L'empilement à une compacité de 0,93. La valeur de la compacité dans chaque zone est une moyenne de six valeurs.	125
3.28	L'évolution de la déformation volumique de chaque cellule de Voronoï au cours de la simulation. A) L'empilement initial. B) L'empilement à la moitié de la compression. C) L'empilement à une compacité de 0,93. D) Représentation des sphères ayant subi une forte déformation volumique au sein de l'empilement.	126
3.29	La compression en suivant l'axe X d'un empilement avec un gradient de compacité unidirectionnel qui évolue dans la direction X. A) La densité locale des sphères à la fin de la compression 0,93. B) Les déplacements des sphères dans le plan YOZ à la fin de la compression.	127
3.30	Empilement cubique de 6.953 sphères avec un gradient de compacité cylindrique, l'empilement dont la valeur de densité locale des sphères est représentée se densifie des bords vers le centre. A) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOZ de l'empilement avant compression. B) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOZ de l'empilement en fin de compression. C) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOY de l'empilement avant compression.	128
3.31	Représentation de l'empilement avec un gradient de compacité cylindrique en fin de compression pour différents types de post-traitement. A) Représentation de la déformation volumique subie par chaque sphère en vue de coupe dans le plan XOZ. B) Représentation du déplacement en XOY de chaque sphère en vue de coupe dans le plan XOZ.	129
3.32	Courbes des contraintes appliquées sur les parois axiales et latérales pour la compression d'empilements avec un gradient de compacité.	130
3.33	Surface de charge de la poudre d'aluminium pour une compacité égale à 0.82. Sur cette surface de charge issue des travaux de Sridhar et al. [Sridhar et Fleck (2000)], nous avons rajouté des points obtenus avec le modèle de contact développé dans la thèse	136
A.1	Courbes contrainte-déformation avec un comportement élastoplastique écrouissable. Ces courbes montrent la décomposition de la déformation en une composante élastique et plastique.	140
A.2	A) Etats de contrainte axisymétriques appliqués à un échantillon cylindrique de poudre. B) Réseau de courbes isodensités d'une poudre de fer déterminé à l'aide d'essais triaxiaux de révolution.	142
A.3	A) Evolution de la surface de plasticité dans l'espace des contraintes principales. On a un incrément de déformation plastique qui est perpendiculaire à la surface de plasticité (i.e., loi d'écoulement associée) B) Evolution de la surface de plasticité dans le plan p-q.	144
A.4	Loi de plastification non associée.	145
B.1	Modélisation éléments finis de la compression d'un pignon de boîte de vitesse en 2D.	148
B.2	A) Distribution de la densité obtenue numériquement à différentes étapes du test de cisaillement pur (1-4). B) Une courbe dans le plan p-q qui représente l'état de contrainte de la zone proche du coin de la pièce (coin formé par le corps et le bord) tout au long du test de cisaillement	149
C.1	Les nœuds appartenant à une même surface répartis dans plusieurs cellules.	154

D.1	L'étude de la réponse mécanique d'un empilement de cylindres déformables comprimés à une compacité de 0.95 en fonction du nombre de particules. Dans cette figure est également inclu le temps de calcul pour chaque empilement comprimé.	156
D.2	Résultats de simulations (contrainte-densité relative) en 2D de particules déformables avec $\mu = 0$ et $\mu = 0.192$ suivant 3 chemins de chargements différents: A) Compression isostatique. B) Compression en matrice. C) Compression uniaxiale.	157
D.3	Agrandissement d'une microstructure de particules 2D déformables comprimées à une densité relative de 0.93. On observe la non-uniformité des contraintes dans l'empilement et les deux types de contact local: plastification et glissement.	158
E.1	Contact entre une sphère et un plan rigide. A) La sphère initiale avant contact et la sphère déformée après contact. B) La relation entre la force(F)-déplacement(h) représente la loi de contact normale.	160
E.2	Etude numérique du rayon de contact et décomposition de celui-ci en deux parties. A) Simulation éléments finis axisymétrique d'un contact normal de sphères identiques. B) La déformation plastique au contact provoque l'augmentation local du rayon de courbure de la sphère au niveau de la surface de contact.	161
E.3	Courbes de la force normale P en fonction de la valeur de l'indentation entre la sphère et le plan. Ces courbes sont obtenues par simulation éléments finis et à partir de différents modèles (Hertz et Vu-Quoc). Le coefficient de restitution obtenu par le modèle de Vu-Quoc e_{V-Q} est très proche de celui réalisé par simulation éléments finis e_{FE}	163
F.1	L'augmentation contrôlée de la compacité d'une zone choisie par l'utilisateur. A gauche de cette figure, la vue de face et de dessus d'un empilement cylindrique creux avant la densification d'un sous-espace. A droite de la figure, les mêmes vues après densification d'une zone spécifique avec des sphères de tailles plus petites de couleur blanche	166
F.2	La réalisation d'un empilement avec des sphères fixées par l'utilisateur. A) Le positionnement des sphères par l'utilisateur au sein du maillage initial. B) L'étape d'éliminations des sphères qui interpénètrent les sphères fixées C) L'étape d'augmentation de la compacité par l'ajout de nouvelles sphères et le repositionnement des sphères éliminées (les sphères placées à cette étape sont de couleur noire)	167
F.3	La réalisation d'un empilement à partir d'une tomographie maillée d'une céramique poreuse. Les porosités macroscopiques sont réalisées à l'aide d'agents porogènes, les porosités microscopiques sont dues à l'agencement des particules entre elles A) Image d'une céramique poreuse réalisée sous le logiciel MGPOST B) Le maillage réalisé à partir de la tomographie d'une céramique poreuse. C) L'empilement de sphères en contact réalisé via le maillage éléments finis de la tomographie.	168

Liste des tableaux

1.1	Propriétés générales des poudres.	11
1.2	Hauteur (h), rayon (R) et la porosité (Φ) pour l'instant initial, les différentes situations critiques et l'instant final dans les cas schématiques d'une compression isostatique et en matrice sur une cellule cubique.	46
3.1	Résultats des différents post-traitements pour les cinq empilements générés via P4 dual-core 2GHz	99
3.2	Résultats caractéristiques des deux échantillons	102
3.3	Empilement avec $R_{min} = 1,7.10^{-2}$: $R_{max} = 3,4.10^{-2}$	105
3.4	Empilement avec $R_{min} = 5,1.10^{-3}$: $R_{max} = 5,1.10^{-2}$	106
3.5	Propriétés matériaux des différentes poudres.	117
B.1	Comparaison entre la densité déterminée expérimentalement et numériquement pour cinq sections de la pièce.	148

Introduction générale

Le succès des techniques de fabrication associées à la Métallurgie des Poudres réside incontestablement dans les taux de productivité à ce jour inégalés lors de la mise en forme de pièces métalliques aux géométries complexes. Ainsi pour certaines catégories de pièces, la métallurgie des poudres se place de plus en plus comme une alternative de qualité à d'autres procédés plus classiques tels que le moulage, le forgeage et l'usinage. En éliminant les reprises d'usinage, la Métallurgie des Poudres permet de réaliser des économies substantielles. Outre un gain de productivité indéniable sur certaines gammes de pièces, ce procédé de fabrication permet également l'élaboration et la mise en œuvre de nouveaux matériaux avec des propriétés physico-chimiques améliorées grâce aux différents mélanges de poudres qu'il est possible de combiner. Les propriétés de service plus performantes (i.e., résistance accrue à la fatigue et aux efforts élevés) découlant de ces nouveaux matériaux donnent également un fort potentiel à ce type de procédés de fabrication. Une autre spécificité de la Métallurgie des Poudres est qu'elle couvre aussi le domaine de la mise en forme des matériaux céramiques dont les carbures. Ces matériaux possèdent à la fois une très grande dureté et de très hautes températures de fusion. Les procédés de fabrication aptes à leurs mises en forme appartiennent également à ce domaine.

Contrairement aux procédés classiques de fabrication de la métallurgie, qui font intervenir la solidification d'un métal fondu ou le retrait de copeaux, la Métallurgie des Poudres traite les étapes de mise en forme à partir de poudre métallique. Cette poudre comprimée au sein d'une matrice adopte la forme souhaitée pour la pièce, elle sera ensuite consolidée en fin de chaîne de fabrication grâce à la phase frittage (i.e., la phase de consolidation du matériau de la pièce par application d'un cycle thermique sur le comprimé).

La phase de frittage, qui est la dernière phase du cycle de fabrication, est nettement plus économique en énergie consommée. Elle diffère de la plupart des techniques métallurgiques, puisqu'elle n'implique jamais la fusion totale du matériau mis en œuvre. En effet, les comprimés sont portés à une température inférieure à la température de fusion totale des particules contrairement au cas de la mise en forme par fonderie. Activant des mécanismes de diffusion à l'état solide ou en présence d'une fraction modérée de phase liquide, l'application de températures moindres présente de surcroît l'avantage de ne pas engendrer des défauts et des phénomènes de ségrégations, comme cela est courant en fonderie traditionnelle.

Tout bien considéré, ce procédé a d'une part un coût de production réduit par le faible nombre d'étapes nécessaires pour la fabrication de pièces finies, tout en assurant des économies de matières premières. D'autre part, il a l'avantage de permettre l'élaboration avec une certaine souplesse d'alliages dotés de propriétés spécifiques. L'ensemble de ces avantages ouvrant à des secteurs d'applications multiples font de la Métallurgie des Poudres un domaine ouvert à la recherche et aux développements technologiques.

Problématique

Bien que devenue un créneau porteur, la Métallurgie de Poudres ne peut encore aujourd'hui s'imposer totalement auprès de tous les industriels, car certaines pièces avant la phase de frittage (i.e., lors la phase de compression de la poudre) présentent des défauts (i.e., des fissures ou une forte hétérogénéité dans la distribution de la matière au sein de la pièce). Ces défauts qui ne pourront être résorbés vont engendrer à l'usage une tenue en service très réduite de la pièce finale, puis occasionner une dégradation prématurée de tout le système mécanique dans lequel elle est insérée.

Encore aujourd'hui, les chercheurs travaillent sur la compréhension de tels phénomènes qui se manifestent durant la phase de compression et à l'optimisation du procédé de fabrication. Ils axent leur recherche sur la compression à haute densité des poudres avec une distribution finale de la densité (i.e., masse de matière présente dans chaque sous-volume de la pièce) la plus homogène possible. L'objectif à terme est d'améliorer la tenue en service des pièces fabriquées et de conquérir des marchés détenus par d'autres procédés de fabrication.

On sait que l'un des avantages de ce procédé de fabrication est la réalisation de grandes variétés d'alliages obtenus en mixant différents types de poudres. La phase de compression revêt là encore un caractère capital dans la mise en forme de ces composites. En effet, pour obtenir un massif homogène à partir de différentes poudres mélangées, il faut que cette phase soit bien maîtrisée. Parmi toutes les phases que compte la métallurgie des poudres, la phase de compression est l'une des plus décisives avec le frittage pour ce qui concerne les propriétés mécaniques de la pièce finale, les dimensions définitives de la pièce, l'apparition de fissures,...

Face à cette réalité, les industriels utilisent encore aujourd'hui les essais expérimentaux et les plans d'expériences pour tenter de résoudre de tels problèmes. Mais toutes ces batteries d'essais sont onéreuses et doivent être sans cesse effectuées pour mettre au point de nouvelles gammes de pièces. Considérant les grandes séries de pièces fabriquées par compression à froid, il est avantageux de pouvoir disposer de modèles numériques capables de supplanter une bonne partie de tous ces essais expérimentaux. Dès lors que la simulation numérique pourra démontrer une grande fiabilité, il sera alors possible d'envisager la résolution de certains des problèmes sus-évoqués et d'optimiser le procédé de fabrication. Précisons toutefois que ces simulations numériques ne seront valides que si elles peuvent reproduire le comportement de la poudre observé lors d'essais déjà réalisés. C'est principalement à cette problématique que sera consacrée cette thèse.

Pour décroquer et élargir l'intérêt des travaux de recherche menés tout au long de cette thèse,

signalons que la stratégie générale développée pour notre application sur les poudres métalliques ductiles peut s'appliquer à d'autres types de poudres. En effet, les champs d'applications qu'il est intéressant de viser sont entre autres les poudres pharmaceutiques qui représentent un marché considérable et les céramiques qui connaissent un intérêt général grandissant notamment dans les biomatériaux.

Objectifs et plan de thèse

Pour comprendre et prédire les phénomènes activés et problèmes rencontrés, lors de la phase de compression, de multiples recherches expérimentales et numériques ont été conduites. Cette littérature si dense ne saurait être parcourue à fleur de texte, mais mérite une réflexion soutenue. Dans le **Chapitre 1**, nous ferons donc une halte en proposant aux lecteurs de découvrir de façon détaillée le déroulement des deux premières phases du procédé de fabrication que sont le remplissage et le transfert. Pour cela, nous nous appuyerons sur les différents résultats numériques existants. Nous aborderons également les généralités de la phase de compression de la poudre en matrice ainsi que les notions théoriques nécessaires à la description du comportement mécanique du matériau granulaire au cours de la densification.

Dans un deuxième temps, nous ferons une analyse critique des différentes approches numériques (continue et discrète) utilisées à ce jour pour modéliser le comportement mécanique de la poudre lors de la densification en matrice. Cette analyse sera faite de façon approfondie en examinant des modèles phénoménologiques macroscopiques (modèles Cam-Clay et Drucker-Prager/Cap) utilisés par l'approche continue, en explorant les deux méthodes numériques que sont la méthode éléments finis multi-particules (MEFMP) et la méthode des éléments discrets (MED) appartenant à l'approche discrète. Qualitativement, ce chapitre 1 prend ainsi la forme d'un état de l'art, ce qui permettra de mettre en avant l'approche numérique par éléments discrets. Une approche utilisée pour étudier par la suite la compression à haute densité des poudres métalliques.

Le **Chapitre 2** est une introduction à la méthode des éléments discrets et au modèle associé développé durant ce travail de thèse à partir de l'expression d'une loi de contact normal. Il débute donc par la présentation de la méthode numérique avec une mise en relief de la notion de volume élémentaire représentatif et de l'importance des conditions initiales de la simulation numérique. Il se poursuit avec la génération d'un empilement de sphères représentatif du milieu granulaire. Dans ce cadre, un nouvel algorithme d'empilements de sphères a été spécialement développé pour cette étude. Il permet d'apprécier l'influence de la texture granulaire sur la réponse mécanique macroscopique du tas de poudre lors de la phase de compression. Cet algorithme a été également motivé par les attentes des chercheurs d'un outil numérique capable de créer rapidement des assemblages de sphères, avec la maîtrise des propriétés telles que la compacité, la taille minimale et maximale des sphères. Des propriétés géométriques définies au sein de ce chapitre

Dans cette partie, nous ne manquerons pas de présenter également la loi de comportement locale adaptée pour modéliser la compression des poudres à haute densité. A ce jour, les lois de contact normal intégrées dans les modèles de contact pour simuler la compression de poudres, ne sont valides que pour des niveaux de compacité assurant l'hypothèse d'indépendance des contacts (soit jusqu'à une compacité égale à 0,85). Pour réaliser notre étude à des valeurs de compacité égale et supérieures à 0,9, une nouvelle loi de contact normal sera utilisée. Elle est établie sur la base de deux variables locales, respectivement l'interpénétration (h) entre deux sphères et la densité locale (ρ_{local}) pour chaque sphère. Cette nouvelle loi de contact développée au cours des travaux de Harthong est basée sur une

analyse éléments finis de sphères déformables en contact. Cette loi de contact a été implémentée pour la circonstance au sein du code YADE et son adaptation pour les simulations discrètes a été réalisée au cours de ce travail de thèse.

Le **Chapitre 3** réunira tous les éléments de validation et les résultats issus du modèle numérique. Tout d'abord des résultats concernant la caractérisation des propriétés géométriques des empilements de sphères générés via l'algorithme géométrique seront présentés. Ils mettront ainsi en lumière la grande diversité morphologique des empilements générés et la grande rapidité d'exécution de l'algorithme. Sans anticiper sur les analyses à venir, ces résultats constituent une des contributions majeures de cette thèse dans le domaine de la représentation tridimensionnelle à grande échelle de milieux granulaires complexes.

La suite de ce chapitre abordera les résultats issus de la modélisation mécanique de la compression des poudres. Pour valider le modèle numérique, différents tests et des comparaisons entre la MED et la MEFMP ont été réalisés. Ces tests traitent de la compression isotrope dans un parallélogramme d'une sphère et de deux sphères. Ces simulations très élémentaires ont permis d'étudier et de valider plus finement les interactions de types sphère-paroi et sphère-sphère.

Pour conclure la section sur la validation du modèle de contact, des comparaisons entre des simulations MED et MEFMP ont été réalisées à une plus grande échelle (i.e., pour des empilements composés de plusieurs sphères) et en faisant varier les paramètres matériaux. Ce faisant, nous n'avons pas éludé le caractère limitatif de ces différentes simulations qui n'intègrent qu'un très faible nombre de particules (32 sphères) quantité non représentative d'un milieu granulaire. De ce fait, l'étape suivante de notre étude a été de tester la robustesse du modèle en procédant à des simulations de compression isotrope et en matrice avec un grand nombre de sphères pour des matériaux tels que le cuivre, l'aluminium, le fer et de comparer les résultats obtenus à des résultats expérimentaux présents dans la littérature.

Cette dernière étape de validation va naturellement déboucher sur une approche prédictive des résultats lors de la compression d'une poudre. Grâce à la fiabilité admise de la simulation numérique discrète, il est désormais possible d'étudier l'évolution de la texture granulaire. Cette étude sera réalisée lors de la compression en matrice d'un assemblage de particules ayant une répartition initiale non homogène de la compacité. Rappelons que le propre de l'approche numérique discrète n'est pas seulement de reproduire un comportement complexe à l'échelle macroscopique, en définissant des interactions simples entre les particules. Mais c'est aussi et surtout une méthode capable de fournir des informations à l'échelle de la microstructure (réarrangement granulaire, déformation volumique, distribution finale de la densité, orientation des contacts,...).

Enfin, nous résumerons les principaux résultats issus de ces trois années de recherche en précisant les limites de notre étude. L'objectif premier de cette recherche consistant à apporter des éléments de contributions à la compréhension d'une des phases du procédé de fabrication, nous ne manquerons pas de lister les différentes perspectives qui découlent du travail réalisé.

Résumé du chapitre: Ce premier chapitre a pour objectif de cadrer et approfondir le contexte de la thèse en présentant les principes et notions associés à la métallurgie des poudres. Les phases amont à la phase de compression sont présentées afin de retracer l'historique qui aboutit à la constitution du tas de poudre. Dans la première partie du chapitre dédié à la compréhension des deux premières phases du procédé de fabrication, une attention constante est portée sur les apports de la simulation numérique. La deuxième partie du chapitre orientée sur la phase de compression présente une rétrospective des deux approches numériques (approche continue et approche discrète) avec leurs méthodes spécifiques de mise en œuvre. Chacune de ces approches et méthodes est ainsi décrite au travers de résultats probants tirés de la littérature. Il ressort finalement sur la base de ces divers résultats que la méthode des éléments discrets semble la mieux adaptée à notre étude de la compression à haute compacité des poudres métalliques.

1.1 Introduction

L'objet du premier chapitre de cette thèse est de présenter le domaine scientifique dans lequel évolue les recherches menées au cours de ces trois années. Comme cela a été souligné dans l'introduction générale, la Métallurgie des Poudres englobe un grand nombre de procédés spécifiques pouvant se combiner, afin de produire des pièces aux caractéristiques variées. Parmi les procédés ayant conduit à de nombreuses études, il convient de citer le procédé de compression isostatique à chaud adapté à la fabrication unitaire de pièces à très forte valeur ajoutée [Larker (1999)]; de même, pour des pièces de petites tailles de type microcomposants présentant des formes complexes, délicates à réaliser par d'autres procédés. Il est alors possible pour les fabriquer de bénéficier du procédé de moulage par injection de poudres métalliques (MIM) [Gélin et Barrière (2004)] qui est adapté aux grandes séries. Il s'agit là encore concrètement d'une valeur ajoutée inhérente aux potentiels de ce domaine spécifique de la mise en forme. Les combinaisons de procédés ou les phases mises en œuvre par la Métallurgie des Poudres impliquent systématiquement au sein des gammes de fabrication l'application d'un cycle

de température. En rapport direct avec les gammes de type compression puis frittage, cette thèse est dédiée à la compréhension des phénomènes mis en jeu lors de la seule phase de compression à froid des poudres. Notre étude est ainsi centrée sur le comportement mécanique d'un milieu discret déformé de manière quasi-statique à température ambiante.

Dans ce cadre, il est essentiel de connaître les principes de caractérisation et de modélisation propres au domaine de la compression des poudres; ainsi que les notions mécaniques et matériaux qui y sont associées. Pour expliquer ces nombreux concepts, nous les présenterons au fur et à mesure de la description du procédé jusqu'à la phase d'éjection. Ainsi les différentes sections de ce chapitre livreront les informations essentielles sur: la poudre métallique, le remplissage de la matrice, le transfert de la poudre et la phase de compression et d'éjection.

Considérant la complexité des processus, on se doit d'explicitier à travers les détails et les informations données sur cette technique de fabrication, les différents phénomènes physiques qui sont liés à ce procédé. Une fois l'environnement industriel établi et le cadre scientifique positionné, sera alors abordée la problématique de notre recherche. Celle-ci vise à obtenir une meilleure compréhension de la compression des poudres via l'outil de simulation numérique, tout en cherchant à améliorer les modèles mécaniques qui se rapportent aux phénomènes activés par ce procédé de fabrication. Différents modèles que l'on retrouve répertoriés dans deux grandes approches numériques (l'approche continue et l'approche discrète) seront présentés et détaillés en toute fin de chapitre. Il est un fait avéré que la simulation de la compression à froid d'une pièce industrielle représente un enjeu économique important. En effet, des simulations numériques fiables apporteraient des gains de temps pour aboutir à la mise au point d'une gamme de fabrication. Par conséquent, produire des résultats de simulations identiques aux mesures expérimentales obtenues directement sur des presses industrielles instrumentées, est le résultat vers lequel la communauté scientifique veut tendre le plus efficacement possible. L'objectif affiché consiste à prédire et à améliorer le comportement mécanique des pièces fabriquées.

1.2 Les différentes phases de la métallurgie des poudres

Dans un premier temps pour obtenir une pièce de qualité, la poudre doit être sélectionnée en tenant compte de la distribution de taille et de la forme des grains qui sont des paramètres intrinsèques à la technique d'obtention de la poudre (voir Sec. 1.3). Puis des nuances variées de poudres, et éventuellement des liants ou des lubrifiants, sont mixés en différentes proportions dans un mélangeur pour obtenir la composition chimique souhaitée (voir Fig. 1.1).

Ensuite ce mélange est acheminé au sein d'une matrice en partant d'un réservoir et en passant au travers d'un sabot (voir Fig. 1.2). Cette action de remplissage de la matrice est considérée comme la première phase du procédé de fabrication. Tout comme les autres phases du procédé de fabrication, elle a fait l'objet de recherches intensives dans le but d'être appréhendée et optimisée (voir Sec. 1.4). Grâce à ces différentes recherches, il a été notamment possible d'adapter des systèmes de remplissage optimaux de la matrice par un seul passage du sabot durant lequel la poudre est déposée dans la matrice puis arasée. La phase suivante, nommée transfert de la poudre, consiste à mettre en position les différents poinçons (voir Fig. 1.2), afin d'adopter une forme homothétique à la pièce finale. Cette étape est délicate dans la mesure où les cinématiques respectives des poinçons inférieurs et supérieurs doivent être coordonnées pour que le volume dans lequel la poudre est circonscrite reste constant durant toute cette phase. Le transfert sert aussi à ce que le réarrangement des grains de poudres

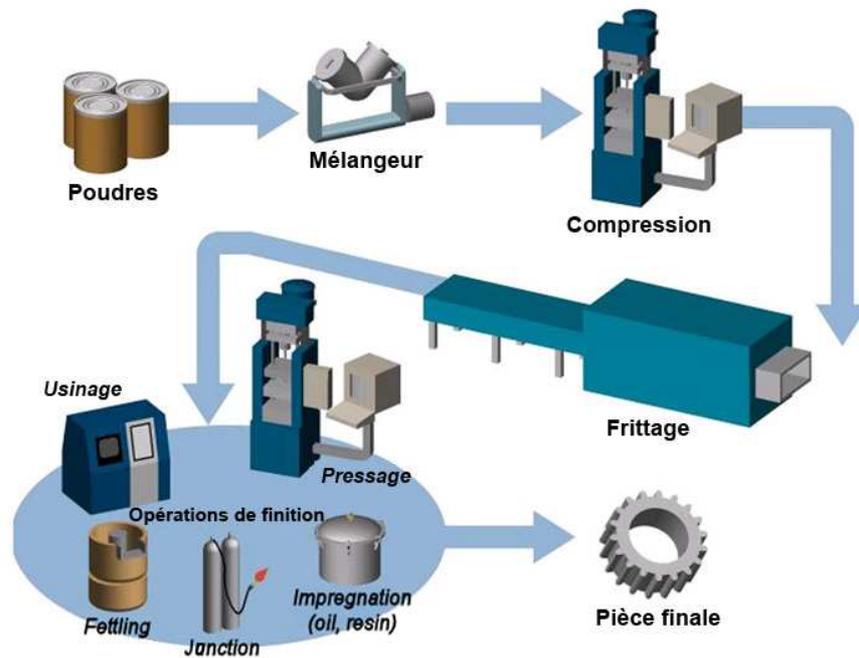


FIG. 1.1 – Le procédé de fabrication complet de la métallurgie des poudres.

s'opère de sorte que la matrice, de forme souvent complexe, soit complètement remplie. Les forts taux de cisaillement intervenant au sein du massif de poudre encore à l'état pulvérulent pendant cette phase peuvent augmenter les gradients spatiaux de distribution de la densité dans certains cas.

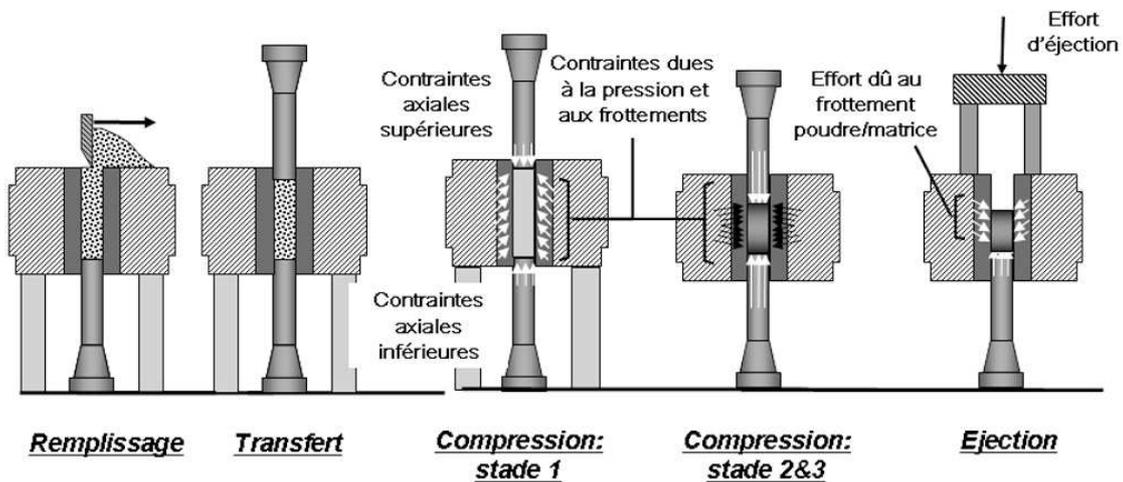


FIG. 1.2 – Les différentes phases d'obtention du comprimé.

Suite à cette phase de transfert, intervient la phase de compression de la poudre avec le rapprochement des différents poinçons (voir Fig. 1.2). En fin de compression, une forte diminution du volume circonscrit par l'outillage est atteinte comparativement au volume initial en fin de phase de transfert. Au tout début de la phase de compression, la poudre peut encore s'écouler et les grains se réarrangent assez librement car le volume de poudre présente encore un caractère pulvérulent (stade 1). Progressivement, ces réarrangements deviennent plus difficiles et les formations de groupements de

grains voisins se stabilisent. Ensuite, la densification continue jusqu'à ce que les particules se soient plastifiées dans le cas des poudres métalliques (stade 2 et 3). Si le taux de densification au cours cette étape est suffisant, un massif poreux présentant une certaine cohésion mécanique est formé. La poudre, ayant atteint cet état sera dénommée tout au long de cette thèse par les termes: pièce à vert ou comprimé. Cette pièce à vert a la forme désirée et possède des propriétés de tenue mécanique de valeurs faibles. Ces propriétés restent subordonnées à la valeur finale moyenne de la densité relative¹ et des évolutions de la distribution de la densité au sein de la pièce.

L'avant dernière phase du procédé est l'éjection de la pièce de la matrice (voir Fig. 1.2). Cette phase est également délicate à mener, car elle peut conduire à la fissuration de la pièce. Les paramètres favorables à la fissuration sont essentiellement: certains défauts, des efforts trop importants ou mal répartis à la surface de la pièce, un frottement entre la pièce et les outils trop élevé. Une fois éjectée de la matrice, la pièce est directement transférée dans un four pour la réalisation de la phase de frittage. Celle-ci consiste à activer thermiquement des mécanismes physico-chimiques au sein de la pièce selon un cycle de température dépendant de la nature chimique du mélange préalablement comprimé. Durant le frittage, la pièce va être transformée en un solide continu en liant les particules entre elles par des phénomènes de diffusion à l'état solide ou liquide aux frontières des grains de poudre. Dans les cas de pièces composées de matériaux céramiques et de métaux durs, les valeurs de compacité moyenne après compression restent faibles et de l'ordre de 0,5. Pour ces pièces, la phase de frittage procède à leur densification et donc à une variation de volume significative par l'intermédiaire de la diminution des porosités. Par ailleurs, les pièces composées par exemple de poudres de fer ductiles ne sont pas sujettes à cette phénoménologie dans la mesure où des densités relatives de l'ordre de 0,95 sont atteintes en fin de compression. Globalement et quel que soit le type de matériaux mis en œuvre, les pièces industrielles présentent une porosité quasiment nulle en fin de frittage. A la fin du frittage, différents types de traitement sont appliqués à la pièce (voir Fig. 1.1) dans le but de maintenir ou d'obtenir les tolérances géométriques désirées pour la pièce finale.

Malgré les améliorations continues apportées à ce procédé de fabrication depuis plusieurs décennies, un certain nombre de problèmes bien connus subsistent. Parmi ces problèmes, citons: la difficulté d'obtenir sans reprise de grandes précisions géométriques de la pièce finie, le contrôle de distributions très homogènes de densité à l'échelle de la pièce à vert et les nécessaires essais effectués pour éviter la formation de fissures. La plupart de ces problèmes trouvent leur source lors de la phase de compression. Grâce à l'outil numérique de plus en plus performant, il est envisageable de mieux appréhender ces problèmes et d'en résoudre un certain nombre; mais les simulations numériques seront valides à la condition de pouvoir reproduire précisément le comportement mécanique observé durant les différents essais déjà réalisés. Dans la section suivante, ce comportement est principalement présenté en partant de la présentation du matériau de base.

1.3 Les poudres métalliques

Les poudres, constituant la matière première utilisée dans la fabrication des pièces mécaniques sont produites par nombre de procédés standards dans le domaine de la physique et de la chimie. Les quatre moyens de production des poudres reposent sur les principes suivants: mécanique, chimique, explosion et atomisation comme cela est expliqué en détail par German [German (1994)]. A l'heure actuelle plus de 80% des poudres métalliques pures ou alliées (alliage de fer, d'aluminium ou de ti-

1. Dans le domaine de la Métallurgie des Poudres, le terme densité relative est relatif au ratio entre la densité en fin de compression et la densité théorique du matériau dense, ce terme inférieur ou égal à l'unité est équivalent à la compacité

tane, bronzes, aciers, ...) commercialisées sont produites par atomisation. Ce succès est dû à la grande productivité des techniques d'atomisation permettant ainsi des économies d'échelle. De plus l'atomisation est le passage obligé pour la fabrication de poudres pré-alliées. Ce procédé de fabrication des poudres consiste en une fracturation d'un liquide en fines gouttelettes, un refroidissement très rapide étant parallèlement imposé. Dans le cas du métal en fusion, la solidification de ces gouttelettes donne naissance aux particules de poudre. Cette fracturation peut se faire par application d'un jet de fluide sous haute pression (eau, huile, gaz) par centrifugation, par un gaz soluble ou par ultrasons. En général les tailles de grains des poudres atomisées suivent une distribution logarithmique normale inférieure à 150 micromètres (μm). La forme géométrique dépend du type d'atomisation. Par exemple, les poudres réalisées avec une atomisation par eau ou par gaz sont respectivement de forme irrégulière ou sphérique (voir FIG. 1.3).

Afin d'appréhender les forts écarts de comportement entre les poudres, il est nécessaire d'identifier des caractéristiques qualitatives ou quantitatives permettant de premières classifications au travers de propriétés intrinsèques :

- La taille moyenne des particules.
- La distribution de taille des particules.
- La morphologie des particules.
- Le frottement inter-particulaire.
- L'écoulement et l'empilement.
- L'agglomération et les effets de la cohésion.
- Le comportement mécanique du matériau constitutif.

Cette liste inclut à la fois les caractéristiques de simples particules et les propriétés de compressibilité d'un volume de poudre à l'échelle macroscopique. La plupart de ces caractéristiques sont directement dépendantes du procédé de fabrication des poudres. La figure 1.3 montre des exemples de formes de particule et le tableau 1.1 expose les valeurs de quelques caractéristiques.

La taille moyenne des particules, la distribution de taille et la morphologie des grains ont une forte influence à la fois sur : la réponse avec frottement, l'assemblage des particules, la compressibilité, la surface de charge et la réponse élastique [Turner et Ashby (1996)]. Cet aspect peut être constaté par exemple avec des poudres de tailles moyennes inférieures à $30\mu m$. En effet, ce type de poudres tend à s'agglomérer et à faire naître des clusters de particules du fait qu'elles sont sujettes à l'influence et l'action de forces attractives de faible intensité [German (1994)] tels que :

- les forces de Van der Waals,
- les charges électrostatiques,
- les liens chimiques,
- les forces magnétiques,
- et les liens capillaires.

Pour sortir de cette globalité et comprendre quelle partie de la réponse du matériau est due respectivement à la particule de poudre, les propriétés de certaines poudres ont été intensivement étudiées dans le monde de la recherche. Les différents résultats caractérisant chacune d'elles serviront de références aux résultats numériques réalisés au cours de cette thèse. Parmi toutes ces poudres, on compte une des poudres métalliques la plus utilisée dans l'industrie qui est la nuance Distaloy

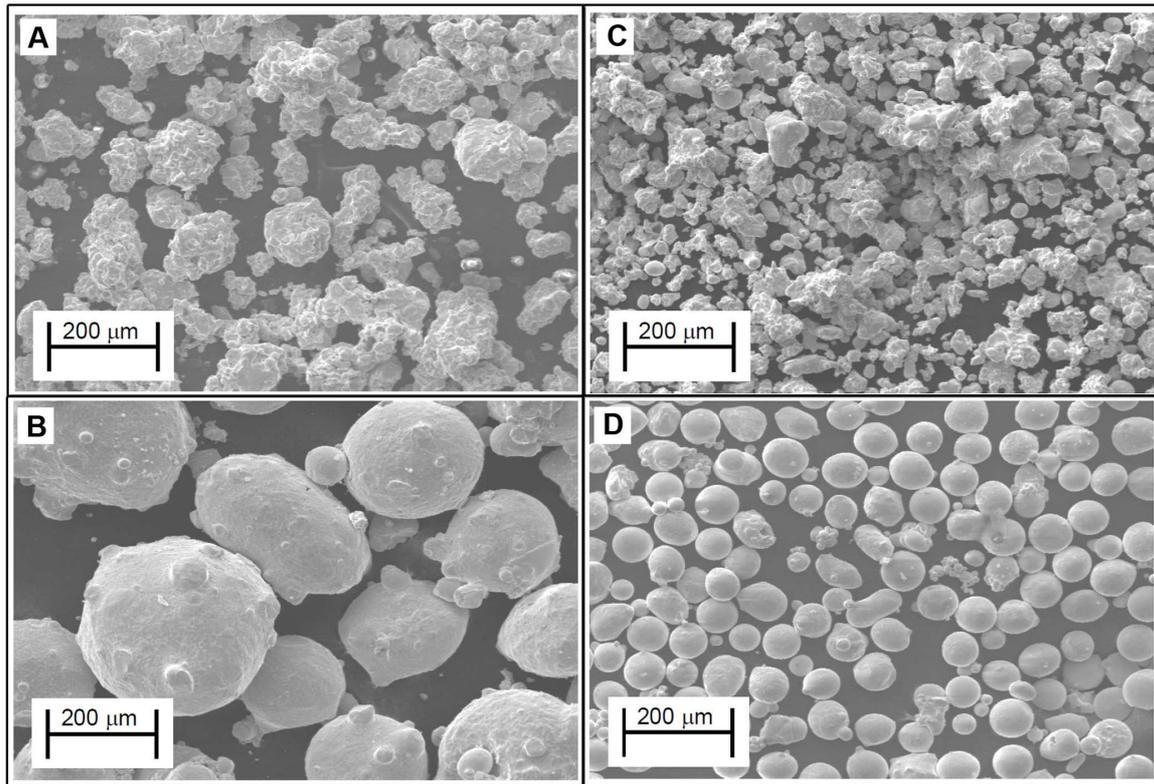


FIG. 1.3 – Morphologies de différents types de poudres métalliques obtenues avec un microscope électronique à balayage. A) Poudre de fer de forme irrégulière (Distalloy AE). B) Poudre de fer de forme régulière (Stainless Steel 316L). C) Poudre de cuivre de forme irrégulière. D) Poudre de cuivre de forme régulière. Images issues des travaux de L.C.R Schneider [Schneider et Cocks (2002)].

AE (Distalloy+add). Il s'agit d'une poudre de fer composée de particules aux formes irrégulières (voir FIG. 1.3-A); cette composition chimique majoritaire étant mélangée avec de faibles quantités de nickel (4%), de cuivre (1,5%), de molybdène (0,5%), de graphite (0,5%). Par ailleurs, ce mélange contient des additifs de types lubrifiants et cires servant spécifiquement à réduire les valeurs de frottement au contact des outils. Cette poudre destinée à devenir un comprimé d'acier est fabriquée par l'entreprise Höganäs avec une atomisation par jet d'eau, elle est utilisée intensivement par l'entreprise Federal Mogul. Ces deux entreprises sont représentatives du secteur de la métallurgie des poudres par la fabrication des poudres d'une part et par la réalisation de pièces mécaniques d'autre part. Dans le domaine de la recherche, cette poudre a été étudiée de manière approfondie par Pavier et Dorémus [Pavier et Dorémus (1999)]. Les pièces mécaniques utilisant ce matériau montrent une compacité et une résistance aux efforts très élevées telles que les pignons de boîte de vitesse et les bielles. D'autres propriétés (compacité de l'empilement lâche, compacité de l'empilement aléatoire, compacité du comprimé à haute pression) concernant cette poudre sont récapitulées dans le tableau 1.1.

Une autre poudre à base de fer (Stainless Steel 316L), caractérisée par des grains de forme sphérique (voir FIG. 1.3-B) nous intéressera dans la présente étude. Elle est obtenue par le biais d'une atomisation par gaz. Cette poudre est constituée de particules de taille moyenne plus grosses que celle de la Distalloy AE. Les propriétés de cette poudre sphérique sans agent lubrifiant étant également présentées dans le tableau 1.1. Le fait de considérer cette deuxième poudre permet d'introduire

TAB. 1.1 – *Propriétés générales des poudres.*

Poudres Propriétés	Distaloy AE	Sphériques en acier	Irrégulières en cuivre	Sphériques en cuivre
Composition et additifs	Diastaloy + (Ni, Cu, C) + lubrifiants	316L stain- less steel	Cuivre pur	Cuivre pur
Taille des parti- cules (μm)	25 à 75	105 à 250	25 à 75	45 à 50
Densité de l'empilement lâche	$3,55 \text{ mg.m}^{-3}$	$3,18 \text{ mg.m}^{-3}$	$3,38 \text{ mg.m}^{-3}$	$4,91 \text{ mg.m}^{-3}$
Densité de l'empilement aléatoire	$4,02 \text{ mg.m}^{-3}$	$4,00 \text{ mg.m}^{-3}$	$4,25 \text{ mg.m}^{-3}$	$4,91 \text{ mg.m}^{-3}$
Densité de l'empilement comprimé	$7,83 \text{ mg.m}^{-3}$	$7,83 \text{ mg.m}^{-3}$	$8,90 \text{ mg.m}^{-3}$	$8,90 \text{ mg.m}^{-3}$

des résultats expérimentaux de compression pour une poudre différente morphologiquement de la Distaloy AE; mais de forme similaire aux particules sphériques utilisées par la méthode des éléments discrets (voir Sec. 2.2).

Par analogie aux deux poudres de fer de forme régulière et irrégulière, deux poudres de cuivre de formes de particules distinctes seront également décrites dans cette thèse (voir Fig. 1.3C-D). Les résultats expérimentaux propres au comportement mécanique de ces quatre types de poudres sont tirés des travaux de Schneider et al. [Schneider et Cocks (2002)]. Les deux natures de poudres, fer et cuivre, ont été choisies pour confirmer l'influence de la morphologie des particules indépendamment cette fois-ci des compositions chimiques. On notera que la nuance de poudre de cuivre associée aux particules de forme sphérique utilisées dans les travaux de Schneider est quasi monodisperse (voir Tab. 1.1). Les résultats expérimentaux issus de cette poudre réunissent donc des conditions de comparaison favorables aux résultats obtenus par modélisation micromécanique utilisant en général des sphères de taille unique.

Une fois présentée la matière première (les différents types de poudres métalliques) utilisée dans le procédé industriel, il convient de s'intéresser plus en détails aux phases du procédé de fabrication. On rappelle que l'objectif des chercheurs, travaillant spécifiquement dans ce domaine, est de déterminer quantitativement les évolutions simultanées entre contraintes et déformations mécaniques au sein de la pièce lors de la phase de compression pour une variété de chemin de chargement donnée. Il s'agit entre autres d'identifier et d'identifier les conditions qui génèrent des imperfections et produisent des pièces défectueuses. Parmi les aspects nécessitant des analyses approfondies, citons par exemple les altérations découlant d'une forte hétérogénéité spatiale de la compacité du milieu granulaire. Cette hétérogénéité est formée après la phase de transfert. Pour se faire, nous allons présenter dans les sections suivantes les phases de transport et de mise en forme de la poudre.

1.4 La phase de remplissage de la matrice et de transfert de la poudre

Dans la plupart des travaux impliquant des modifications numériques de la phase de compression par approche macroscopique, l'hypothèse de densité uniforme après la phase de transfert est très souvent adoptée. Cette hypothèse reposait naguère en grande partie sur les travaux de Scott [Scott (1960)] (voir Sec. 2.4.2) et reflétait un manque de connaissance de la microstructure du milieu granulaire découlant de techniques d'investigations encore approximatives. Aujourd'hui grâce aux techniques expérimentales (imageries, caméra rapide, tomographies, ...) plus évoluées, il est possible de montrer qu'au sein d'un empilement avant la phase de compression existent des régions à forte variation de compacité d'au moins 10% existent. Cette variation entraîne, lors de la phase de compression, une hétérogénéité des champs de pression à la surface des poinçons et parfois une augmentation de la force totale appliquée sur ces mêmes poinçons pour un déplacement donné.

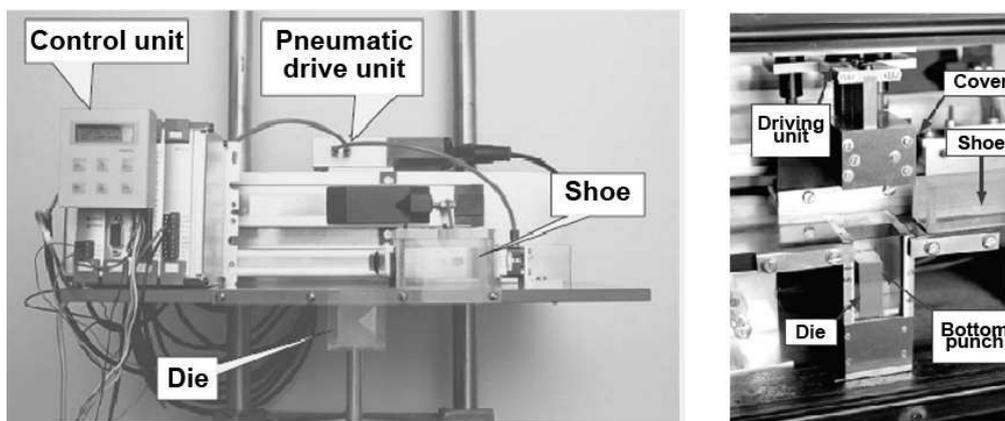


FIG. 1.4 – Remplissage d'une matrice transparente avec un sabot. Le sabot en plexiglas se translate grâce à un actionneur pneumatique linéaire qui est contrôlé par un automate digital. Ce banc d'essai possède également deux types de poinçons placés en dessous et au dessus de la matrice pour réaliser la phase de transfert.

Il est difficile d'appréhender la présence d'hétérogénéité de la répartition de densité au sein d'une matrice avant la phase de compression en sachant que la façon dont s'écoule la poudre change avec l'humidité, la température, la pression de l'air et la présence de phénomènes vibratoires ce qui complexifie encore plus l'exercice. Par conséquent, l'étude du milieu granulaire lors des phases de remplissage et de transfert connaît un nouvel engouement. Ce type d'études ne pouvant plus se faire avec les systèmes connus de mesure d'écoulement de la poudre (l'angle de repos, le taux d'écoulement, l'indice de Hausner,...) [Taberlet (2002)], il a été impératif d'opérer sur un environnement similaire à celui du process industriel. Dans cette optique, une équipe de scientifiques à Leicester dirigée par le Pr. Cocks à cette époque, a mis au point un banc expérimental de remplissage par un sabot similaire aux technologies industrielles [Wu *et al.* (2003a), Wu *et al.* (2003b)]. Ce banc d'essai comprenant une caméra rapide avait pour particularité une matrice et un sabot constitués de parois en plexiglas, des poinçons pouvant se mouvoir de bas en haut pour réaliser la phase de transfert de la poudre (voir Fig. 1.4).

A l'aide de ce dispositif expérimental a été mise en évidence la très forte influence de l'air présent dans la matrice sur la morphologie des écoulements des grains au cours du remplissage et sur la répartition de la compacité dans le milieu granulaire en fin de remplissage. En effet, lorsque le poinçon est dans sa position basse avant le remplissage, la matrice contient son propre volume d'air

ambiant. Lors du remplissage, la poudre composée de particules fines s'écoule comme un fluide. Elle va emprisonner sur de courtes durées une part de ce volume d'air dans des poches qui vont au fur et à mesure du remplissage exercer une pression sur les particules et ainsi perturber les modes de répartition spatiale de la poudre. Une façon d'annihiler l'apparition de ces poches d'air consiste à réaliser un remplissage expérimental en ayant préalablement appliqué le vide au sein des cavités de remplissage. Il en résulte une morphologie radicalement différente des écoulements.

Les figures 1.5a-f présentent des images prises par caméra rapide du remplissage d'une matrice avec une poudre Distaloy AE qui illustrent parfaitement la formation de plusieurs poches d'air confinées par les écoulements. Notamment, les figures 1.5b-c mettent en évidence l'effet de déviation de l'écoulement de la poudre dû à la poche d'air située à proximité de la paroi droite de la matrice. Par la suite, cette poche d'air poursuit son ascension vers la région haute de la matrice en contact avec le sabot, ceci permettant finalement à la poudre de combler progressivement et complètement cette partie de la matrice. Toutefois, sur les figures 1.5d-e, une deuxième poche d'air est créée au niveau de l'angle du poinçon inférieur et empêche la poudre de remplir totalement le volume en cette zone. Sur la dernière image (voir Fig. 1.5-f), il apparaît une cavité persistante non résorbée au sein de l'empilement ce qui induit la présence d'une forte hétérogénéité locale de la compacité dans le milieu granulaire.

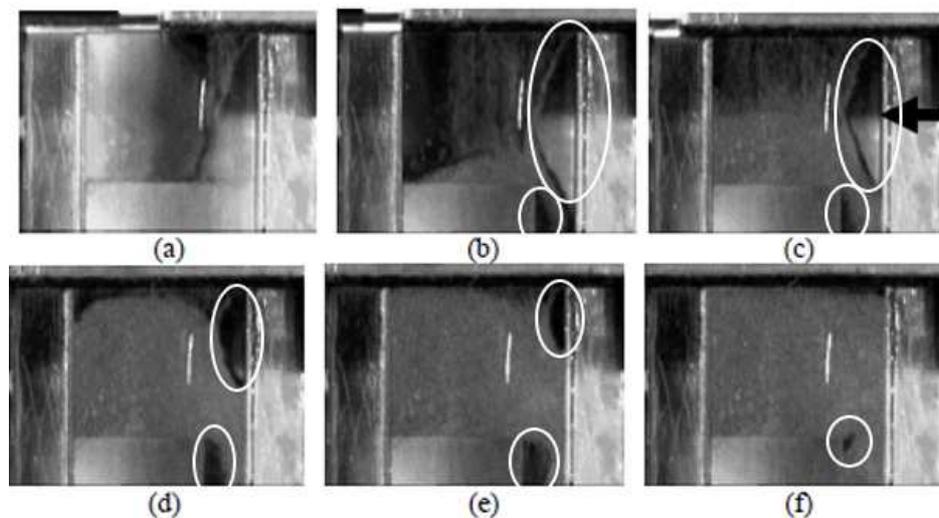


FIG. 1.5 – *Écoulement de la poudre Distaloy AE au sein d'une matrice avec une vitesse du sabot de 200 mm/s de droite à gauche. Les sections entourées en blanc montrent les différentes poches d'air qui sont créées au fur et à mesure du remplissage de la matrice.*

Dans ce champ expérimental, un plan d'expériences a été mené avec d'autres types de poudres pour varier le coefficient de frottement et les valeurs de vitesse de translation variées du sabot, ceci afin de tenter d'établir une relation cohérente entre le système de remplissage et la distribution de la compacité dans la matrice. Les résultats issus du plan d'expériences montrent que l'écoulement de la poudre ne se fait pas au delà d'une certaine vitesse de translation du sabot et que les particules de forme polygonale (rectangulaire, hexagonale) s'écoulent plus faiblement que les particules de forme régulière.

De sorte à circonscrire les influences des paramètres de remplissage, il est aussi intéressant de faire appel à la modélisation numérique. L'intérêt de prédire des aspects comportementaux concerne à la fois l'influence de la forme de la matrice et des conditions d'écoulement, mais également le recueil d'informations complémentaires sur l'évolution de la texture granulaire pendant cette phase de remplissage. Ces modèles numériques nécessitant l'intégration de lois de comportement mécaniques per-

mettent finalement de développer une compréhension approfondie des phénomènes mis en jeu. Pour leur part, les auteurs ayant réalisé l'expérience avec la matrice et le sabot transparents ont modélisé cette expérience avec la méthode des éléments discrets (voir Sec. 2.2). Cette méthode de simulation, qui reflète des caractéristiques essentielles des milieux divisés par rapport à la méthode continue par éléments finis, va permettre de reproduire avec précision le remplissage de la matrice par des grains de forme anguleuse. Nous ne présenterons pas les généralités associées à cette méthode de simulation particulière dans ce chapitre bien qu'elle soit omniprésente tout au long de nos travaux; ainsi des développements exhaustifs concerneront le prochain chapitre. Néanmoins, il convient de rappeler très sommairement que la méthode des éléments discrets est un outil numérique capable de reproduire le comportement global d'un volume de poudre fixé en représentant celui-ci par un ensemble de particules individuelles (sphériques ou polyédriques) interagissant les unes avec les autres (forces de contact) et pouvant subir des actions extérieures (force gravitaire, action de la pression de l'air,...). Gillia, Cocks et Wu ont su adapter pour une configuration bidimensionnelle cette méthode numérique à leur expérience en développant un code capable de reproduire de façon fidèle l'écoulement granulaire présenté ci-dessus par la série des images expérimentales (voir Fig. 1.5). Ce programme spécifique intègre à la fois des particules de forme polyédrique, l'interaction de l'air avec les particules, la gravité et un type d'interaction inter-particulaire réaliste (voir Fig. 1.6) [Wu *et al.* (2003a), Wu *et al.* (2003b)].

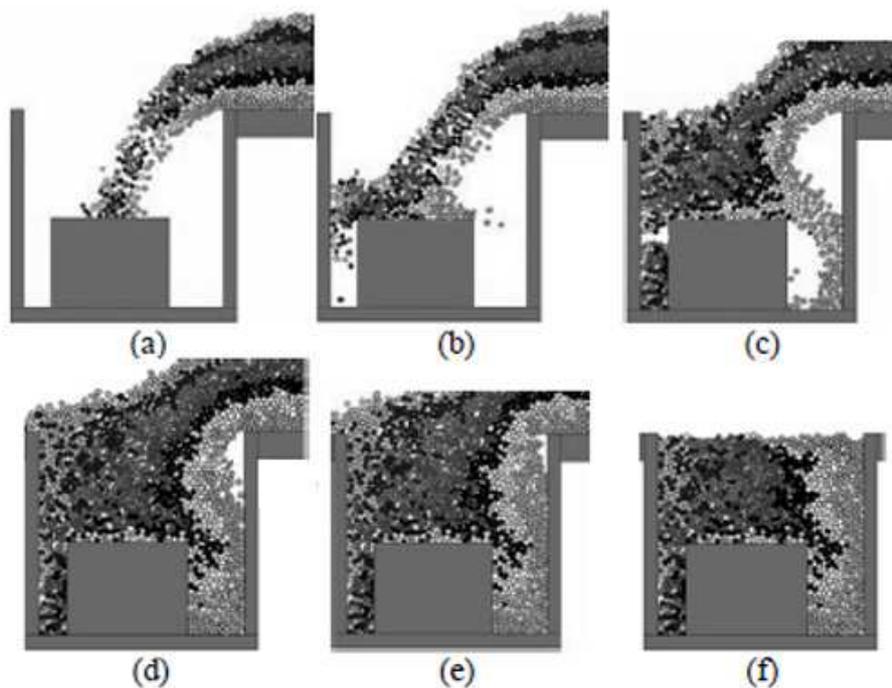


FIG. 1.6 – Simulation avec la méthode des éléments discrets de l'écoulement des poudres au sein d'une matrice avec un sabot se tradant à une vitesse de 200 mm/s. Les différentes poches d'air sont similaires à celles observées à la figure 1.5.

Les figures 1.6 montrent plusieurs étapes simulées de la phase de remplissage de la matrice via la méthode des éléments discrets. Il est possible de conclure sur la base de ces images que les cinématiques des 2.000 particules polygonales permettent qualitativement à bien reproduire la morphologie des écoulements observés avec la caméra rapide (voir Fig. 1.5). L'intérêt d'une telle simulation est de pouvoir également comprendre les mécanismes de construction d'un empilement stabilisé encore très lâche, celui-ci résultant de blocages internes en rotation de particules créées par l'apparition de

voûtes par exemple. Ce phénomène de voûtes est provoqué par le ralentissement de l'écoulement dû à la pression de l'air sur les particules et par la forme très anguleuse de celles-ci. De plus, dans toutes les sections étroites et dans toutes les zones où sont apparues des poches d'air lors du remplissage de très faibles compacités sont créées et maintenues avec l'apparition de phénomène de voûtes entre les particules (voir FIG. 1.7-B). Il est en effet évident que plus les particules présentent des formes anguleuses accentuées, plus le gradient de compacité (i.e., la distribution spatiale de la compacité) au sein de la matrice est accentué. Dans le cas de la poudre Distaloy AE, on peut voir sur la figure 1.7-A issue d'une simulation que la variation spatiale de la compacité est importante. Ce type de phénomène observé également lors de la phase de transfert est néfaste au procédé de fabrication, dans la mesure où il entraîne, en condition initiale à la phase de compression, des hétérogénéités de densité. Ainsi ces hétérogénéités peuvent être la source de l'apparition de défauts et de fissures dans le comprimé qui, une fois apparus, sont difficiles à résorber et annihiler. Pour éviter la formation de forts gradients spatiaux de densité, voire de cavités locales, il est nécessaire de réduire le niveau de frottement entre les particules. Ce niveau de frottement conditionné à la fois par la forme des particules, leurs tailles et la nature physico-chimique de leur surface reste au demeurant, comme les phénomènes d'adhésion entre particules, une propriété mécanique qui est favorable pour la bonne tenue mécanique de la pièce à vert lors de la phase d'éjection.

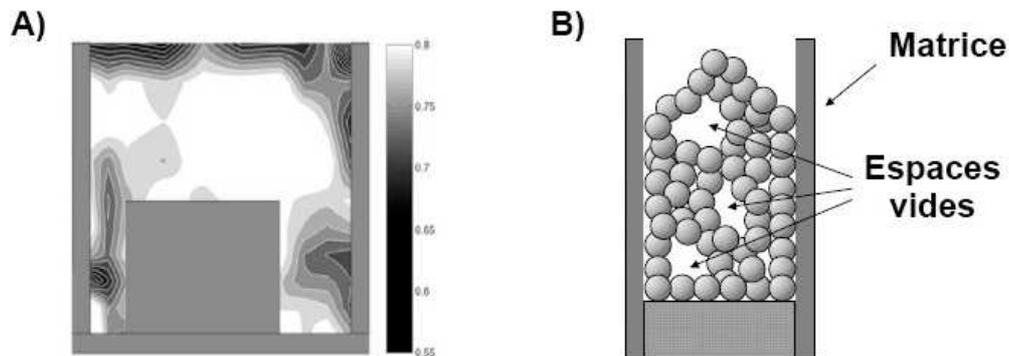


FIG. 1.7 – A) Modélisation par la DEM de la distribution de la compacité en fin de remplissage de la matrice (FIG. 1.6-f) Wu et al. (2003b). La compacité est calculée numériquement en scindant la matrice par une grille puis en calculant la fraction solide en chaque subdivision de cette grille. B) Représentation schématique des espaces vides (pores) créés par le blocage en forme de voûte des particules Schneider (2003).

Pour tenter de corriger ces imperfections, le second aspect à considérer est la phase de transfert de la poudre avant la compression. La phase de transfert implique de grands déplacements au sein du massif de poudre à l'état pulvérulent. Elle peut potentiellement, par arrangement conduire par réarrangement à réduire les espaces de vide et rendre plus homogène la compacité au sein de l'empilement qui reste encore à l'état lâche avant la compression. En effet, la forme du volume occupé par la poudre après le remplissage est grandement modifiée au sein de la matrice par une série de mouvements d'outils. Le but principal de cette manœuvre est de produire une nouvelle forme qui tend à s'approcher de la forme finale de la pièce à vert. Le nombre d'outils intégré dans la matrice dépend de la complexité de la forme de la pièce. Plus la pièce possède d'épaulements (voir annexe B) et plus la poudre présentera de zones cisailées lors de la phase de transfert. La figure 1.8 illustre le mouvement des outils dans le cas d'une pièce de section en H et le phénomène de cisaillement direct appliqué à la poudre par les poinçons. On notera au passage que la création de ce profil nécessite la mise en place de deux types de poinçons indépendants : les poinçons extérieurs sont placés en contact avec la poudre et les poinçons intérieurs vont se translater à l'intérieur de la matrice à la même vitesse (voir FIG. 1.8).

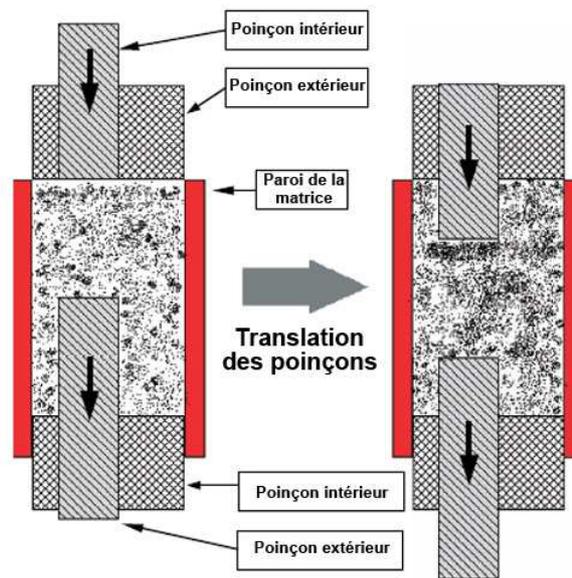


FIG. 1.8 – Illustration du process de transfert de poudre dans la matrice. Pendant le transfert de la poudre, une fois que le poinçon extérieur haut touche la poudre, il est fixé à cette position, tandis que les poinçons intérieurs sont translattés vers le bas à la même vitesse constante pour réaliser le profil en H.

Cet exemple de pièce à profil en H est issu du même banc expérimental que celui présenté en figure 1.4. Encore une fois grâce à ce système ingénieux, l'équipe de recherche de Leicester a pu observer et étudier le réarrangement des grains pendant cette phase préliminaire à la compression.

Les expériences ont également été conduites avec des poudres de granulométrie différente dont la Distaloy AE. Application riche d'enseignements, car il a pu être observé lors du transfert de la poudre, qu'un fort réarrangement se produit. Le phénomène est encore plus accentué lorsque la poudre est fortement irrégulière (i.e., particules de formes polygonales). C'est pour cela que l'empilement de poudre après la phase de transfert est souvent plus dense et la compacité un peu plus homogène comparativement aux caractéristiques de l'empilement en fin de remplissage.

Dans le cadre du transfert, la méthode de simulation par les éléments discrets, qui a fait ses preuves lors de la modélisation de la phase de remplissage, a également été utilisée pour reproduire ce transfert des grains et calculer la répartition de la compacité. La figure 1.9 montre ainsi les évolutions de la distribution de la compacité tout au long de la phase de transfert; ce résultat étant obtenu après application d'un post-traitement à la simulation discrète. Sur cette représentation, la baisse du niveau de la surface libre de poudre résultant du réarrangement des grains, et donc de la diminution du volume occupé par la masse fixée de poudre, est observable. Le transfert a également pour effet de tendre à uniformiser la distribution de la compacité, mais un gradient subsiste malgré tout avant la phase de compaction.

Considérant la figure FIG. 1.9-f), il ressort que la poudre a tendance à être très lâche au voisinage des parois de la matrice et des poinçons. Ce phénomène peut être expliqué par les effets combinés du frottement des grains sur les parois et de la modification générale de forme imposée au massif de

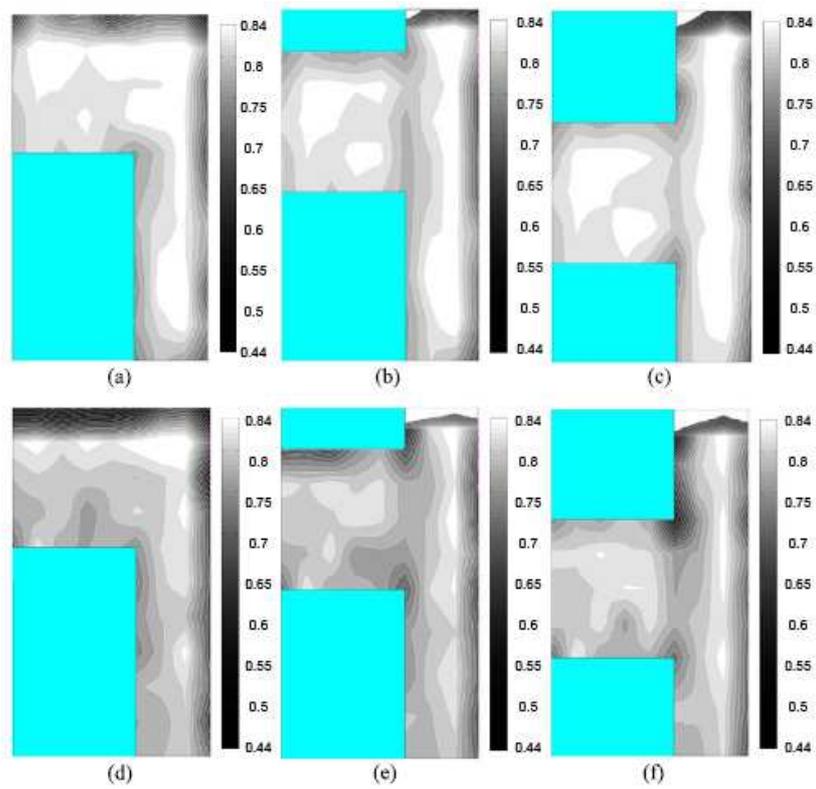


FIG. 1.9 – Evolution de la distribution de la compacité pendant le transfert de poudre Wu et al. (2003b).

poudre, qui produisent des modes de déformation par cisaillement de grandes amplitudes. Au sein de la largeur de ces bandes de cisaillement, les particules subissent de grands déplacements relatifs et de grandes amplitudes de rotation individuelle qui ont tendance à construire des zones à empilements très lâches. Ce phénomène néfaste de bandes de cisaillement, formateur de forts gradients locaux de densité, est bien connu et pose des problèmes lors de la phase de compression que nous allons décrire dans la section suivante.

1.5 La phase de la compression à froid de la poudre

1.5.1 Le principe de densification

Pendant la phase de compression, la poudre se densifie sous l'action de trois phénomènes. Ces trois phénomènes physiques complexes permettent de scinder la phase de compression en trois stades ordonnés (voir Fig. 1.10):

1. Le réarrangement des grains se traduit par des déplacements solides accompagnés d'éventuelles fracturations ou fragmentations (stade 0).
2. La déformation locale des grains se traduit par un écrasement en surface des grains suite à l'augmentation de la compacité. Cette déformation locale des grains est visible sur les zones de contact et entraîne l'apparition de surfaces planes sur les grains (stade 1).
3. La déformation plastique de grande amplitude de chaque grain qui intervient pour les hautes compacités atteintes par les poudres métalliques ductiles (stade 2).

Nous allons développer ces trois définitions, afin de comprendre l'impact de ces trois stades sur la phase de compression et les phénomènes physiques associés.

1.5.1.1 Le réarrangement

Il intervient principalement aux premiers instants de la compression, sous faibles contraintes axiales (inférieures à quelques dizaines de MPa). Ce stade 0 de la densification présent pour tous les types de poudre est plus ou moins important suivant : la morphologie des grains (de forme sphérique, spongieuse, anguleuse, qui peut être granulée ou non), la distribution granulométrique, le matériau constitutif des grains et la quantité de lubrifiant utilisée. Dans la plupart des cas, le réarrangement est facilité par la présence de grains aux formes arrondies. Les grains sphériques possèdent en effet un meilleur potentiel de mobilité au sein de l'empilement que les grains spongieux ou anguleux. Sous faible contrainte, le réseau de canaux et de poches (i.e., les pores définis par des espaces vides présents dans le milieu granulaire non densifié) formé par le squelette des particules de taille importante accorde aux plus petites particules une liberté de déplacement et donc de réarrangement. En conséquence, une poudre de distribution granulométrique assez large possède une meilleure caractéristique de densification par réarrangement sous faible contrainte. Parallèlement, les déplacements et la réorganisation des grains sont limités par l'effet néfaste des contacts frottants qui peut être toutefois réduit par l'emploi d'un lubrifiant. En ce qui concerne les poudres granulées, le réarrangement des granules est rapidement suivi par leurs propres déformations ou ruptures résultants du réarrangement des particules elles-mêmes.

1.5.1.2 Déformations locales et plastiques des grains

Lorsque les contraintes appliquées deviennent suffisamment importantes, les grains dont les déplacements solides sont progressivement bloqués subissent des déformations élastiques et plastiques. Notons que les modes de chargement et les contraintes exercés sur chaque grain individuel sont bien plus complexes que les sollicitations macroscopiques appliquées au comprimé par le biais des poinçons dans un contexte industriel ou par le biais de cellules calibrées dans un contexte de recherche. Les déformations élastiques de faibles amplitudes contribuent de fait assez peu à la densification de la masse totale de poudre. L'amplitude de ces déformations élastiques augmente avec la limite d'élasticité du matériau constitutif et inversement la limite élastique fixée diminue avec la valeur du module élastique. Elles sont pour l'essentiel restituées au cours de l'éjection du comprimé. Ces déformations accumulées dans les grains sont en conséquence associées à l'effet de rebond élastique du comprimé lors de l'éjection et provoquent aussi des champs hétérogènes de contraintes au sein du comprimé qu'il convient de maîtriser absolument.

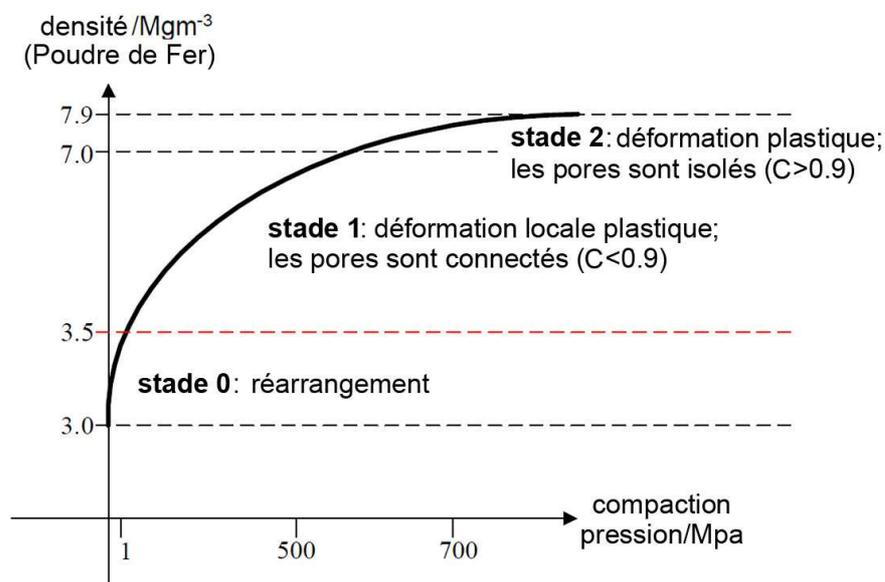


FIG. 1.10 – Vue schématique des trois stades de la phase de la compression pour une poudre de fer.

Par ailleurs, l'aptitude des grains à se déformer plastiquement va permettre leurs indentations mutuelles et leurs enchevêtrements, entraînant une diminution de la porosité inter-granulaire dans le cas de grains spongieux. Ce mécanisme de plastification est le principal facteur fixant les capacités de densification des poudres ductiles. Lors de la densification, la déformation des grains permet leur rapprochement, entraînant ainsi une augmentation du nombre de contacts et corollairement de leurs surfaces de contact (stade 1). Les efforts peuvent alors se répartir progressivement sur des grains de plus en plus écrouis comme dans le cadre des poudres de fer. Ces deux phénomènes (multiplication du nombre de contacts et écrouissage) ont pour effet de ralentir la densification si les efforts macroscopiques imposés ne croissent pas de manière exponentielle et font préférer des poudres non alliées et recuites lorsque des hautes densités relatives sont recherchées.

La figure 1.10 illustre la densification d'une poudre de fer de densité théorique (i.e., la densité sans porosité) égale à $7,9\text{mg.m}^{-3}$. Au cours de la compression lorsque la densité vaut $6,17\text{mg.m}^{-3}$ (compacité $C < 0,9$) les particules sont pratiquement bloquées et les pores les plus volumineux sont

plus petits que les plus grandes tailles de particules (stade 1). A une compacité supérieure à 0,9 (densité proche de $7,4 \text{ mg.m}^{-3}$ et une porosité $\Phi < 0,1$) tous les pores sont plus petits que les plus petites particules initiales. Les déformations plastiques des grains sont mises en évidence par une augmentation de leur dureté qui peut atteindre 40% de la valeur initiale pour une pression isotrope de 500 MPa pour une poudre de fer.

Le mécanisme de déformation plastique des grains (stade 2) n'intervient cependant que sous de fortes contraintes appliquées comparativement à la limite d'élasticité du matériau constitutif de la poudre, ce matériau étant plastiquement déformable (plomb, cuivre, fer, ...). Les trois stades mis en évidence dans le cadre de la compression d'une poudre de fer (voir Fig. 1.10) sont présents pour tous les modes de compression.

1.5.1.3 Chemins de chargement

Un chemin de chargement décrit entièrement l'historique des contraintes et des déformations que le comprimé de poudre subit durant l'ensemble de la phase de compression. L'intérêt de connaître ces chemins de chargement est capital, car il a été démontré toute l'influence de cet historique sur le comportement de la poudre lors de la densification. Comme déjà vu précédemment, si les particules de poudre ont subi une plastification (i.e., un écrouissage des grains), il faudra produire des contraintes plus élevées pour poursuivre l'augmentation de la densité. Les types de chemins de chargement appliqués aux poudres dans le cadre d'une activité de recherche ou dans un contexte industriel exhibent des différences primitives tenant à la nature des objectifs visés.

En effet, l'objectif des manufacturiers de la métallurgie des poudres est de produire des pièces le plus rapidement possible à moindre coût par des techniques simples de compression. La caractérisation des propriétés spécifiques du matériau doit être validée de façon directe et très rapide pour acquérir un meilleur contrôle de la fabrication de centaines de milliers de pièces. Donc la plupart des procédés de fabrication utilisent la compression en matrice multi-poinçons indépendants à double effets placés en dessous et au dessus de la matrice pour comprimer le matériau. Les pistons sont en outre positionnés coaxialement dans le but d'arriver à une densification homogène afin de réduire les contraintes résiduelles au sein du comprimé. Mais de plus en plus, face aux contraintes économiques, les industriels veulent comprendre tous les phénomènes présents (i.e., comprendre la physique présente) lors de la phase de compression. Leur but est d'optimiser cette dernière de sorte à obtenir moins de rebuts, d'avoir des pièces plus résistantes mécaniquement et de réduire le nombre d'opérations nécessaires à l'ensemble de la chaîne de fabrication.

Concernant l'activité de recherche en laboratoire, il s'agit plutôt de développer des techniques et des dispositifs de compression (cellules triaxiales de révolution, ...) dédiés à l'application d'un chemin de chargement le plus homogène possible à l'ensemble de l'échantillon. Cette pratique expérimentale est classique dès lors qu'il s'agit de mener l'élaboration de lois de comportement. Le contrôle de la compression des poudres par des chemins homogènes est essentiel pour déterminer et identifier les propriétés spécifiques du matériau sous charges. Dans la plupart des tests de compression (isostatique, triaxial de révolution, en matrice, ...), les états de contrainte et de déformation appliqués à l'échantillon de laboratoire sont généralement axisymétriques comme schématisé à la figure 1.11. La réponse mécanique du matériau est mesurée en terme de contrainte (σ) et de déformation (ϵ) dans la direction radiale et axiale. En suivant la convention de signe utilisée dans la métallurgie des poudres,

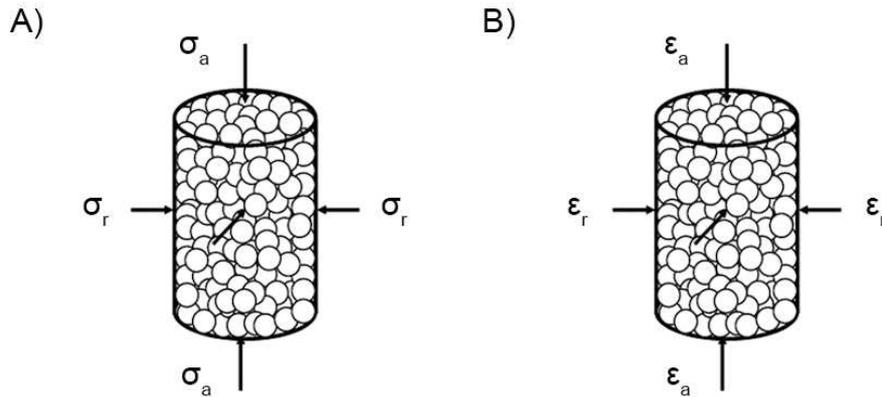


FIG. 1.11 – Composante axiale et radiale: (A) les contraintes et (B) les déformations sur un comprimé de poudre de forme axisymétrique.

la contrainte compressive est prise comme étant positive. De plus, les déformations sont assurées d'être positives lors de la réduction du diamètre et de la hauteur de l'échantillon. Cette convention des signes sera celle utilisée tout au long de cette thèse.

Les différents chemins de chargement peuvent être représentés dans le plan p-q (l'espace des contraintes) (i.e., le plan de contrainte déviatoire-contrainte moyenne) comme présenté à la figure 1.12. Au sein de cette dissertation un bon nombre de chemins de chargement seront représentés dans le plan p-q, avec p qui est la contrainte moyenne ou hydrostatique et q qui représente la contrainte déviatoire. Dans le cas d'un chargement dans une cellule triaxiale (voir FIG. 1.11), la contrainte moyenne (p) et la contrainte déviatoire sont données par les deux relations $p = \frac{\sigma_a + 2\sigma_r}{3}$ et $q = \sigma_a - \sigma_r$ où σ_a représente la contrainte axiale et σ_r représente la contrainte radiale. Dès lors que des tracés sont produits dans le plan p-q, il est usuel de considérer une valeur positive de p pour une situation de densification, cette quantité scalaire étant construite avec les composantes tensorielles caractéristiques du chargement imposé. Beaucoup de chercheurs tracent les chemins de chargement dans le plan p-q en prenant q comme la contrainte effective de Von Mises ($q = \sigma_e = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]}$). Dans notre cas nous choisissons de prendre q comme la contrainte déviatoire ce qui présente l'avantage de pouvoir représenter les chargements en traction et en compression.

La figure 1.12 précise que le chargement correspondant à l'axe des ordonnées est associé à une part de cisaillement et que l'axe des abscisses correspond à la seule part isotrope du chargement sur l'échantillon. Tous les types de chargement décrits par la figure 1.12 peuvent être réalisés expérimentalement sur un échantillon cylindrique de poudre (voir FIG. 1.11). Pour la plupart des données expérimentales issues de ces modes de compression, le rapport q/p varie entre 0 (compression isotrope) et 3 (compression uni-axiale). D'autres types de chemin de chargement peuvent être menés, ils concernent par exemple des trajets traction et en cisaillement pure [Pavier (1998)]. Ces deux derniers modes de sollicitation sont des activités marginales dans le cadre de la fabrication de pièces industrielles; ils ont cependant pour intérêt de permettre la calibration de certains modèles numériques.

Comme cela vient d'être présenté, le phénomène de densification de la poudre peut être activé par de très nombreux chemins de chargement. Dans le contexte industriel d'obtention de pièces à vert (i.e., pièce qui n'est pas consolidée), il s'avère que le réel choix de chemin préférentiel est souvent li-

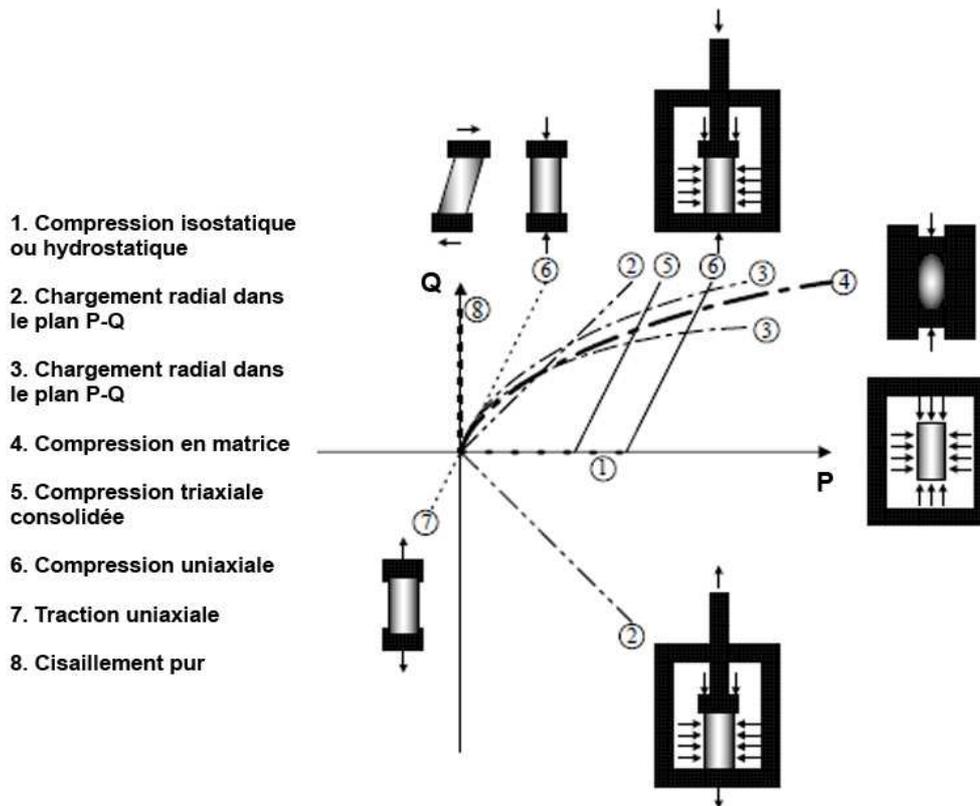


FIG. 1.12 – Chemins de chargement typiques dans le plan p - q (l'espace des contraintes), où q est la contrainte déviatoire et p est la contrainte moyenne ou hydrostatique.

mité pour des questions pratiques; en effet la technologie du procédé de compression fixe à l'avance le chemin moyen qui sera imposé au massif de poudre. La qualité maîtrisée et les propriétés mécaniques de la pièce à vert fournissent des indications préalables sur les propriétés mécaniques et géométriques de la pièce après frittage (i.e., pièce finale). Ce fait souligne les avantages à pouvoir caractériser le comprimé dès la fin de la phase d'éjection.

1.5.2 Propriétés et caractérisation du comprimé à vert

La qualité et les propriétés mécaniques du comprimé après la phase de compression sont directement reliées à la qualité du composant final après frittage. Il est donc important d'éviter l'apparition de défauts comme les microfissures dans le corps à vert qui ne pourront pas être comblées par la phase de frittage. Ces défauts peuvent induire des propriétés du composant final indésirables, comme une mauvaise tenue en service ou une dégradation prématurée de la pièce. La caractérisation du comprimé passe par la connaissance de son comportement élastique et plastique pour prédire et éviter les défauts qui peuvent apparaître pendant la phase de compression ou d'éjection. Au cours de la phase de compression de poudre, le coefficient de frottement présent entre les parois des outillages et les grains génèrent un gradient de compacité et de contraintes (voir Sec. 1.4) qui peuvent affaiblir certaines zones de la pièce. Quand le comprimé est éjecté, des fissures peuvent également se développer à cause de concentrations de contraintes locales mal maîtrisées ou du rebond élastique. Gethin et al. [Gethin *et al.* (1994)] ont montré que la relaxation de la force appliquée entre la phase de compression et d'éjection (i.e., lors de la décharge) est non-élastique dans le cas des céramiques et approximi-

vement élastique pour une variété des poudres métalliques. Pendant l'éjection, le rebond élastique change la géométrie de celle-ci en augmentant son gabarit par rapport aux dimensions du volume allouée à la poudre en fin de course de compression de 2 à 3% pour une poudre de fer. Dans beaucoup de cas, pour compenser l'effet géométrique sur la pièce de ce rebond élastique, les industriels prévoient une compression plus dense de la pièce à vert [Pavier et Dorémus (1999)].

Pour caractériser le comprimé (pièces à vert), il convient de déterminer les propriétés élastiques et plastiques de celui-ci. Si la pièce à vert est isotrope alors la détermination du comportement mécanique peut être limitée à la détermination de la réponse suivant un seul axe. Mais la plupart des pièces industrielles sont anisotropes à cause du procédé de fabrication qui ne suit pas un chemin de chargement hydrostatique pour densifier la poudre. Dans le cas de la compression en matrice, la réduction de volume induite par la densification est entièrement imposée suivant la direction de l'axe vertical des presses. Par contre, si le comprimé est axisymétrique (voir FIG. 1.11) comme une grande majorité des pièces fabriquées par métallurgie des poudres et que le coefficient de frottement entre les grains et la matrice conduit à un effet modéré sur le gradient vertical de densité, alors deux des trois contraintes principales sont égales. Pour identifier pleinement la réponse mécanique d'un tel échantillon, seules des mesures dans deux directions principales sont requises. En pratique tester un échantillon de poudre comprimé dans plusieurs directions reste une étude délicate et coûteuse. Pour ce faire, il y a les essais dit classiques tels que: les essais de traction, de compression uni-axiale, de compression diamétrale et de flexion quatre points qui sont réalisés sur des échantillons pré-compacts difficiles à manipuler. Il y a également des dispositifs permettant des essais à caractère plus industriel comme la compression en matrice instrumentée et la compression isostatique [Dorémus *et al.* (2001)]. Dans la suite de ce chapitre, nous verrons plus en détail quelques techniques existantes pour déterminer le module de Young (E), le coefficient de Poisson (ν), la limite élastique (σ_y) et le comportement plastique du comprimé.

1.5.2.1 Propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des comprimés à vert dépendent généralement de la densité atteinte, du chemin de chargement ayant généré ou pas de l'anisotropie, de la composition chimique et de la morphologie des grains. En ce qui concerne le rebond élastique présent lors de l'éjection de la pièce hors de la matrice, il est un facteur limitant pour l'obtention d'une pièce aux dimensions finales respectées (i.e., une pièce juste aux cotes). Par ailleurs, la détermination des propriétés élastiques est importante pour calibrer et valider les modèles phénoménologiques utilisés dans les codes de calculs. Une gamme variée d'essais expérimentaux est employée pour déterminer la réponse élastique du comprimé. On peut notamment citer les mesures par ultrasons [Coube (1998)]. Il a été démontré que cette technique détecte l'anisotropie des caractéristiques élastiques en mesurant les vitesses de propagation des ondes dans les directions axiale et radiale respectivement.

En ce qui concerne d'autres techniques permettant la mesure directe des réponses élastiques paramètres élastiques, les chercheurs ont mis au point des protocoles expérimentaux pour déterminer ces paramètres par des chargements cycliques suivant les directions axiale et radiale avec une cellule triaxiale [Pavier et Dorémus (1999), Carnavas et Page (2003)] ou par un seul cycle de charge et décharge dans la direction axiale. Pavier et Dorémus [Pavier et Dorémus (1999)] ont identifié pour une poudre Distaloy AE, les paramètres élastiques en fonction de la densité à vert. La base de données expérimentale ainsi constituée a conduit à l'élaboration d'une relation analytique entre certaines propriétés élastiques (le module de Young E et le module de compressibilité K), la densité initiale ρ_0 de remplissage et la densité courante ρ :

$$E = (E_0 + E_1\rho)\exp\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^\alpha \quad (1.1)$$

Avec les paramètres (E_0, E_1) à identifier pour chaque matériau par des opérations de calage des points de mesure expérimentale. Dans le cas de la Distaloy AE, on sait que $E_0 = -28.000\text{MPa}$, $E_1 = 10.020\text{MPa/mg.m}^{-3}$, $\alpha = 6$ et $\rho_0 = 3,04\text{mg.m}^{-3}$.

$$K = (K_0 + K_1\rho)\exp\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^\beta \quad (1.2)$$

Pour la Distaloy AE: $K_0 = -10.500\text{MPa}$, $K_1 = 3.750\text{MPa/mg.m}^{-3}$, $\beta = 6$ et $\rho_0 = 6,8\text{mg.m}^{-3}$. Il est possible de déduire paramètres à partir de E et K comme le coefficient de Poisson ν :

$$\nu = \frac{3K - E}{6K} \quad (1.3)$$

On notera que pour de très fortes pressions de compression de plusieurs centaines de mégapascal la poudre a un comportement élastique similaire à celui d'un matériau complètement dense [Pavier et Dorémus (1999)].

1.5.2.2 Rupture en traction et en compression

La contrainte de rupture en compression de la pièce à vert est définie comme la pression appliquée sur la poudre pour la densifier [German (1997)]. Le seuil de rupture peut être défini comme la contrainte nécessaire pour fissurer la pièce à vert lors d'un essai en compression uni-axiale. La détermination de ce paramètre et de la contrainte de rupture de celle-ci sont des paramètres primordiaux à déterminer dans le but de calibrer les modèles existant comme la droite du plan p-q définie par le critère de Drucker-Prager, un modèle phénoménologique qui sera décrit dans la section 1.6 de cette thèse. Généralement la contrainte de rupture en traction est plus faible que la contrainte de rupture en compression de la pièce à vert.

Elle peut être déterminée par un essai Brésilien [Coube (1998)] (i.e., un essai de traction par fendage d'un échantillon cylindrique). La rupture peut être évaluée par un essai en traction simple comme l'ont démontré Dorémus et al. [Dorémus *et al.* (2001)]. Ils ont trouvé que la contrainte à la rupture augmente tout en restant faible lorsque la densité du comprimé augmente (la cohésion n'exède pas 2 MPa dans le comprimé). Cette dernière valeur semble très fiable même si les essais de traction sont moins reproductibles que ceux réalisés par le test Brésilien. Si on compare les résultats des deux types d'essais pour la valeur de la cohésion dans le comprimé, on remarque que le test Brésilien génère une valeur 10 fois plus importante. La plupart des échantillons qui sont utilisés pour avoir des informations sur la contrainte à la rupture sont axisymétriques et anisotropes; ainsi la définition de la rupture dépend de la direction dans laquelle on la sollicite, alors que dans le test Brésilien, la contrainte à la rupture est déterminée en faisant l'hypothèse que les échantillons ont un comportement isotrope.

Néanmoins le test Brésilien reste très utilisé car il reste dans la pratique un essai assez facile à mener pour générer des modes de traction, pour calibrer les modèles numériques. D'autres méthodes comme les essais de flexion trois ou quatre points sont utilisées pour déterminer la contrainte à la rupture, mais elles ne peuvent être mis en œuvre avec un bon degré de fiabilité que sur des échantillons ayant une section rectangulaire.

1.5.2.3 Le comportement plastique

Ce comportement est prépondérant au cours de la compression. Lors de la densification, la poudre subit un écrouissage : les grains se déforment de façon à s'adapter à la charge appliquée, augmentant ainsi la limite élastique globale (σ_y) à l'échelle du comprimé.

L'initiation du comportement plastique du comprimé est détectée par l'identification des niveaux de contrainte nécessaires pour que les réponses mécaniques deviennent irréversibles en termes de déformation totale. Il convient de souligner que ces niveaux de contraintes sont directement dépendants de la valeur de densité initiale considérée et du chemin de chargement adopté pour produire la poursuite de la densification. Les états de contraintes appliqués, les chemins, sur l'ensemble du cycle compression puis éjection sont complexes. Ces états dépendent du comportement élasto-plastique effectif (i.e., du comportement mécanique) (voir annexe A) de l'amas de poudre qui représente l'évolution de la réponse du matériau dans l'espace des contraintes. Dans ce contexte, la mise en œuvre d'un modèle fiable de type surface de charge permettrait de prédire les initiations de défaut et les gradients des distributions de densité spatiales au sein de la pièce.

Ceci est particulièrement vrai lors de l'éjection où les contraintes appliquées à la pièce à vert occasionnent la plastification de certaines zones jusqu'à l'apparition de fissures. La section 1.6 précisera que le comportement plastique du comprimé peut être déterminé par des essais expérimentaux ou prédit par les modèles numériques qui sont basés sur une hypothèse du comportement élasto-plastique de la masse de poudre comprimée (voir Sec. A).

En ce qui concerne la détermination de l'évolution de la limite d'élastique du matériau (σ_y), l'utilisation du test de dureté (HV) de Vickers, complété de la relation scalaire $HV = 3\sigma_y$ [Ashby et Jones (1998)] sont souvent mis en œuvre.

1.5.2.4 La distribution de densité et les contraintes résiduelles

Pendant les phases de compression et d'éjection, des contraintes résiduelles sont générées dans le comprimé de poudre. Les modèles phénoménologiques macroscopiques peuvent prédire les distributions de densité et de contraintes. La détermination expérimentale de la distribution de la densité et du champ de contraintes est importante pour la validation de ces modèles numériques. La mesure des distributions de densité peut être faite de façon destructive ou non-destructive. Une des techniques non-destructives consiste à analyser des couches métallographiques par imagerie, mais cette méthode prend beaucoup de temps de préparation. A l'opposé, la technique destructive consiste à découper l'échantillon en divisant l'échantillon en plusieurs parties puis à déterminer la densité de chaque partie grâce au principe d'Archimède. Une fois toutes les mesures réalisées, il est alors possible de reconstruire la carte de la distribution de la densité du comprimé. Cette dernière technique est fiable et robuste mais présente le désavantage de nécessiter la destruction de la pièce. Il reste préférable d'opter pour des techniques non-destructives. A cet égard, les récents développements opérés sur les

méthodes avec ultrasons, de résonance et d'imagerie aux rayons X laissent espérer dans un avenir proche des résultats plus fins que ceux obtenus par des techniques destructives. Concernant la mesure et l'acquisition de champs des contraintes résiduelles au sein du comprimé, le niveau de difficulté est supérieur à la mesure de distributions de densité et pour l'heure les moyens techniques tardent à être mis au point pour avoir des résultats satisfaisants.

Dès lors, il est intéressant de se reporter à la section 1.4 de sorte à considérer les apports potentiels de la modélisation par approche discrète pour la détermination de distributions de densité locales et de champs de contraintes résiduelles. Pour répondre à cette interrogation, nous allons dès la prochaine section présenter les approches numériques généralement utilisées dont l'approche discrète. Afin de détailler les modèles de comportement exploités par les deux approches numériques considérées, des cas concrets d'application tirés de la littérature seront également commentés au sein de ce chapitre ou encore dans les annexes.

1.6 La modélisation de la compression de poudres par l'approche continue

Les industries de la métallurgie des poudres s'intéressent fortement à l'outil numérique potentiellement capable de réduire les tests très coûteux sur ligne de production. Les adeptes de la modélisation ont pour objectifs attendus la détermination et le contrôle des propriétés mécaniques de la pièce finale dont notamment l'identification des valeurs de paramètre de pilotage du procédé. De sorte à satisfaire toutes les attentes en ce domaine, il demeure encore des améliorations à apporter. Les simulations entreprises doivent prédire les propriétés (densité, limite élastique, ...) du composant, à cet égard l'annexe B) expose au travers d'un exemple des éléments de savoir faire actuels en termes de modélisation numérique.

Un nombre restreint d'essais expérimentaux restera toujours requis pour caractériser précisément les matériaux puis calibrer les paramètres des modèles de comportement utilisés dans les codes éléments finis. Dans un avenir proche, il semble raisonnable de penser que l'accroissement des connaissances sur les matériaux et les progrès de la modélisation réduiront encore le nombre des essais nécessaire à une bonne calibration.

Concernant la modélisation de la phase de compression, il est important de tenir compte dans la mesure du possible des caractéristiques du massif de poudre inhérentes aux phases précédentes, ces caractéristiques ayant des influences sur la réponse du matériau pendant la phase de compression comme nous l'avons vu dans les sections 1.4 et 1.5. En partant de ce postulat, il existe alors plusieurs voies pour modéliser la compression de la poudre : l'approche par la simulation discrète (voir Sec. 1.7) basée sur l'hypothèse des milieux continus. L'approche continue, intégrée à la méthode éléments finis, consiste à reproduire le comportement de la poudre par mise en œuvre de lois phénoménologiques dont les fondements sont rappelés en annexe A. Cette approche reste la plus employée dans le monde industriel.

1.6.1 Les modèles de plasticité incrémentaux

La plupart des modèles de comportement sont basés sur la théorie incrémentale de la plasticité pour laquelle les lois de comportement et la notion de surface de plasticité servent à décrire la réponse

macroscopique du matériau (voir annexe A). Ces lois phénoménologiques peuvent être établies par formalisme mathématique suite à l'analyse des résultats expérimentaux ou encore en s'inspirant des résultats de la modélisation micromécanique par approche discrète. Elles sont souvent exprimées par des fonctions quadratiques de la contrainte moyenne ($p = \frac{\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3}{3}$), de la contrainte effective de Von Mises et prennent une forme de type elliptique.

Brown et Abou-Chedid [Brown et Abou-Chedid (1992)] montrent que beaucoup de critères plastiques sont inadaptés pour mener des applications directes à la compression des poudres. Dans la littérature, nous disposons de modèles phénoménologiques élaborés tels que le critère de Hill. Mais celui-ci, dans sa formulation originale, repose sur l'hypothèse d'incompressibilité plastique ce qui conduit à ne pas pouvoir le considérer pour les matériaux granulaire.

Il a fallu ainsi développer des lois phénoménologiques qui prennent en compte la compressibilité du matériau et le paramètre d'écroutissage avec un nombre restreint de paramètres pour favoriser leur implémentation dans des codes de calculs éléments finis. Dans la suite, nous présenterons les deux principaux modèles utilisés par un grand nombre de chercheurs pour prédire la réponse de la poudre en cours de compression.

1.6.1.1 Le modèle Drucker-Prager/Cap

De grandes déformations ont lieu lorsque des poudres métalliques ductiles sont comprimées. En terme d'ordre de grandeur, il est courant que le volume circonscrit par l'outillage en fin de la phase de transfert soit divisé d'un facteur 2 en fin de compression. Ce comportement montre ainsi de premières similarités avec le phénomène de compression des sols. Les modèles empiriques utilisés pour modéliser la réponse des sols sous sollicitations mécaniques ont ainsi été adoptés et modifiés pour prédire la réponse des poudres industrielles. De plus, l'équipement et les différents chemins de chargement utilisés pour déterminer les propriétés des sols sont également utilisés dans le cas des poudres.

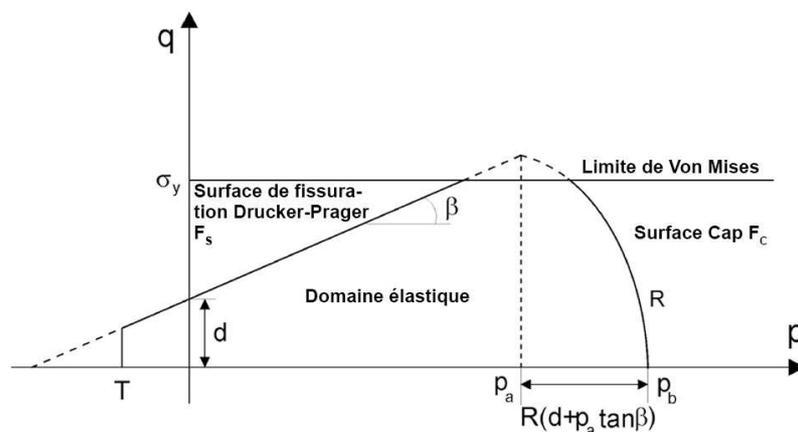


FIG. 1.13 – Modèle modifié de Drucker-Prager/Cap représenté dans le plan p - q avec l'introduction d'une limite en traction T . Le critère de Von Mises n'est pas adapté au comportement des comprimés à vert en cours de compression [Coube (1998)].

Drucker et Prager [Drucker et Prager (1952)] ont étendu le modèle de Mohr-Coulomb écrit en 1776 pour l'interprétation des résultats des tests triaxiaux. L'ensemble du modèle composé essentiellement de deux mécanismes est dénommé Drucker-Prager/Cap (DPC) au sein de la communauté scientifique. Il est depuis des années utilisé pour modéliser le comportement des sols. La surface de plasticité de ce modèle est constituée d'une surface de fissuration F_S (voir Eq. 1.4) et d'une surface elliptique (la surface Cap) F_C (voir Eq. 1.5). Les surfaces F_S et F_C constituent une surface de plasticité combinée de forme convexe dans le plan du premier et du second invariant (i.e., le plan p-q) (voir Fig. 1.13) qui est caractérisée par l'équation:

$$F_S = q - p.\tan(\beta) - d = 0 \quad (1.4)$$

$$F_C = \sqrt{(p - p_a)^2 + Rq^2} - R(d + p_a.\tan(\beta)) = 0 \quad (1.5)$$

Où

$$R = R_1 + R_2 \exp(R_3 \rho) \quad d = d_1 \exp(d_2 \epsilon_v^p) \quad (1.6)$$

Avec les paramètres R l'excentricité de la surface cap, d la contrainte limite de cohésion, β l'angle de la droite de rupture sont constants dans la version originale du modèle. Par ailleurs, la valeur P_a est une fonction de durcissement ou d'écrouissage activée par une partie hydrostatique prépondérante du chargement, cette fonction est donc croissante avec la densité.

Dans la figure 1.13, deux extensions du modèle original sont ainsi incluses: la limite en traction T , qui caractérise la contrainte limite en traction du comprimé à vert et la limite de Von Mises σ_y du matériau dense sans porosité. Pour les états de contrainte situés à l'intérieur de la surface de plasticité, la poudre a un comportement élastique réversible. Si l'état de contrainte atteint une des surfaces de plasticité F_S ou F_C , le massif de poudre se déforme plastiquement. La densité augmente, si l'état de contrainte est sur la surface cap, tandis que la densité décroît par effet de la dilatation quand l'état de contrainte atteint la surface de Drucker-Prager. Le mécanisme modélisé par la droite de Drucker-Prager induit une dilatation du massif de poudre et un radoucissement, sa réponse mécanique, la localisation de la déformation et la fissuration pouvant apparaître par le développement de ce mécanisme.

Par les premières caractéristiques qui viennent d'être décrites, il apparaît une bonne adéquation du modèle de Drucker-Prager/Cap aux traits les plus saillants du comportement observé des comprimés à vert. En effet et à titre d'exemple, un comprimé à vert à base de poudre de fer de densité 7 mg.m^{-3} se rompt en traction pour une contrainte de quelques mégapascal [Alvain (2001)] qui nécessite une pression isotrope p de quelques centaines de mégapascal pour augmenter sa densité [Pavier (1998)]. Par ailleurs, l'amplitude de l'écrouissage décrit par ce modèle peut être particulièrement élevée, la valeur du paramètre P_a en tout début de compression (poudre à l'état pulvérulent) étant de l'ordre d'un mégapascal. Chtourou et al. [Chtourou *et al.* (2002)] ont récemment amélioré le modèle Drucker-Prager/Cap pour les poudres ductiles.

Pour décrire le comportement de la poudre de façon plus réaliste et spécialement concernant la formation de fissures pendant la compression et les phases de décharge et d'éjection, le modèle

Drucker-Prager/Cap a été modifié par Coube et Riedel [Coube et Riedel (2000)]. Il est alors proposé que les paramètres de cohésion d , β et T et transition R dépendent de la densité tout comme p_a . Dans les relations suivantes la densité ρ et la déformation volumique plastique ϵ_v^p sont alternativement utilisées. Elles sont liées par:

$$\epsilon_v^p = \ln\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right) \quad (1.7)$$

Où ρ_0 est la densité initiale après la phase de remplissage et la déformation volumique plastique (ϵ_v^p) est définie positive pendant la compression. La relation de durcissement, l'excentricité de la surface Cap et les paramètres de cohésion sont initialement décrits par les expressions empiriques suivantes:

$$\epsilon_v^p = W(1 - \exp(-c_1 p_a^{c_2})) \quad (1.8)$$

$$\tan(\beta) = b_1 - b_2 \epsilon_v^p \quad (1.9)$$

Les paramètres W , c_1 , c_2 , R_1 , R_2 , R_3 , d_1 , d_2 , b_1 et b_2 sont déterminés par des expériences tels que le test brésilien, la compression simple et les essais triaxiaux. Pour les détails concernant les techniques des mesures, on peut se reporter à un ouvrage [Brewin *et al.* (2008)].

1.6.1.2 Le modèle Cam-Clay

Le second modèle de comportement couramment mis en œuvre pour modéliser le comportement des poudres est le modèle de Cam-Clay qui a aussi pour origine la mécanique des sols. Le modèle original a été développé par Schofield et Wroth [Schofield et Wroth (1968)]. Ce modèle est décrit par une seule surface de plasticité, celle-ci étant régulière. Par la suite, le modèle a été simplifié par Wood [Wood (1990)]. La surface de plasticité est alors décrite par une expression quadratique de la contrainte déviatoire et de la pression moyenne, elle est déplacée de façon à intersecter l'origine comme le présente la figure 1.14.

L'expression de la surface de plasticité pour ce modèle s'écrit alors:

$$p = \frac{\sigma_a + 2\sigma_r}{3} \quad \text{et} \quad q = \sigma_a - \sigma_r \quad (1.10)$$

Où σ_a et σ_r sont respectivement la contrainte axiale et la contrainte radiale.

$$f = \frac{(p(\sigma_{ij}) - p_0)^2}{p_0^2} + \frac{q^2(\sigma_{ij})}{q_0^2} = 1 \quad (1.11)$$

Où p_0 et q_0 sont respectivement la longueur du demi-grand axe et du demi-petit axe de l'ellipse. Les paramètres matériaux (p_0 , q_0) varient en fonction de la densité pour reproduire l'effet de

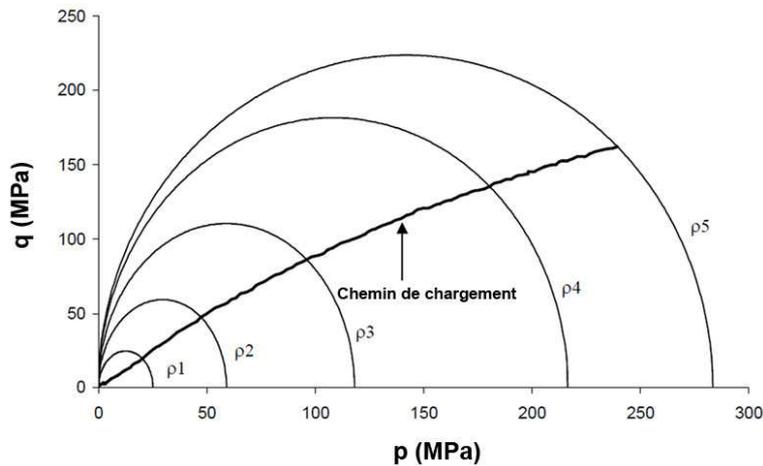


FIG. 1.14 – *Modèle modifié de Cam-Clay représenté dans le plan p-q.*

l'écroûissage sur le comportement de la poudre, cette variation étant décrite par des équations analytiques. Deux équations sont donc requises pour déterminer les paramètres p_0 et q_0 au cours de la densification du comprimé. Elles sont identifiées en insérant l'équation 1.10 dans l'équation 1.11.

Il vient en utilisant l'équation A.16-C:

$$p_0 = k_1 \left(\ln \left(1 - \frac{\rho - \rho_0}{\rho - \rho_{max}} \right) \right)^{k_2} \quad (1.12)$$

$$q_0 = q_{max} \cdot \tanh \left(\frac{k_3 p_0}{q_{max}} \right) \quad (1.13)$$

Les termes k_1 à k_3 sont des constantes issues de l'analyse de résultats expérimentaux, ρ_0 et ρ_{max} sont respectivement la densité théorique initiale et maximale pour la poudre, le paramètre q_{max} correspondant à la contrainte maximale déviatoire du matériau dense.

Comme le précédent modèle, il est nécessaire de calibrer les paramètres à partir des bases de données expérimentales. La figure 1.14 inclut le chemin de chargement typique de la compression en matrice d'un cylindre sans frottement aux parois. Disposant de matrice instrumentée, les caractéristiques de ce chemin peuvent être utilisées pour calibrer ce modèle de plasticité intégré aux simulations éléments finis. Les différentes courbes isodensité représentées par la figure 1.14 sont toutes elliptiques, elles représentent l'écroûissage de la surface charge pour cinq niveaux croissants de densification. Tenant compte des caractéristiques du comportement ainsi modélisé, ce modèle prévoit une absence totale de tenue du comprimé à vert en traction par exemple.

D'autres modèles de comportement peuvent être mis en œuvre pour simuler la compression de poudre, cependant nous avons voulu par cette section présenter les deux modèles les plus connus. Pour avoir des informations complémentaires sur les capacités et les performances de l'approche continue au travers d'un cas concret, il convient de se reporter à l'annexe B.

En conclusion de cette section, les lois phénoménologiques macroscopiques du type Drucker-Prager/Cap et Cam-Clay construites sur la base de la théorie de la plasticité conviennent pour prédire avec une précision correcte la distribution de densité en fin de compression et après éjection [Frachon *et al.* (1999), Frachon *et al.* (2002)]. Par ailleurs, cette approche basée sur la mécanique des milieux continus assure des simulations assez rapides ce qui la positionne comme un bon outil de première analyse [Ariffin *et al.* (1998), Jonsen et Haggblad (2005), Brewin *et al.* (2008)]. Il demeure cependant acquis au sein de la communauté scientifique que ces lois ne peuvent pas modéliser et reproduire la réponse d'un matériau granulaire, surtout quand il s'agit des zones de la pièce concernées par des chemins de chargement complexes développés aussi bien au cours de la compression ou de l'éjection. La seule variable d'état (densité relative) que ces modèles intègrent ne permet pas en tant que variable scalaire la description d'une histoire complexe de chargement. Il est attendu au travers d'une meilleure prise en compte de l'histoire de chargement de pouvoir à la fois améliorer la précision sur les valeurs d'effort simulé et de construire des critères valables pour détecter de manière fiable des conditions initiales à l'apparition de défauts. L'introduction de nouveaux formalismes traduisant des caractéristiques plus anisotropes et permettant de réelles évolutions de la forme de la surface de charge tout en tenant compte des effets variés des chemins de chargement reste donc à développer.

Afin de mieux circonscrire cette complexité induite par la microstructure du matériau, on opte dans cette thèse pour l'approche discrète qui est dédiée à la modélisation du comportement mécanique des matériaux granulaires. Pour se familiariser avec cette méthode numérique, dans la suite de ce chapitre seront présentées deux méthodes discrètes existantes. L'objectif final est de pouvoir sélectionner une des deux méthodes qui sera la mieux adaptée à notre étude.

1.7 La modélisation de la compression de poudres par l'approche discrète

L'étude numérique menée sur la compression des grains pour des valeurs élevées de compacité s'oriente désormais sur une approche discrète. Elle peut fournir les informations nécessaires à la compréhension du comportement mécanique du milieu granulaire pendant la densification. Contrairement à l'approche continue, les procédures par approche discrète abordent une description à l'échelle des grains de poudre ce qui implique des modélisations en termes d'actions inter-particulaires. Initiée par Cundall [Cundall et Strack (1979)], cette approche dédiée à l'échelle des grains peut être utilisée au travers de deux méthodes: la méthode des éléments finis appliquée à un milieu multi-particulaire (MEFMP) [Procopio et Zavaliangos (2005)] et la méthode des éléments discrets (MED) [Cundall et Strack (1979)].

Grâce à ces méthodes de nombreuses études sur la compression de poudres à l'échelle microscopique ont déjà été réalisées fournissant ainsi d'abondantes informations sur la physique prenant place dans l'empilement lors de la densification. Dans cette section, la présentation explicative de ces deux méthodes et des différentes études présentes au sein de la littérature, nous conduira à identifier laquelle de la MEFMP ou de la MED est la méthode la plus adaptée pour notre étude.

En nous reportant aux conclusions de la section précédente, rappelons que l'approche continue utilise des modèles phénoménologiques macroscopiques qui ne peuvent reproduire correctement l'évolution des contraintes et des déformations en fonction de chemins de chargement variés. Il est nécessaire d'enrichir ces modèles macroscopiques ou d'en créer de nouveaux à partir des informations obtenues en simulation numérique discrète.

1.7.1 La méthode des éléments finis multi-particules

Ainsi l'objet de cette partie est de faire un état de l'art approfondi de la méthode des éléments finis multi-particules (MEFMP). Nous verrons en quoi cette approche qui est un couplage de la méthode éléments finis et d'une description géométrique discrète du milieu permet d'accéder de façon précise à toute la complexité des phénomènes physiques qui apparaissent au sein de l'empilement granulaire lors de la compression.

1.7.1.1 Les généralités sur la méthode

La méthode des éléments finis multi-particules est réalisée à partir d'un empilement initial de corpuscules individuels, chacun d'eux étant décrit et composé par un maillage éléments finis. La mise en œuvre de maillages confère à l'approche la capacité de pouvoir simuler précisément l'action d'un contact inter-particulaire. Ainsi la description quantitative de la non-uniformité des contacts comme les évolutions complexes des formes des particules au cours de la densification sont des résultats disponibles après simulation (voir FIG. 1.15). Dans ce type de méthode, les lois de comportement utilisées pour les simulations intègrent directement les propriétés intrinsèques attribuées au matériau constitutif des particules (i.e., module de Young, coefficient de Poisson, coefficient de frottement, limite élastique, écrouissage, ...).

$$\sigma = \sigma_0(\epsilon_{plas})^{\frac{1}{m}} + \sigma_y \quad (\text{loi de comportement élasto-plastique}) \quad (1.14)$$

En d'autres termes, le matériau constitutif des particules peut avoir un comportement de type élasto-plastique (voir Eq. 1.14). De plus, chaque particule subissant individuellement de grandes déformations va avoir des mouvements internes au sein du milieu discret déterminés par l'algorithme de résolution par éléments finis. Les pionniers du développement de cette méthode pour l'étude de la compression des poudres métalliques sont Ransing, Gethin et Lewis [Ransing *et al.* (2000), Gethin *et al.* (2001), Lewis *et al.* (2005)]. Par la suite, cette méthode a été utilisée en 2D par Procopio et Zavaliangos [Procopio et Zavaliangos (2005)]. Depuis, elle est adaptée et utilisée pour la simulation 3D par Chen *et al.* [Chen (2008), Chen *et al.* (2007b)] et d'autres comme Frenning [Frenning (2008)].

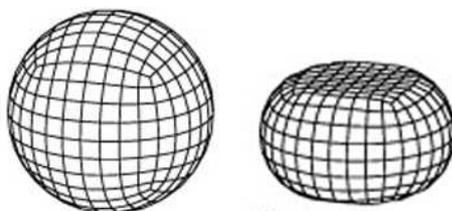


FIG. 1.15 – Particule discrétisée par des éléments finis hexaédriques et utilisée dans les simulations MEFMP pour des grandes déformations.

La méthode des éléments finis multi-particules analyse la compression d'un empilement de grains sous des conditions de chargement quasi-statiques en utilisant un schéma d'intégration expli-

cite présent dans des codes commerciaux tels ABAQUS. Le caractère explicite du schéma de résolution numérique est approprié pour ce type de simulation impliquant un grand nombre de contacts simultanés et de grandes amplitudes de déformation. Plus de détails sur cette méthode peuvent être trouvés en annexe C, dans les travaux de Gethin et al. [Gethin *et al.* (2006), Procopio (2007)] et une introduction plus poussée à la méthode des éléments finis est présentée dans le livre de Munjinza [Munjinza (2004)].

Le challenge à relever lors de la mise en œuvre de cette méthode caractérisée par la prise en compte de particules déformables est de simuler les interactions entre un grand nombre de particules en un temps acceptable. Ce challenge requiert une structure numérique efficace, qui est décrite pour un cas d'étude en 2D à l'annexe D et que nous allons décrire brièvement par la suite dans le cas d'une modélisation 3D des particules dans la suite.

1.7.1.2 L'étude numérique pour la compression de poudres en 3D

L'étude de la compression en 3D des poudres métalliques ductiles par la méthode éléments finis multi-particules a été initiée dans le cadre de simulations numériques tridimensionnelles par la thèse de Chen [Chen (2008), Chen *et al.* (2007b)]. Au cours de ces travaux, Chen a comparé la méthode éléments finis multi-particules et la méthode des éléments discrets, puis surtout la MEFMP et des mesures expérimentales spécifiques dédiées à cette validation. Il a également étudié divers empilements de sphères maillées monodisperses (i.e., de taille unique) et polydisperses (i.e., de tailles différentes) en compression. L'un des objectifs était de trouver le nombre minimum de sphères dans un assemblage qui ait le même comportement mécanique qu'un empilement infiniment plus grand (i.e., la recherche de la taille du Volume Élémentaire Représentatif) sous divers types de sollicitation.

Les travaux de Chen récapitulés dans sa thèse sont très complets dans le domaine étudié, tout comme d'ailleurs les travaux de Procopio et Zavaliangos évoqués dans l'annexe D. Il semble judicieux dans le cadre de cette thèse d'en synthétiser quelques éléments essentiels.

Le comparaison entre la méthode des éléments finis multi-particules en 3D et les résultats expérimentaux est capitale pour la suite de notre étude. En effet la méthode MEFMP, une fois validée à partir de cas expérimentaux discriminants dédiés aux hautes densités relatives (i.e., hautes compacités) en fin de compression, pourra se substituer aux essais expérimentaux.

Suite à l'adaptation de la MEFMP en 3D effectuée à partir du code commercial ABAQUS, la méthode a été validée. Cette validation permet de positionner le travail fait en amont et de connaître le degré de confiance à associer à une telle méthode par rapport aux résultats des mesures expérimentales. Dès lors, plusieurs simulations ont été menées pour répondre à ces différentes interrogations. Les résultats les plus probants portent sur des comparaisons expérimentales de cas de compression en matrice cylindrique sont alors appliqués à des empilements ordonnés ou désordonnés construits avec des billes de plomb.

La démarche générale appliquée aux comparaisons entre MEFMP et résultats expérimentaux

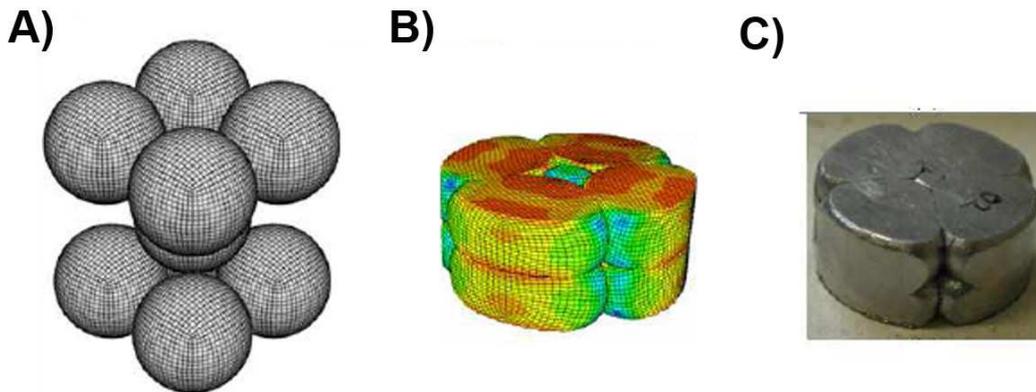


FIG. 1.16 – Comparaison d'une simulation MEFMP avec l'expérience: A) L'empilement numérique cubique centré réalisé avec des sphères maillées de 1.664 éléments finis. B) La déformation obtenue numériquement de l'empilement jusqu'à une compacité de 0,97. C) La déformation obtenue expérimentalement de l'empilement jusqu'à une compacité de 0,97.

est décrite par les étapes ordonnées suivantes :

- Utilisation de cylindres et sphères de dimensions centimétriques issus de moulages avec un unique alliage de plomb.
- Identification précise des caractéristiques matériaux par compression simple de cylindres.
- Mesures expérimentales sur des configurations d'empilement, ces configurations étant précisément et directement reproduites dans l'élaboration des modèles numériques.

Il convient donc de relever que ces étapes ordonnées permettent de déterminer le niveau de précision des simulations dans le sens où aucune imprécision n'est laissée tant sur la topologie exacte de l'empilement que sur les paramètres du comportement du matériau constitutif des sphères. Les valeurs des coefficients de frottement issues de la littérature sont par contre des valeurs fixées directement dans les simulations sans avoir donné lieu à des mesures spécifiques au laboratoire dans le cadre du protocole expérimental précité.

La loi de comportement associée aux sphères de plomb maillées lors de ces simulations, est une loi élasto-plastique (voir Eq. 1.14) avec des valeurs de paramètres matériau associés égaux à : $\sigma_0 = 15,5\text{MPa}$; $m = 2,857$; $\nu = 0,435$, $E = 10\text{GPa}$ et $\sigma_y = 5\text{MPa}$. La première simulation pour la validation de la méthode par rapport aux résultats expérimentaux est réalisée en compression uniaxiale en matrice cylindrique jusqu'à une densité relative de 0,97 sur un empilement cubique centré (CC) de billes de plomb d'un diamètre de 18,48mm (voir Fig. 1.16). Expérimentalement, la compression se fait également en matrice avec un assemblage de sphères géométriquement similaire à l'empilement numérique. Par ailleurs, le protocole expérimental est mené avec des vitesses de déformation faibles en prenant soin d'y intégrer des étapes de relaxation afin d'éviter l'effet visqueux du matériau qui n'intéresse pas l'étude en cours. Les résultats observés, par comparaison entre la simulation numérique et l'expérience, sont principalement l'effort sur le poinçon supérieur en fonction du déplacement de celui-ci (voir Fig. 1.17) et la géométrie de l'empilement après compression (voir Fig. 1.16-C).

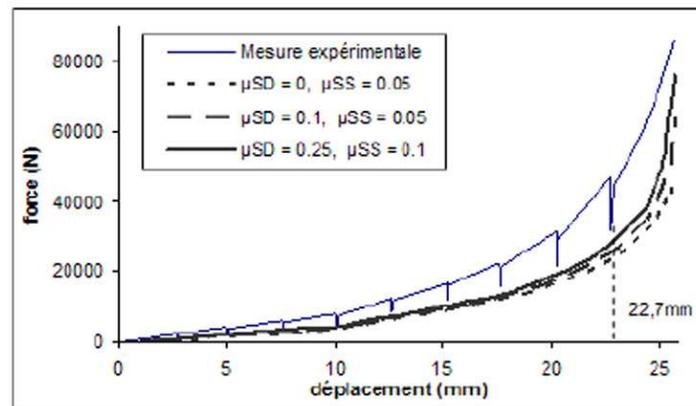


FIG. 1.17 – Courbes de force-déplacement du poinçon supérieur réalisées expérimentalement et numériquement sur un empilement cubique centré comprimé en matrice jusqu'à une densité relative de 0,97

De la comparaison entre les résultats respectifs numériques et expérimentaux (voir FIG. 1.16 et FIG. 1.17), il apparaît immédiatement la très bonne précision avec laquelle la simulation peut prédire le résultat expérimental. Plus particulièrement, la comparaison géométrique des allures du comprimé après compression à haute compacité montre encore une très bonne adéquation avec l'empilement réel de sphères de plomb effectivement déformé sous presse. Par ailleurs concernant la prédiction des efforts sur le poinçon, là encore les résultats numériques sont proches de l'expérience. Un troisième aspect intéressant mis en évidence par ces courbes force-déplacement issues de la simulation concerne la reproduction de l'influence des valeurs des coefficients de frottement, respectivement entre les sphères (μ_{SS}), et entre les sphères et la matrice (μ_{SD}). Il apparaît que plus le coefficient de frottement diminue, plus la force exercée sur le poinçon est moindre notamment dans la zone à grandes valeurs de déplacement du poinçon supérieur, c'est à dire pour les fortes densités relatives (les fortes valeurs de compacité). La configuration CC de l'empilement ne laisse que peu de latitude à l'expression du phénomène de réarrangement ainsi, lors de la compression, l'apparition de zone plastique typique du stade 1 est très rapide. Il demeure en début de compression que les réponses simulées en termes de force décroissent légèrement avec les différentes valeurs de coefficients de frottement. En fin de compression, la surface latérale de l'empilement adopte la forme de l'enveloppe cylindrique imposée par la matrice (voir FIG. 1.16-C) et l'influence de la valeur du coefficient μ_{SD} en devient plus nettement marquée.

D'autres essais propres à différentes configurations numériques, toujours dans ce cas de structure CC, ont été réalisés et testés avec tantôt un schéma de résolution standard, tantôt une densité de maillage 13 fois moindre ou même encore des éléments finis de type quadratique. Cette démarche, axée sur des variations de paramètres typiques d'une approche éléments finis, a été essentiellement menée pour analyser la méthode MEFMP en 3D en terme de sensibilité et de robustesse au regard de cette approche. Cette étude paramétrique (maillage, schéma de résolution, etc...) était également destinée à optimiser les coûts de calculs des simulations MEFMP à venir. A titre d'illustration, la simulation sur l'empilement cubique CC composée de 9 sphères maillées de 1.664 éléments finis conduit à une durée de 22 heures de temps de calcul avec un processeur Intel P4 de 3,8GHz. Parmi les règles établies, il s'avère par exemple qu'une sphère maillée de 1.000 éléments finis linéaires présente une bonne réponse mécanique simulée, comparativement aux mesures expérimentales, dans le domaine des grandes amplitudes de déformation et des grandes compacités (proche de l'unité).

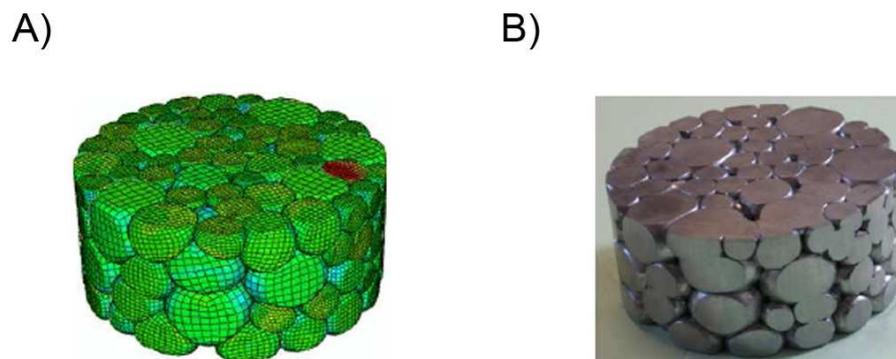


FIG. 1.18 – Comparaison d'une simulation en compression en matrice cylindrique MEFMP avec l'expérience pour un empilement de 150 sphères polydisperses: A) La déformation obtenue numériquement de l'empilement jusqu'à une densité relative de 0,92. B) La déformation obtenue expérimentalement de l'empilement jusqu'à une densité relative de 0,92.

Afin de conforter cette position d'outil numérique capable de remplacer l'expérience dans les études à venir, une deuxième étude a été menée. Elle a concerné la compression d'un assemblage cylindrique de billes de plomb de tailles différentes jusqu'à une compacité de 0,92 en fin de compression. La difficulté de cette deuxième simulation réside dans le nombre de sphères utilisées (150 billes) et dans le ratio de taille ($rayon_1 = 18,59$, $rayon_2 = 11,61$, $rayon_3 = 7,82$) qui favorisent la multiplicité des contacts entre les sphères (voir Fig. 1.18). Globalement, cette deuxième configuration d'empilement a réuni un certain nombre de difficultés tant sur les aspects expérimentaux que numériques. Cette simulation est une référence dans la littérature car elle est une des rares à modéliser via la MEFMP la compression des poudres métalliques à travers un empilement stable polydisperse en incluant une comparaison expérimentale directe [Chen *et al.* (2008)]. Les différents choix numériques (maillage, type d'éléments, ...) entrepris pour la simulation de cet essai de compression uni-axiale en matrice cylindrique sont optimaux et ont été établis grâce à l'étude paramétrique menée par Chen sur la simulation de l'empilement cubique centré. Concernant les résultats expérimentaux, l'essai a été là encore réalisé dans des conditions identiques à la simulation pour avoir une base de comparaison (courbes contrainte-densité relative, aspects géométriques de l'assemblage déformé) la plus analogue possible. Par exemple, les sphères ont été déposées individuellement et manuellement dans la matrice de sorte à respecter précisément les positions des centres des sphères de l'échantillon global avant compression. Il convient à cet égard de rappeler que cet empilement de 150 sphères a été entièrement et préalablement défini numériquement avant la construction de l'échantillon expérimental proprement dit.

En comparant les deux courbes contrainte-densité relatives (compacité) associées au poinçon supérieur, respectivement numérique et expérimentale, il apparaît que ces deux courbes ne sont pas superposées (voir Fig. 1.19). La courbe associée à la simulation numérique a été produite en adoptant des valeurs de coefficient de frottement μ_{SD} et μ_{SS} respectivement égales à 0,25 et 0,1. Chaque sphère a été maillée avec 1.088 éléments finis. Avec un écart moyen de l'ordre de 10% en terme de contrainte, la réponse numérique est très proche de la réponse expérimentale. S'agissant de la géométrie et de la morphologie du comprimé après compression, l'échantillon numérique ressemble très fortement à l'échantillon réel (voir Fig. 1.18).

Le dernier élément à noter dans le cadre de cette simulation est le temps de calcul qui a été d'environ 1 mois. Sans conteste, cette durée nécessaire à l'obtention du résultat de simulation revêt une grande importance; a fortiori lorsqu'on sait qu'elle n'est pas linéaire vis-à-vis des paramètres caractéristiques

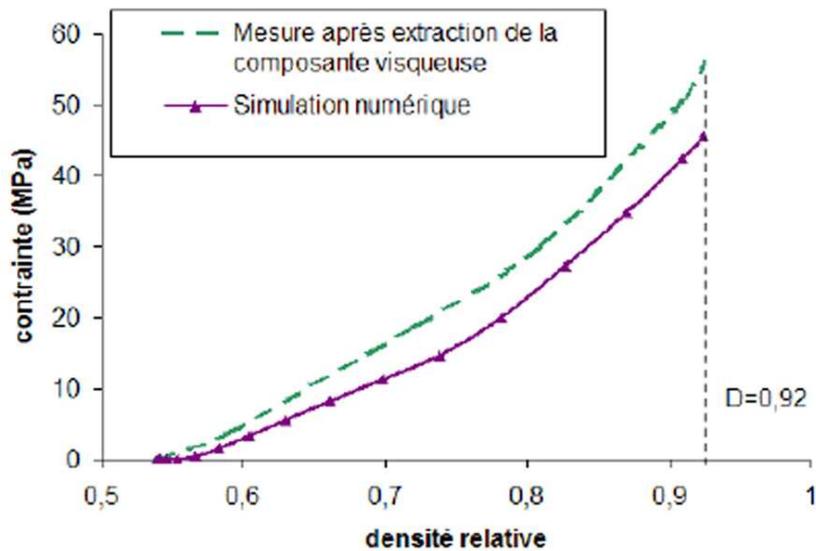


FIG. 1.19 – Courbes de contrainte-densité relative réalisées expérimentalement et numériquement sur un empilement de 150 sphères déformées en matrice

du modèle éléments finis lors de son élaboration.

La synthèse relative à la présentation de la méthode éléments finis multi-particules dans cette thèse est très proche de celle qui est faite dans tous les articles traitant de ce sujet. Cette méthode de simulation présente de nombreux avantages en termes de précision, cette caractéristique étant due à la discrétisation par les éléments finis de chaque particule. L'assemblage granulaire ainsi modélisé a la capacité d'adopter de grandes déformations aux contacts mais également, de pouvoir simuler la compression de poudre à de très hautes valeurs de compacité avec une grande précision par rapport aux résultats expérimentaux. De plus, l'approche MEFMP n'induit pas de restriction sur les mouvements de corps rigides au sein de l'empilement, ce qui permet de capturer un comportement global très complexe conditionné simultanément par le réarrangement, la rotation et les grandes déformations subies par les particules. Parallèlement, le point faible essentiel de cette méthode des éléments discrets maillés est le temps de calcul. Ce coût va inéluctablement se réduire avec la puissance croissante des moyens de calculs. Mais cette contrainte empêche à l'heure actuelle toute étude de type MEFMP sur le comportement global de poudres métalliques ductiles en compression avec un nombre élevé de sphères maillées. En effet, la densité de maillage par sphère requise pour la précision des résultats et la multiplicité des contacts rendent pour l'instant cette méthode de calcul bien trop coûteuse en temps de calcul. Ce fait donne à la méthode discrète (MED), nettement plus rapide, la possibilité pour le moment d'être la seule à pouvoir réaliser notre étude.

Présentement aucun modèle micromécanique intégré à la méthode des éléments discrets (MED) n'est capable de reproduire et prendre en compte les phénomènes apparaissant lors de la compression du milieu granulaire, ceci dans le cadre spécifique des valeurs de compacité proches de l'unité typiquement atteintes lors de la compression de poudres ductiles. Dans la suite de cette thèse, il est alors intéressant de savoir pourquoi la méthode des éléments discrets utilisée déjà depuis un certain nombre d'années, non sans un certain succès dans la modélisation du comportement mécanique des sols et du béton, n'arrive pas à reproduire ces phénomènes inter-granulaires présentés dans les

sections précédentes. Désireux d'expliciter cela, nous prenons pour option d'explorer les différents modèles micromécaniques utilisés dans la MED pour simuler la compression des matériaux granulaires. De sorte à respecter la démarche entreprise tout au long de ce chapitre, pour chaque modèle de contact éléments discrets présenté, différents résultats connus seront associés, afin de montrer le domaine de validité des lois de contact et de comprendre les différents phénomènes qui restreignent respectivement les capacités de chacun de ces modèles de contact.

1.7.2 La méthode des éléments discrets

L'intérêt de cette méthode micromécanique est de permettre l'obtention de la réponse macroscopique d'un milieu granulaire sollicité mécaniquement en modélisant ou en reproduisant le comportement de l'interaction entre les grains par des lois de contact. De plus avec la méthode des éléments discrets, il est facile de prendre en compte l'état du matériau (i.e., la configuration géométrique du tas de poudre) avant la phase de compression et de modéliser entièrement la phase de compression de la poudre. Ce type de modélisation représente une certaine complexité pour les modèles continus, comme nous l'avons vu à la section 1.6.1 de ce chapitre. La MED spécifie le comportement inter-granulaire à partir de lois de contacts formulées de manière analytique, réalisées par exemple par la mise en place de ressort et d'amortisseur entre chaque doublet de sphères en contact. Au sens de la méthode MED, les sphères ne se déforment pas élastiquement et plastiquement. Les niveaux des forces appliquées aux particules dépendent essentiellement de paramètres scalaires tels que l'amplitude des valeurs liées aux rapprochements des centres des particules détectées en contact et les caractéristiques du matériau constitutif des sphères.

Partant de ces principes généraux, une multitude de modèles de contact inter-particulaire ont vu le jour avec comme objectif principal de reproduire les comportements macroscopiques complexes observés sur des milieux granulaires soumis à de nombreux modes de chargement. Ces différents modèles de contact sont intégrés au sein des schémas de résolution numériques spécifiquement utilisés pour les simulations MED (voir chapitre 2).

Les lois de contact pour la méthode des éléments discrets ont été créées pour reproduire le comportement du matériau lors des stades de compression (voir Sec. 1.5.1):

- Stade 0: le comportement élastique domine au sein du milieu au travers du phénomène de réarrangement granulaire. Un tel comportement est activé par exemple pendant les phases de remplissage d'une matrice et de transfert de la poudre dans la matrice, au tout premier stade de la compression, ou encore lors d'une phase de densification par vibration prenant effet juste après un remplissage.
- Stade 1: Le comportement plastique apparaît. A ce stade, la plastification se limite uniquement au niveau des zones de contacts préalablement établies, les surfaces de contact impliquées restant très petites comparativement aux surfaces totales des grains. Ce comportement peut être activé lors de la phase de remplissage au cours de laquelle les grains s'entrechoquent. Dans le contexte général de la compression à froid, ce phénomène est systématiquement observé en début de compression marquant ainsi la fin du stade 0.
- Stade 2: le comportement plastique associé à de grandes déformations prédomine à l'échelle du bloc granulaire. A ce stade, le milieu granulaire peut être considéré davantage comme un milieu continu plutôt qu'un milieu discret. Il est ainsi possible d'utiliser par exemple le terme

de massif poreux à faible cohésion mécanique. Les grandes amplitudes de déformations des particules entraînent la diminution progressive du volume total des porosités. La frontière entre le domaine discret et le domaine continu est quasi-inexistante. Ce stade 2 qui reste encore mal appréhendé par les modélisations MED et plus particulièrement les lois de contact, est en l'occurrence le sujet principal de cette thèse.

Dans la perspective d'étudier les poudres métalliques pendant toute la phase de compression par la méthode des éléments discrets, il nous faut trouver un modèle micromécanique capable de mettre en œuvre une loi de contact valide pour chaque stade (stade 0, stade 1, stade 2). Idéalement, il vaudrait mieux une seule loi de contact qui soit capable de reproduire les différents phénomènes présents lors des deux derniers stades.

Il reste à faire un état de l'art des modèles existants pour mettre en œuvre la MED et pour simuler le stade 0, le stade 1 et le stade 2 du comportement du matériau granulaire afin de comprendre les propriétés et les lacunes des lois de contact proposées à ce jour. Ainsi, l'annexe E propose une revue des modèles développés pour reproduire le comportement du matériau au stade 0 et au stade 1. Concernant, les modèles utilisés pour reproduire avec précision le comportement quantitatif du matériau granulaire jusqu'à des valeurs élevées de la compacité (stade 2), nous nous attarderons dans la suite sur la description de ces modèles. Notre but est finalement de présenter à la fin de ce chapitre une nouvelle loi de contact normal destinée à la modélisation du stade 2 sur laquelle se basera les développements mis en œuvre pour mener à bien notre étude.

1.7.3 Les modèles de contacts développés pour le stade 2

Dans le stade 2, la plastification des particules par indentation mutuelle survient tout au long de la compression, ainsi l'écoulement plastique qui en résulte comble toutes les porosités, lesquelles deviennent de plus en plus isolées. C'est au travers de ce phénomène plastique que le comprimé se densifie de sorte à s'accommoder et s'adapter progressivement à la forme globale imposée par les outillages en mouvements. La modélisation micromécanique de ce comportement granulaire nécessite la connaissance précise de la réponse mécanique lors de l'indentation plastique entre des particules à l'image de l'analyse menée par Vu-Quoc (voir annexe E). Par ailleurs dans les premières études menées par Ashby et Hill [Hill *et al.* (1989)] sur la caractérisation de ce comportement mécanique spécifique, les auteurs ont établi une théorie sur l'indentation de chaque particule en contact. En se basant sur des essais expérimentaux (essais de dureté), ils ont pu prédire objectivement l'évolution de la pression macroscopique P appliquée à l'empilement en fonction du nombre de contacts N_c établis au sein du milieu granulaire avec la relation suivante:

$$P = 3\sigma_y N_c \quad \text{où } \sigma_y \text{ est la limite d'élasticité du matériau.} \quad (1.15)$$

De même Fischmeister [Fischmeister *et al.* (1978)] et Arzt [Arzt (1982)] se sont intéressés à la modélisation micromécanique du comportement plastique des agrégats de poudres. Ils ont ainsi étudié au cours des années 1980 la géométrie déformée du contact par plastification au travers d'une analyse éléments finis de deux sphères qui s'indentent. Arzt et Helle ont également trouvé des relations entre l'évolution de la densité de l'empilement (D) et la surface de contact moyenne (A_c) (voir Eq. 1.16) ainsi qu'une relation linéaire du nombre de contacts moyens (Z) en fonction de la compacité du milieu granulaire (voir Eq. 1.16).

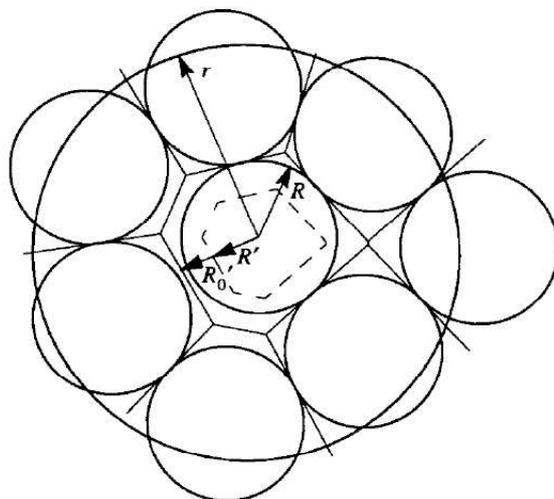


FIG. 1.20 – Illustration en deux dimensions des cellules de Voronoï avec les notations développées pour l'étude de la compression.

Pour trouver ces différentes relations, Artz a eu l'idée de faire grossir virtuellement des sphères dans un assemblage désordonné monodisperse proportionnellement à la diminution du volume des cellules de Voronoï associées à chaque sphère qui intervient pendant la compression du milieu granulaire (voir Fig. 1.20).

Ainsi Artz propose dans ce contexte les relations suivantes:

$$Z(D) = 12D \quad A_c(D) = \frac{\pi}{3} \frac{D - D_0}{1 - D_0} R \quad (1.16)$$

Où $Z(D)$ est le nombre moyen de contacts par particule en fonction de la compacité, A_c est la surface de contact moyenne dans l'empilement, D est la compacité de l'empilement, D_0 est la compacité initiale et R le rayon d'une sphère de l'empilement. Ces différentes relations ont été comparées et validées avec des résultats expérimentaux [Bouvard et Ouedraogo (1987)] jusqu'à une compacité inférieure ou égale à 0,9.

En se reportant aux travaux des auteurs précédemment cités, il s'avère que la plupart des modèles dédiés à la simulation micromécanique sont réalisés pour des raisons de simplicité à partir de l'étude de la compression de simples cellules unitaires (i.e., cubique centré, hexagonal compact,...) ou des essais de dureté sur une sphère. Ces simplifications ont pour conséquence d'induire au sein de ces modèles, la non prise en compte directe de l'évolution du nombre de contacts, ni même la valeur moyenne de la surface de contacts pendant la déformation. Pour tous ces modèles, il devient alors nécessaire de s'appuyer sur les travaux de Artz afin de décrire un comportement qui tienne compte de l'évolution du milieu granulaire réel pendant la compression.

Afin d'augmenter la précision de l'approche vis-à-vis des diverses situations des particules in situ à l'empilement, Fleck [Fleck (1995)] créa un modèle micromécanique (pression macroscopique-

densité) valide pour des simulations sous sollicitations multi-axiales (voir Eq. 1.17). Ce modèle prenant la forme d'une loi analytique est destiné dans un premier temps uniquement aux simulations cinématiques [Storåkers *et al.* (1999)] (i.e., le mouvement des particules est dicté par un champ de déformation homogène à l'empilement et aucun réarrangement local n'est pris en compte). Basé sur la seule variable d'état de compacité (D) du milieu granulaire, la loi analytique proposée par Fleck calcule une pression macroscopique P à partir de D .

Initialement la pression macroscopique P est calculée via les différents contacts inter-particulaires et la pression associée (i.e., la force de contact divisée par la surface moyenne de contact). Par comparaison aux travaux de Artz, il convient de souligner que la valeur de la surface de contact moyenne est remplacée dans le modèle Fleck par une relation fonction de D (voir Eq. 1.17).

Partant d'un niveau de pression de contact pour chaque indentation locale égale à trois fois la limite d'élasticité σ_y du matériau constituant les particules, le modèle de Fleck propose d'estimer la pression macroscopique P comme étant égale à :

$$P = 3D^2 \frac{D - D_0}{1 - D_0} \sigma_y \quad (1.17)$$

En se basant sur ce modèle micromécanique, Fleck expérimenta des sollicitations non-isostatiques avec l'approche cinématique et mit ainsi en lumière l'importance de l'histoire du chargement sur la réponse du milieu granulaire. L'histoire de chargement influe en effet sur la distribution des surfaces de contact. Suite à l'identification de ce phénomène, Fleck a mis en œuvre un des rares modèles macroscopiques qui prend en compte l'anisotropie.

Partant de la théorie de Bishop et Hill et d'une forme particulière de l'énergie plastique dépensée aux contacts entre sphères. Fleck a proposé une forme analytique pour caractériser le comportement d'un empilement granulaire. Cette forme analytique découle d'une approche dite affine au sens où le champ de vitesse de déformations imposées aux frontières délimitant l'empilement global est supposé respecté par chaque particule constituant cet empilement [Fleck *et al.* (1992), Fleck (1995)]. A ce titre un modèle affine n'est pas équivalent à modèle MED, ce dernier simulant des trajets individuels et spécifiques à chaque particule composant l'empilement.

Suite à l'avènement dans les années 2000 de la pratique de la simulation par les éléments discrets par la communauté scientifique, Fleck a ré-analysé l'hypothèse basée sur la déformation affine des particules dictée par la déformation macroscopique. Cette démarche a conduit au développement d'une loi de contact normale force-déplacement qui a été intégrée dans les simulations aux éléments discrets (voir Eq. 1.18), incluant l'hypothèse de déformation affine à chaque particule [Redanz et Fleck (2001)]. Cette nouvelle loi de contact a été utilisée avec une loi de contact tangentielle classique pour la prise en compte du frottement inter-particulaire (voir Sec. 2.3.2).

$$F_N = 3A_c \sigma_y \quad \text{avec} \quad A_c = \sqrt{8h \frac{R}{2}} \quad (1.18)$$

Avec h l'amplitude de pénétration entre particules, A_c la surface de contact et R le rayon unique de toutes les particules.

Au travers de ces résultats issus des simulations éléments discrets, Fleck a finalement mis en évidence l'importance de la prise en compte des mouvements non-affines des particules et donc du réarrangement local (i.e., roulement local et le glissement au contact). Ces réarrangements locaux influent sur la réponse macroscopique, ils sont par ailleurs correctement décrits par la MED (pression et densité) (voir FIG. 1.21).

Les empilements générés par déposition balistique ont des compacités initiales légèrement supérieures à 0,8 (en 2D) ce qui représente une valeur standard aux empilements bidimensionnels. Les chemins de sollicitation simulés correspondent à de faibles amplitudes de déformation, d'un comportement de matériau constitutif des particules supposées rigides et parfaitement plastiques, pour atteindre une compacité finale de 0,85. L'intérêt de l'analyse est donc porté sur le début de la compression, les différentes zones de contact établies à la surface d'une même particule restant éloignées les unes des autres.

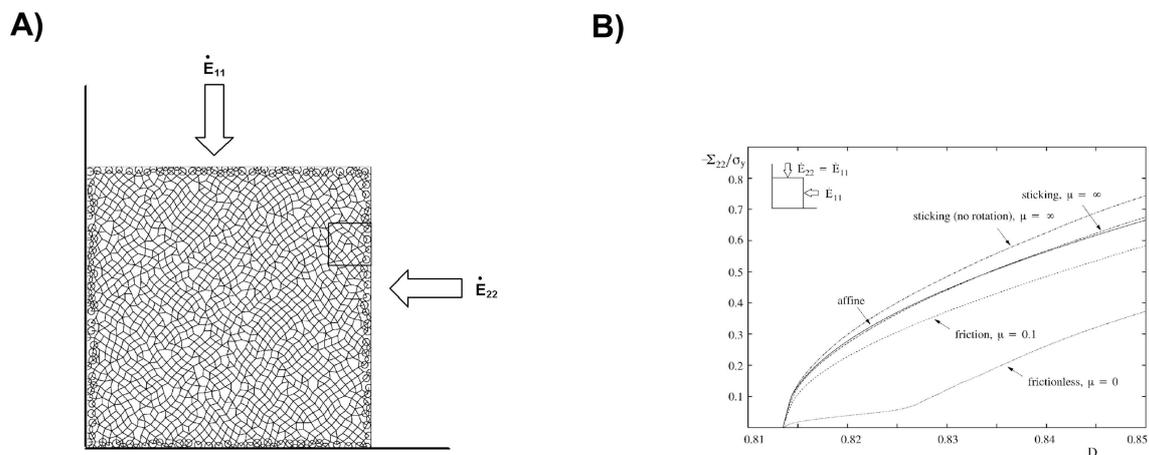


FIG. 1.21 – Simulations MED et cinématique en 2D d'une compression isotrope A) Empilement initial polydispense de 3183 cylindres. B) Courbe de réponse en contrainte normalisée-densité de l'essai pour une simulation: sans frottement (MED), avec frottement $\mu = 0,1$ (MED), cohésion (MED), cohésion et sans rotation (MED) et affine

Dans un deuxième temps, il constata l'influence des différents paramètres (frottement, cohésion, possibilité de réarrangement) sur la forme de ces surfaces de charges. Comme le montrent les différents résultats aux figures 1.22 issues des simulations MED, le frottement et la cohésion tendent à augmenter l'aire de la surface de plasticité par rapport à une surface réalisée sans frottement et sans cohésion. Par conséquent, il conclut que le réarrangement granulaire joue un rôle prépondérant sur la forme de ces surfaces de charge tout comme la forme toujours circulaire des particules. Ce type de conclusion émane également des travaux de Akisanya [Akisanya *et al.* (1997)], de Ludwig [Schneider et Cocks (2002)] et de Martin [Martin *et al.* (2003)]: ces derniers utilisant le modèle micromécanique de Fleck ou d'autres modèles de contact comme celui de Storåkers.

Nous retiendrons des travaux de Fleck [Redanz et Fleck (2001)] pour les besoins de notre étude que pour tracer une surface de charge, le modèle micromécanique doit avoir une raideur élastique de décharge (K_{dech}) approximativement égale à 10^3 fois la raideur plastique de charge. En effet, la valeur de la raideur élastique de décharge n'a aucune incidence directe sur la forme de la surface de charge si lors de la recharge élastique le contact suit la même raideur.

Concernant l'étude de la compression à haute compacité, il est important de noter que le modèle de Fleck est basé sur l'hypothèse d'indépendance du contact entre deux particules vis-à-vis des autres

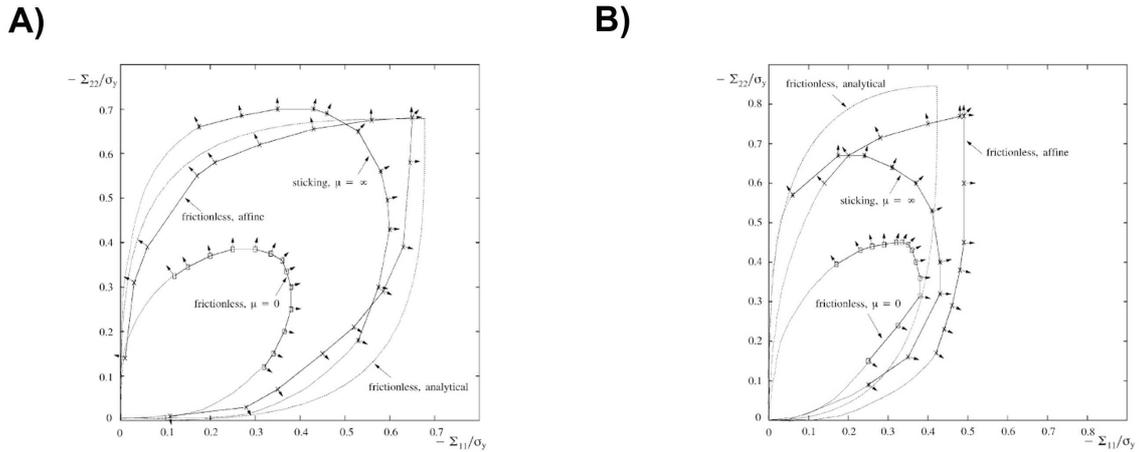


FIG. 1.22 – Les surfaces de charges d'un empilement polydisperse de cylindres comprimés à une densité relative de 0,85. Différents coefficients de frottements sont utilisés pour les simulations MED et affine. A) Surface générée à partir d'un premier chemin de chargement isotrope B) Surface générée à partir d'un premier chemin de chargement en matrice.

contacts voisins (i.e., le modèle néglige l'influence des zones voisines de contact déformées à la surface d'une même particule). Cette hypothèse de déformation isolée à chaque contact joue un rôle essentiel vis-à-vis de la réponse de ce modèle. Précisons ainsi que cette hypothèse trouve sa limite de validité pour des compacités de l'empilement supérieures à 0,85 [Redanz et Fleck (2001)]. Cette limitation s'explique par les influences effectives des interactions entre zones plastifiées d'une même particule qui se produisent à hautes valeurs de compacité, ce phénomène reste donc au sens des modèles exposés ici encore à évaluer et à décrire.

Cette restriction au modèle micromécanique de Fleck n'est donc pas réaliste pour mener l'étude de la compression de poudres métalliques ductiles pour des valeurs de compacité supérieures à 0,85. Elle s'applique d'ailleurs à tous les autres modèles comme nous allons le voir avec les travaux de Martin [Martin *et al.* (2003)] et Mesarovic [Mesarovic et Fleck (2000)]. Signalons au passage que d'autres modèles, à l'instar de celui de Fleck, destinés dans un premier temps aux simulations de type affine puis adaptés aux simulations MED ont été développés. Tous ces modèles sont uniquement des extensions de la théorie de Hill sur le comportement à l'indentation de deux sphères [Hill *et al.* (1989)]. Dans cette même classe, il convient de citer le modèle de Storåkers [Larsson *et al.* (1996)] qui prédit par exemple la réponse macroscopique lors de la compression d'une poudre constituée de différents types de matériaux avec des particules de tailles différentes.

Pour développer son modèle Storåkers a étudié numériquement avec la méthode des éléments finis et expérimentalement l'indentation d'une sphère 1 de rayon r_1 avec une sphère 2 de rayon r_2 (voir FIG. 1.23). Pour notre étude, nous relaterons ici les travaux de Storåkers démontrant dans le cas où les deux sphères ont un comportement rigide plastique modélisé par une loi puissance (voir Eq. 1.19).

$$\sigma = \sigma_0(\epsilon_{\text{plastique}})^{\frac{1}{m}}, \quad i = 1,2, \quad (1.19)$$

Où σ_0 est une constante du matériau constituant la sphère, m le paramètre d'écroutissage du matériau ($1 \leq m \leq \text{infini}$). σ et ϵ sont respectivement la contrainte et la déformation uniaxiale.

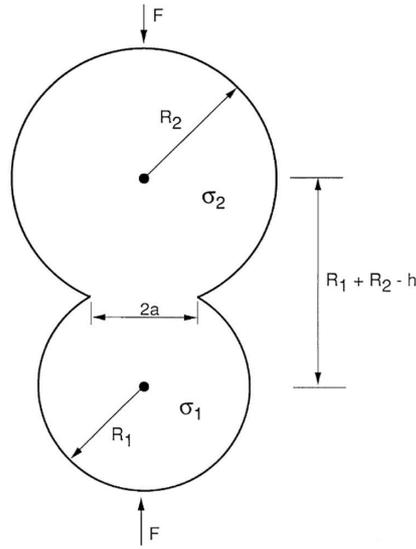


FIG. 1.23 – Deux sphères qui s'indentent.

En s'appuyant sur la théorie de l'indentation et d'écoulement de Von Mises, une solution pour la force d'indentation est trouvée:

$$F = \eta h \frac{2m+1}{m} \quad (1.20)$$

où

$$\eta = 2^{\frac{2m-3}{2m}} 3^{\frac{m-1}{m}} \pi \sigma_0 c(m) \frac{2m+1}{m} (r^*)^{\frac{2m-1}{2m}} \quad (1.21)$$

$$r^* = \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)^{-1} \quad \text{et} \quad \sigma_0 = \left(\frac{1}{\sigma_1} + \frac{1}{\sigma_2}\right)^{-1} \quad (1.22)$$

Dans cette formule, le paramètre $c(m)$ est issu d'une relation géométrique invariante entre le paramètre h (i.e., la profondeur d'indentation) et la surface de contact (voir Eq. 1.23). On note que $c(m)$ dépend uniquement de paramètres matériaux $c^2 = 1,43 \exp^{-\frac{0,97}{m}}$. Cette relation invariante a été validée par calculs éléments finis au cours des travaux menés par Storåkers [Larsson *et al.* (1996)].

$$a^2 = 2c(m)^2 h r_0 \quad (1.23)$$

Cette loi de contact (voir Eq. 1.20) a grandement été étudiée et utilisée par Martin *et al.* au cours de leurs travaux pour la modélisation de la compression des poudres composites [Martin et Bouvard (2003)], bimodales [Martin et Bouvard (2004)] et de la fracturation [Martin (2004)] du comprimé pendant la compression. Dans ces différentes études, la loi de contact plastique de Storåkers est associée à la loi de contact de Hertz ainsi qu'à une loi de contact élastique non-linéaire pour la décharge issue des travaux de Mesarovic. Cette approche spécifique forme à ce jour le modèle micromécanique

le plus complet pour la modélisation des trois stades de la compression des poudres métalliques (voir Sec. 1.5.1.2). A travers d'autres études menées par des auteurs tels que Skrinjar et al. [Skrinjar et Larsson (2004)], cette loi plastique a montré toute son efficacité dans la modélisation de compression de poudres de natures différentes.

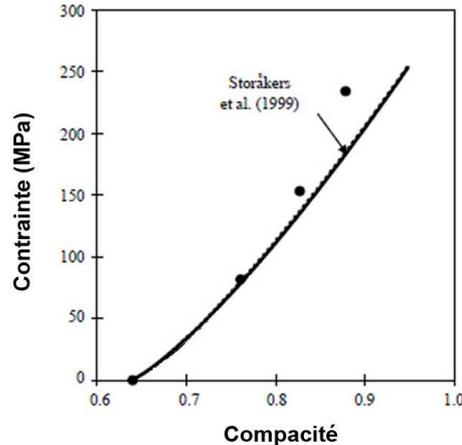


FIG. 1.24 – Evolution de la pression isostatique en fonction de la compacité pour la compression d'une poudre de cuivre. Comparaison des simulations MED (Storåkers) avec des données expérimentales (●) de James (1977).

Mais comme l'ont démontré Martin et Mesarovic, la loi plastique de Storåkers a un domaine de validité inférieur ou égal à des compacités de 0,82 ou 0,85 [Mesarovic et Fleck (2000), Martin *et al.* (2003), Chen *et al.* (2007a)]. La figure 1.24 concerne le cas d'une compression isotrope d'une poudre de cuivre réalisée dans le cadre des travaux de Martin [Martin *et al.* (2003)] et Storåkers [Larsson *et al.* (1996)]. La confrontation de la loi de Storåkers avec le résultat expérimental montre qu'à partir d'une compacité de 0,85, la loi plastique mise en œuvre au contact entre grains conduit à une réponse globale de l'empilement qui sous-estime la contrainte nécessaire à la poursuite de la densification du milieu granulaire.

Cette sous-estimation du niveau des contraintes nécessaires à la densification provient de la relation géométrique invariante (voir Eq. 1.23) reliant la profondeur d'indentation à la surface du contact dans le modèle de Storåkers. Cette relation suppose que la surface de contact est toujours circulaire et ne prend pas en compte l'influence des autres surfaces de contact déformées qui vont au fur et à mesure de la compression la transformer en un parallélogramme (voir FIG. 1.25 et FIG. 1.26). De manière très schématique, ce parallélogramme peut prendre la forme d'un carré ou d'un rectangle selon que la particule initialement de forme sphérique subit une compression: isostatique, en matrice ou uniaxiale. Nous noterons également qu'au cours de la déformation, la surface de contact aura une aire plus petite que la surface circulaire prédite par la théorie sur l'indentation, car les autres contacts bloquent ou plutôt contrarient l'écoulement plastique du matériau constitutif des particules. Par le tableau 1.2, il est possible d'identifier, pour différentes sollicitations, à quelles porosités le contact à la surface de la particule n'est plus une surface de périphérie circulaire. Ceci correspond ainsi à l'apparition au cours du développement du stade 2 de configurations géométriques critiques des particules pour les lois de contact exposées.

Pour trouver une autre relation (surface de contact = fct(h)) plus précise que celle de l'équation 1.23, différentes études [Dellis *et al.* (1994), Ogbonna et Fleck (1995)] ont déjà été menées, dans le but de trouver une relation géométrique capable de décrire l'évolution de la surface de contact en fonction

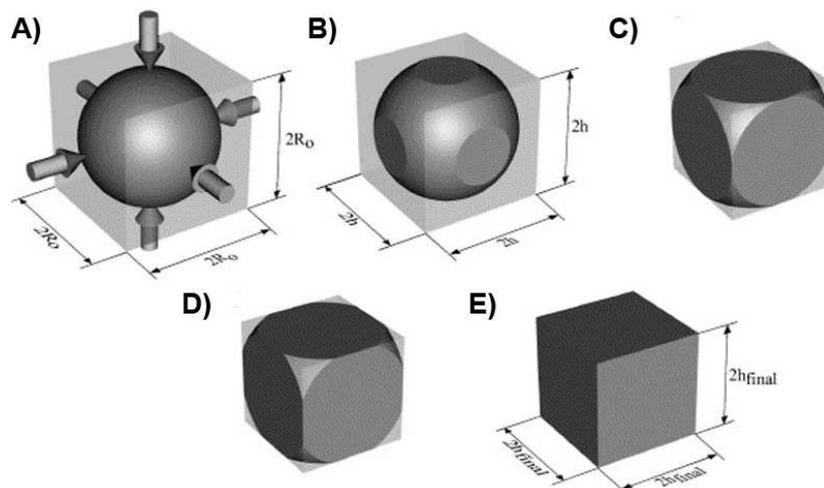


FIG. 1.25 – Déformation de la zone de contact lors d'un essai isostatique sur une particule initialement sphérique. A) Situation initiale (les zones de contact sont des points). B) Les surfaces de contact sont circulaires. C) Première situation critique (voir Tab. 1.2). D) Situation intermédiaire (les cercles sont tronqués). E) Situation finale (la sphère initiale devient un cube avec $h_{final} = \sqrt[3]{\frac{\pi}{6}} R_0$).

TAB. 1.2 – Hauteur (h), rayon (R) et la porosité (Φ) pour l'instant initial, les différentes situations critiques et l'instant final dans les cas schématiques d'une compression isostatique et en matrice sur une cellule cubique.

Instant donné	h	R	Φ
Compression matrice			
Initial	1,0000	1,0000	0,4764
Critique1	0,5878	1,1600	0,1092
Critique2	0,5247	1,4142	0,0021
Final	0,5236	1,5080	0,0000
Compression isostatique			
Initial	1,0000	1,0000	0,4764
Critique	0,8156	1,1534	0,0349
Final	0,8060	1,3960	0,0000

du type sollicitations (i.e., essai isostatique, essai en matrice ou essai uniaxial) et du type de matériau, mais rares sont les études qui aboutissent à une expression analytique intégrable dans les modèles micromécaniques. A partir du tableau 1.2 et avec les figures 1.25 et 1.26, il est possible de remarquer l'influence du type de chargement (i.e., isostatique, en matrice) sur l'évolution de la surface de contact et l'apparition d'une ou plusieurs situations critiques (i.e., des situations où plusieurs zones de contact vont interagir l'une avec l'autre à la surface d'une même particule). L'expression analytique devrait ainsi prendre en compte ces différents scénarii d'apparition de situations critiques en fonction du type de chargement et du nombre de particules en contact.

L'autre aspect que les lois de contact plastiques exposées ci-dessus ont du mal à appréhender et quantifier concerne l'évolution exponentielle du niveau de la contrainte macroscopique lorsque la compacité du milieu granulaire est proche de 1 (voir Fig. 1.24). Dans le cas où le matériau constitutif des grains est incompressible en plasticité, il est effectivement logique et attendu que la résistance de l'empilement à la compression augmente exponentiellement en fonction de la compacité, dès lors

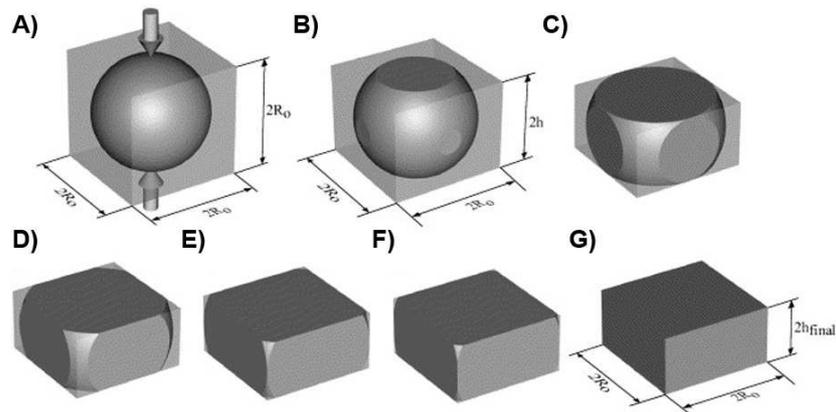


FIG. 1.26 – Déformation de la zone de contact lors d'un essai en matrice sur une particule initialement sphérique. A) Situation initiale (les zones de contact sont des points). B) Les surfaces de contact sont circulaires. C) Première situation critique (les contacts avec les surfaces qui densifient sont tronqués suivant les directions X et Y , tandis que les autres contacts sont tronqués suivant la direction Z) (voir Tab. 1.2). D) Situation intermédiaire. E) Deuxième situation critique (voir Tab. 1.2). F) Situation intermédiaire. G) Situation finale (la sphère initiale est devenue un orthoèdre avec $h_{final} = \frac{\pi}{6} R_0$).

que l'écoulement de matière dans les porosités n'est plus possible. Il est par ailleurs admis que cet emballement des niveaux de contrainte nécessaires à la poursuite de la densification dépend du type de sollicitations, mais également dans une moindre mesure des paramètres matériaux qui constituent la poudre. Pour les méthodes discrètes à l'instar de la MED, qui ne peuvent reproduire les fortes amplitudes de déformation des particules, ce phénomène d'emballement de la contrainte moyenne découlant de l'incompressibilité du matériau ne peut être reproduit par les lois de contact disponibles. Pour cette raison, la plupart des lois de contacts intégrées à l'approche MED sous-estiment la contrainte nécessaire pour comprimer la poudre à une valeur élevée de la compacité, car ces lois supposent que le matériau s'écoule à l'infini.

A ce stade de notre réflexion, concernant les lois de contact normale force-déplacement pour la modélisation par la méthode des éléments discrets de la compression des poudres dans les trois stades, nous pouvons affirmer qu'aucun modèle existant ne peut en l'état atteindre les niveaux de précision de la méthode MEFMP. Pour autant, les progrès réalisés par les auteurs sont indéniablement considérables. Les lois de contacts sont passées de formes simples à des formes sophistiquées avec des expressions intégrant un grand nombre de paramètres qui contrôlent le comportement mécanique du matériau afin de faciliter la calibration des lois d'un matériau à l'autre.

Elles ont en effet mis en lumière un certain nombre de phénomènes physiques essentiels à la compréhension du comportement des poudres classiques ou composites. De nombreuses études ont été réalisées avec ces lois de contact et de nombreuses simulations doivent encore être effectuées avant d'en avoir exploité toutes les possibilités. Même si ces lois présentent quelques limitations, elles ont fourni à travers l'approche éléments discrets plus d'informations que les différentes études faites à ce jour par la méthode MEFMP.

Concernant les origines des lois dédiées à la description du contact plastique, leurs développements émanent pour l'essentiel de l'analyse éléments finis d'une sphère maillée indentée par une ou plusieurs parois.

Au moment de développer un modèle de contact capable de reproduire le comportement du

comprimé pour des valeurs élevées de compacité, on sait d'ores et déjà que la nouvelle loi de contact plastique recherchée à intégrer dans un modèle MED s'appuiera sur l'analyse éléments finis, comme l'ont déjà fait la plupart des auteurs qui ont développé ce type de loi. Pour la réalisation de notre étude avec la méthode des éléments discrets, nous nous sommes intéressés aux travaux de Harthong réalisés lors de son master 2 (recherche) portant sur l'utilisation de la MEFMP pour l'étude d'une loi de contact dédiée à la MED [Harthong (2007)]. Les résultats obtenus par Harthong débouchent sur les prémisses d'une loi de contact normal analytique pour la DEM et sur un concept novateur qui permet de prendre en compte l'influence des particules voisines sur l'interaction granulaire.

1.8 Une nouvelle loi de contact normal force-déplacement pour le stade 1 et le stade 2

La nouvelle loi de contact normale force déplacement pour la méthode des éléments discrets qui sera utilisée dans les simulations de la compression des poudres métalliques pour les hautes compacités est essentiellement basée sur les travaux de Harthong. Ces travaux sont résumés au sein de cette section. La loi de contact élasto-plastique que Harthong a développé est une équation analytique intégrant un certain nombre de paramètres matériaux dont la validité n'a été testée que par une approche affine, comme on va le voir dans cette section. L'écriture de cette relation s'appuie sur une analyse éléments finis du type éléments finis multi-particules de la compression d'une bille selon trois types de sollicitations (isostatique, en matrice, en compression simple). La légitimité de cette procédure repose sur les conclusions de la section 1.7.1 portant sur la méthode des éléments finis multi-particules et sur le fait que la grande majorité des lois de contacts analytiques pour les simulations avec la MED a été développée à partir d'analyses éléments finis (voir Sec. 1.7.2).

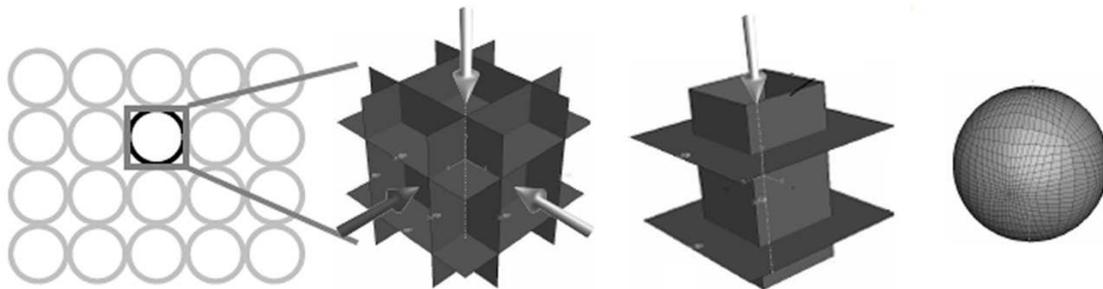


FIG. 1.27 – Simulation d'un empilement régulier de type cubique simple, en compression triaxiale par une maille élémentaire. Les contacts bille-bille sont remplacés par des contacts billes-plans rigides sans frottement;

Le matériau constitutif de la bille maillée suit une loi de comportement du type élasto-plastique (voir Eq. 1.24) et les différents modèles numériques construits consistent à comprimer sous différentes sollicitations par six parois rigides dans un cube (voir FIG. 1.28). Des modélisations réalisées avec le logiciel ABAQUS et s'inspirant des travaux que Chen a mené en amont sur cette méthode [Chen (2008), Chen *et al.* (2007b)] ont initié ces travaux.

$$\sigma = \sigma_y + \sigma_0(\epsilon_{plastique})^{\frac{1}{m}} = k(\epsilon_{total})^{\frac{1}{n}} \quad (1.24)$$

Où σ_y est la limite élastique du matériau et σ_0 , k , m et n sont des paramètres du matériau.

La démarche qui consiste à solliciter la bille maillée par trois chemins de chargements différents a pour objectif d'identifier, à partir des trois réponses associées une seule relation analytique qui relie les forces résultantes aux parois à la profondeur d'indentation au contact paroi-sphère. Cette relation analytique doit donc être valide pour des valeurs du rapport $\frac{h}{r}$ (avec h qui est le paramètre d'indentation) très élevées. La finalité de cette expression est de pouvoir reproduire l'évolution des efforts au sein de l'empilement de sphères pour différents types de compression, en ayant comme seule indication la valeur des amplitudes d'indentations. Il convient également de souligner que les empilements de sphères pour lesquels cette nouvelle loi analytique devra être fonctionnelle seront tous très différents de l'empilement cubique idéalisé à partir duquel elle a été développée. Pour appréhender les difficultés d'élaboration d'une telle expression, il s'agit de remarquer que la situation de cette recherche est analogue à l'élaboration de l'expression analytique qui permettrait de calculer la valeur de la surface de contact au cours de la compression pour des types d'essais, ceci en tenant compte de l'influence des différentes zones de contact déformées (voir Sec. 1.7.3).

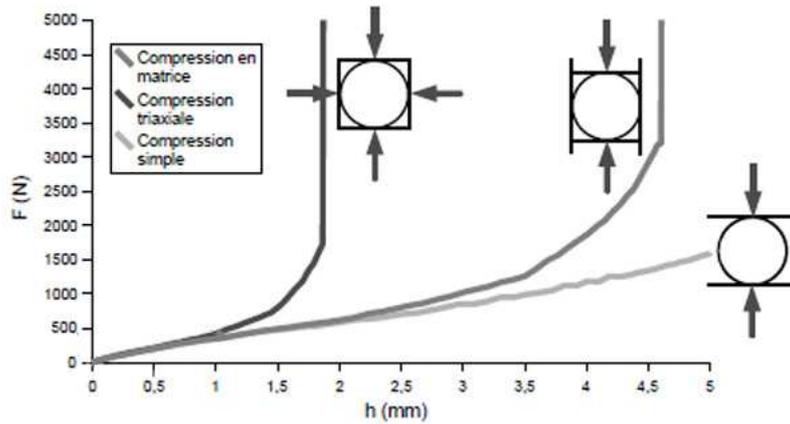


FIG. 1.28 – Différents types d'essais réalisés par Harthong sur une cellule cubique périodique. Ces essais ont servi à développer la loi de contact analytique normale force-déplacement valide pour les trois stades de compression.

En suivant sa procédure, Harthong propose ainsi une première expression analytique (voir Eq. 1.25-1.27) identifiée à partir des courbes réponses force-déplacement prises par rapport à une des parois déplacées pour réaliser un essai uniaxial et un essai en matrice dans un cube. Il en ressort une équation composée de deux termes K_1 et K_2 qui une fois associés doivent reproduire la réponse force-déplacement pour tout type de chargement.

$$F_{plas} = kr^2(K_1 + K_2) \quad (1.25)$$

$$K_1 = \alpha(n) \ln(\beta(n) \frac{hj}{r} + 1) \quad (1.26)$$

$$K_2 = \alpha_1(e^{\beta_1(n) \frac{hj}{r}} - 1) \quad (1.27)$$

Où

$$\begin{cases} \alpha(n) = 1,26\left(\frac{n-1}{n}\right) \\ \beta(n) = \frac{5}{0,52+2n} \\ \alpha_1 = 0,0029 \\ \beta_1(n) = 18 \end{cases}$$

Dans la suite de la démarche, cette expression composée de deux raideurs (K_1 et K_2) (voir Eq. 1.25) est testée en comparant les résultats du calcul par mouvements affines des particules avec d'autres résultats de références issus de l'approche MEFMP considérée comme référence. La comparaison se fera sur la compression en matrice et isostatique de cellules périodiques cubique centré (CC) et cubique à faces centrées (CFC) composées de sphères maillées (voir Fig. 1.29). Cette dernière étape de validation intégrée dans la démarche de développement d'une loi de contact est appréciée et permet d'éprouver cette nouvelle loi de contact analytique pour des configurations de sphères en contact d'autres.

La figure 1.29 présente le résultat de cette comparaison pour une cellule CFC. Il ressort que la loi analytique développée reproduit correctement le comportement des essais jusqu'à une compacité de 0,85. La loi analytique construite à partir des paramètres (K_1 et K_2) est mieux adaptée pour reproduire la réponse fournie par la simulation numérique par ABAQUS jusqu'à la compacité de 0,85 tandis que la réponse du modèle de Storåkers surestime la réponse simulée sur ce même domaine de compacité. Mais suite à ce comparatif, il demeure que cette première expression analytique basée sur les paramètres K_1 et K_2 (voir Eq. 1.26-1.27) ne peut toujours pas reproduire le comportement de la compression de la poudre à haute compacité dans une configuration autre que l'empilement cubique simple, la figure 1.29 étant consacrée aux réponses mécaniques d'une structure cubique centrée. Si on observe les deux courbes pour de hautes valeurs de compacité, respectivement sur les figures 1.29-A et 1.29-B, on constate que l'expression analytique déclenche l'emballement de la force avec un certain retard par rapport à la courbe de référence Abaqus. Cela s'explique par la non prise en compte du nombre plus important de voisins dans la configuration CFC que dans la cellule cubique simple.

Donc cette première loi de contact analytique proposée présente les mêmes limites que les lois plastiques normales force-déplacement présentées dans la section précédente. L'expression analytique élaborée à partir de la réponse d'une configuration cubique simple ne peut être étendue à une configuration autre. Pour améliorer le modèle, il est donc nécessaire de prendre en compte deux phénomènes supplémentaires :

- L'influence mutuelle sur une même surface de particule de l'évolution des surfaces de contact au cours de la déformation.
- La difficulté croissante à accommoder l'écoulement plastique du matériau constitutif des particules dû à l'apparition de nouveaux contacts, où l'existence d'un volume de vide très réduit qui donne lieu à l'emballement du niveau de contrainte à différentes valeurs de compacité selon le type d'essai.

Pour autant ces deux phénomènes sont liés, car l'évolution des surfaces de contacts dépend de la possibilité ou non du matériau à s'écouler. Lorsque de nouvelles surfaces de contact apparaissent au cours de la déformation, on peut considérer dans le même temps que le volume où peut s'écouler le matériau se réduit. Cette diminution du volume va provoquer ainsi l'emballement du niveau de

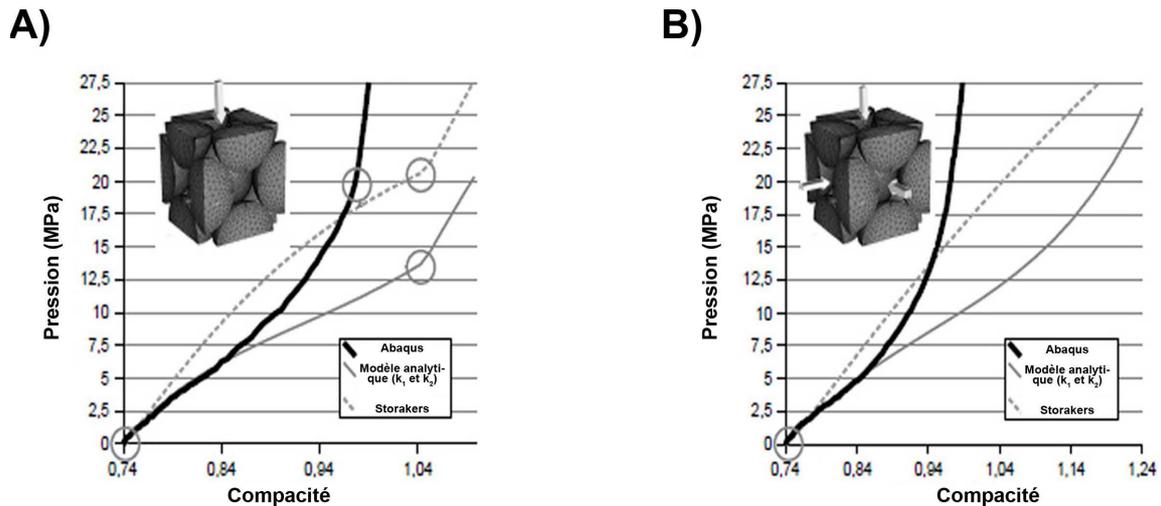


FIG. 1.29 – Comparaison entre la courbe ABAQUS force-déplacement avec les courbes issues de la loi de Storakers et de la première expression de la loi analytique développée (K_1 et K_2). Cette comparaison se fait pour deux types de compression (isostatique (a) et en matrice (b)) sur un empilement cubique à faces centrées représenté par des billes de plomb.

contrainte nécessaire à poursuivre la croissance de la compacité. Afin d'appréhender ce phénomène de diminution du volume de vide autour d'une sphère déformée au travers de la méthode des éléments discrets, l'une des possibilités élaborées par Harthong consiste à calculer à tout instant le volume dans lequel la sphère déformée peut s'écouler via les plans de contact. L'idée est donc de définir avec les différents plans de contact générés par les surfaces de contact (plans de contact direct) un polyèdre qui englobe la sphère et qui représente le volume disponible pour l'écoulement du matériau. Pour être le plus précis possible sur la représentation de ce volume de vide (V_{vide}), l'influence des sphères voisines qui ne sont pas en contact (les particules éloignées) avec la sphère est prise en compte. Pour cela est défini des plans de contact (plans de contact virtuels) avec les sphères particules éloignées à l'aide d'un gabarit virtuel de la sphère. Ainsi, ce volume de vide (V_{vide}) autour de la sphère qui est défini à l'aide des plans de contacts directs et virtuels est modélisé de façon très précise.

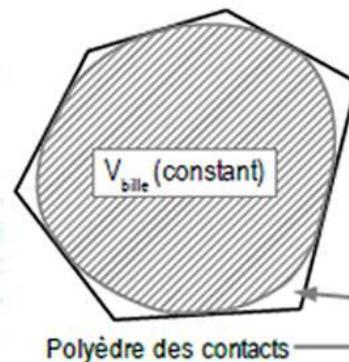


FIG. 1.30 – Représentation du polyèdre des contacts définissant le volume de vide (V_{vide}) dans lequel la sphère peut se déformer.

Il devient alors aisé de suivre au cours de la compression, l'évolution du volume de vide associé au polyèdre englobant la sphère (voir Fig. 1.30). Le but ultime consiste à détecter l'instant où une

particule atteint l'incompressibilité (i.e., le volume du polyèdre est égal au volume de la sphère) et va résister à la compression. Dans cette optique un nouveau paramètre qui est défini par Harthong, ce paramètre représentant la compacité locale (i.e., $\rho_{i\text{local}} = \text{Volume bille } i / \text{Volume défini par le polyèdre}$) (voir FIG. 1.30) de la particule i , est intégré à la loi analytique. Grâce à ce nouveau paramètre, une deuxième expression analytique de la loi élasto-plastique normale force-déplacement est proposée:

$$F_{\text{plas}} = kr^2(K_1 + K_2 + K_3) \quad (1.28)$$

$$K_1 = \alpha(n)e^{\beta(n)\frac{h_{ij}}{r}}(1 + e^{-8\frac{h_{ij}}{r}}) \quad (1.29)$$

$$K_2 = \alpha_1(n)(1 + e^{-8\frac{h_{ij}}{r}}) \quad (1.30)$$

$$K_3 = \alpha_2(n)\frac{(\rho_{ij\text{local}} - \rho_{ij\text{initial}})^{2,5}}{(1 - \rho_{ij\text{local}})^{0,5}} \quad (1.31)$$

Où

$$\begin{cases} \alpha(n) = \frac{0,82n-0,68}{n-0,5} \\ \beta(n) = \frac{1,335n}{n-0,5} \\ \alpha_1 = \frac{0,84n}{0,3n+0,5} - 2,05 \\ \alpha_2(n) = 4,2\left(\frac{n-0,5}{n}\right) \\ \rho_{ij\text{local}} = \frac{\rho_{i\text{local}} + \rho_{j\text{local}}}{2} \end{cases}$$

Avec $\rho_{ij\text{initial}}$ la valeur moyenne des compacités locales ($\rho_{i\text{initial}}$ et $\rho_{j\text{initial}}$) des deux sphères i et j quand le contact est identifié pour la première fois.

Par la comparaison de la nouvelle expression analytique (voir Eq. 1.28-1.31) proposée par Harthong avec la simulation Abaqus dans le cas des simulations précédentes sur la cellule périodique, il apparaît que les réponses respectives issues des deux modèles sont quasi identiques pour une compression isostatique et pour une compression en matrice de la cellule cubique face centrée (voir FIG. 1.31A-B). Ces deux figures valident ainsi le fait que la nouvelle expression de la loi de contact normal, avec comme variables locales h et $\rho_{ij\text{initial}}$, semble adaptée à la modélisation de la compression à haute compacité des poudres métalliques. Pour autant la validation complète de cette nouvelle expression passera obligatoirement par l'intégration de celle-ci dans des simulations éléments discrets. Il s'agira plus particulièrement de comparer les résultats obtenus avec des résultats de références ABAQUS pour des empilements désordonnés à plus grand nombre de particules. Ces différentes comparaisons pourront ainsi établir la validité du modèle de contact et l'expression développée par Harthong pour l'étude de la compression à haute densité des poudres métalliques via la MED.

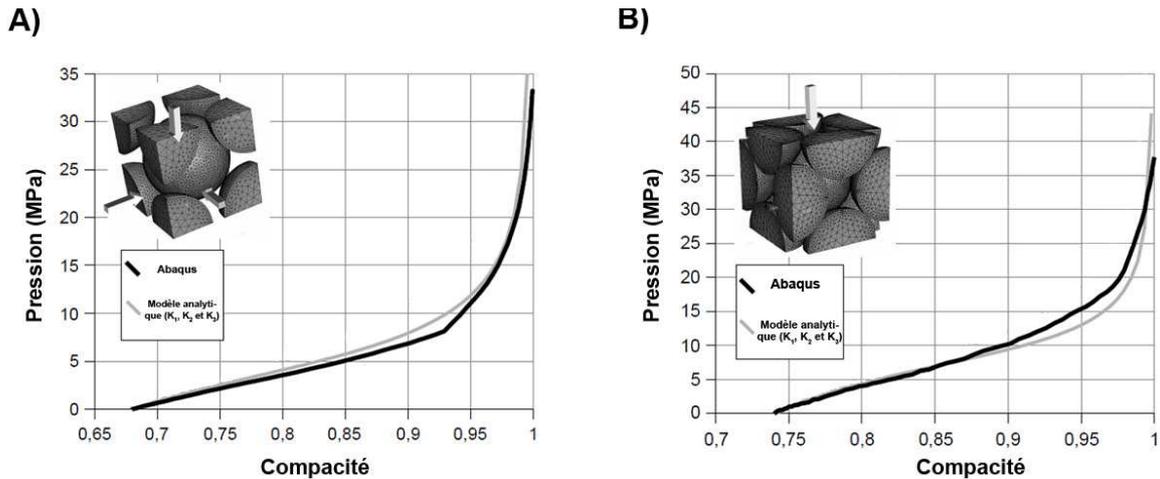


FIG. 1.31 – Comparaison entre la courbe ABAQUS force-déplacement avec les courbes issues de la loi analytique modifiée (K_1 , K_2 et K_3). Cette comparaison se fait pour deux types de compression (isostatique et en matrice) sur un empilement cubique à faces centrées représenté par des billes de plomb.

1.9 Conclusion

Dans ce chapitre, les différentes étapes du procédé de fabrication basé sur la compression à froid des poudres sont présentées. L'accent est surtout mis sur les trois premières étapes que sont le remplissage, le transfert et la compression. Ces trois étapes sont primordiales pour l'obtention d'une pièce finale avec une bonne santé matière. En ce qui concerne la phase de compression, il est d'ores et déjà admis dans la littérature que cette phase conditionne fortement les propriétés mécaniques finales de la pièce. L'objectif de cette thèse est donc de modéliser le comportement de la poudre pendant cette phase si importante pour prédire les propriétés mécaniques de la pièce finale et optimiser cette phase du procédé de fabrication.

L'objectif d'obtention de modélisations précises appliquée à la métallurgie des poudres n'est pas simple, car il faut prendre en compte tout l'historique du chargement subi par la poudre avant la phase de compression. Il importe également de savoir reproduire les phénomènes physiques qui surviennent durant cette phase. Ceci est notamment vrai dans le cas des matériaux particuliers qui ont un comportement fortement non-linéaire et un domaine de plastification étendu des grains en fin de compression.

Pour réaliser les simulations numériques de cette phase de compression des poudres, il existe une première approche utilisant l'hypothèse des milieux continus pour laquelle le comprimé de poudre (la pièce) est représenté par un maillage éléments finis associé à une loi de comportement macroscopique du type Drucker-Prager/Cap. Ce type de méthode présente des avantages indéniables. Ils ont trait à la facilité de mise en œuvre, la rapidité des résultats et une certaine qualité en rapport avec les résultats expérimentaux pour ce qui est de la prédiction de la distribution de la densité du comprimé en fin de compression. Cependant cette approche reste encore limitée et doit connaître certaines évolutions. Il est en effet souhaitable de pouvoir prédire correctement la fissuration du comprimé. Ainsi que d'évaluer plus précisément les efforts appliqués aux outils et de prendre en compte l'anisotropie du comprimé due à l'historique de chargement que subit le tas de poudre durant toute la phase de compression.

Pour améliorer les modèles macroscopiques existants, il semble convenu d'admettre que de nouveaux formalismes doivent être mis en place en s'appuyant sur des résultats issus de l'approche discrète. Cette approche numérique au sens général compte deux méthodes numériques très différentes. La méthode des éléments finis multi-particules (MEFMP) qui est très efficace pour notre étude en termes de qualité des prédictions numériques, mais malheureusement trop coûteuse en temps de calculs dès lors que l'empilement contient plus d'une centaine de particules. La deuxième méthode des éléments discrets (MED) possède à l'inverse de la MEFMP des particules à la description simplifiée (corps rigides) et de ce fait ne peut reproduire le comportement phénoménologique de la compression de poudres pour des valeurs élevées de compacité. Toutefois la méthode des éléments discrets est retenue pour notre étude, car elle est préconisée par une grande majorité des chercheurs dans ce domaine.

A ce jour, les lois de contact normales plastiques de Fleck et de Storåkers sont majoritairement utilisées dans les simulations éléments discrets pour modéliser la compression des poudres durant le stade 1 et le stade 2. Ces deux lois de contact se sont avérées très efficaces pour expliquer des phénomènes locaux propres aux milieux granulaires et pour reproduire les réponses macroscopiques d'empilement lors de compression jusqu'à des compacités de l'ordre de 0,85 [Mesarovic et Fleck (2000), Martin *et al.* (2003), Chen *et al.* (2007a)]. Dans le cadre de notre étude dédiée à la compression des poudres pour les hautes valeurs de compacité (i.e., jusqu'à 0,95), l'utilisation de ces deux lois est cependant compromise.

Afin de lever cette limitation des simulations éléments discrets, Harthong a développé une nouvelle loi de contact normale force-déplacement qui intègre un nouveau paramètre nommé la densité locale. Cette nouvelle loi de contact analytique est inspirée par des résultats de simulations par éléments finis. Elle est donc élaborée à partir des courbes réponses force-déplacement pour différents types d'essais numériques sur des cellules périodiques. La finalité pour cette loi est d'être intégrée dès le prochain chapitre au sein d'un modèle de contact, dans le but de procéder au cours de cette thèse à des simulations éléments discrets qui soient capables de reproduire le comportement de la poudre observé expérimentalement.

Le modèle discret et la génération d'empilements de particules

Résumé du chapitre: Dans ce chapitre, un nouveau modèle de contact dédié à la modélisation de la phase de compression des poudres par la méthode des éléments discrets est présenté. Ce modèle de contact intègre différentes lois de contact, afin de reproduire le comportement mécanique inter-granulaire de la poudre pour tous les types de sollicitations qui interviennent durant le calcul. De plus, pour modéliser au mieux le comportement d'un tas de poudre, la reproduction numérique de l'empilement de grains de poudres à travers un assemblage de sphères en contact est indispensable. Pour cela, la présentation explicative d'un nouvel algorithme géométrique de génération de particules sphériques en contact est réalisée. La méthode associée à cet algorithme est fondée sur le remplissage de mailles tétraédriques par des sphères en contact de tailles différentes (i.e., particules polydisperses). Cet algorithme présente de nombreux avantages et peut aisément reproduire différentes textures granulaires qui sont caractérisées via les outils de post-traitements présentés également au sein de ce chapitre 2.

2.1 Introduction

Les premières simulations discrètes en dynamique moléculaire sont apparues au début des années 50, où l'on étudiait à l'échelle moléculaire le mouvement d'un grand nombre de molécules interagissant dans un système en équilibre thermodynamique. Ensuite cette méthode de calcul a été intégrée dans la mécanique des sols pour fournir des informations sur le comportement complexe des matériaux granulaires lors de sollicitations mécaniques extérieures [Donzé *et al.* (2009)]. Les premiers à faire le lien entre la dynamique moléculaire et la mécanique des sols sont Cundall et Strack en 1979 [Cundall et Strack (1979)] qui introduisent la méthode des éléments discrets (MED). Face aux besoins des lois macroscopiques anisotropes très complexes pour représenter le comportement d'un milieu granulaire, la méthode des éléments discrets a été utilisée intensivement avec des modèles de contact très simplistes.

Etant donné la nature discrète des poudres métalliques, il est donc naturel d'envisager l'utilisation de la MED. Le milieu est assimilé à un assemblage de particules discrètes (des sphères) en contact généré avec des algorithmes dédiés à sa création. Les propriétés mécaniques des particules en interaction sont définies au niveau de chaque contact entre sphères par un modèle de contact, ce qui permet de modéliser le comportement mécanique du tas de poudre à l'échelle locale. A chaque pas de temps, les positions et les forces appliquées sur chaque élément sont connues.

La modélisation de milieux discrets dans le cadre théorique de la mécanique des milieux continus permet de remonter à une loi de comportement macroscopique du matériau considéré et nécessite le respect de certaines règles; notamment celle qui énonce que l'empilement numérique doit être représentatif du milieu granulaire modélisé. Mais il est difficile de réaliser un assemblage de sphères similaire (i.e., mêmes propriétés géométriques) à celui de grains de poudre. Le nombre de particules constitutives étant trop important pour que la simulation soit envisageable, la définition d'un volume élémentaire représentatif (VER) comportant un nombre suffisant de sphères qui ont des tailles semblables aux particules du milieu étudié est compatible. Dans ce chapitre, les différentes notions rapidement énoncées dans cette introduction seront approfondies tout en faisant ressortir les différents développements réalisés dans le cadre de cette méthode numérique.

2.2 Principe de la méthode des éléments discrets (MED)

Pour réaliser notre étude, nous avons fait le choix de nous limiter à la MED. Pour mémoire, on signale qu'il existe une approche sensiblement différente, appelée "dynamique des contacts", dans laquelle on considère des particules strictement indéformables, y compris au niveau des contacts (i.e., sans interpénétration). Dans cette méthode, il n'y a donc aucune élasticité du matériau. On pourra se reporter pour plus de détails aux travaux de Radjaï et Jean [Radjaï (1995), Jean (1999)] et au code de calcul LMGC90 [Dubois et Jean (2003)]. On peut également parler de la méthode discrète "SPOT" qui est moins connue, mais tout aussi efficace pour simuler l'écoulement granulaire (e.g., grains de maïs dans un silo) ou générer des empilements de sphères. Cette méthode est développée par Bazant et elle est basée sur une théorie statistique réaliste [Bazant (2006)].

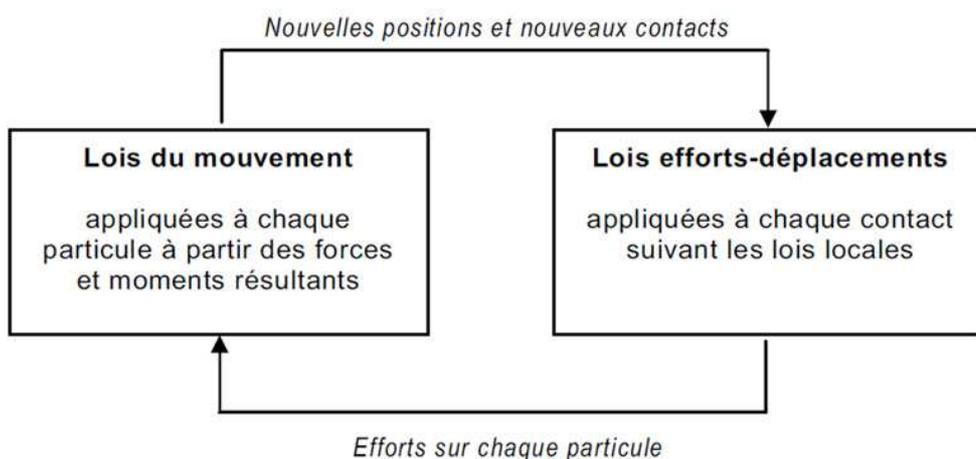


FIG. 2.1 – Cycle de calcul de la Méthode des Eléments Discrets.

Concernant la méthode des éléments discrets, son objectif est de déterminer les positions de toutes les particules et les forces appliquées sur toutes les particules, quel que soit l'instant t considéré

et pour un pas de temps dt . Au début du cycle de calcul, les positions de toutes les particules au temps t et de toutes les forces de contact au temps $t - dt$ sont connues.

Le calcul des positions de toutes les particules au temps $t + dt$ et de toutes les forces de contact au temps t est réalisé en quatre étapes (voir Fig. 2.1).

- Etape 1 : mise à jour des contacts et des interpénétrations entre particules à partir des positions des particules au temps t .
- Etape 2 : calcul et stockage de toutes les forces de contact au temps t à partir des interpénétrations calculées à l'étape 1 et des forces de contact au temps $t - dt$ par application de la loi de contact.
- calcul du déplacement des particules entre les temps t et $t + dt$ par résolution des équations issues du principe fondamental de la dynamique.
- calcul des positions des particules au temps $t + dt$.

A la fin du cycle de calcul, la connaissance des positions des particules au temps $t + dt$ et de toutes les forces de contact au temps t permet d'initier le cycle de calcul au pas de temps suivant.

2.2.1 Loi de mouvements

Le milieu granulaire est représenté par un assemblage de particules tridimensionnelles assimilables à un empilement de sphères. Dans l'assemblage, une particule p quelconque est caractérisée à tout instant par sa position p_i , sa vitesse en translation \dot{p}_i , et en rotation $\dot{\theta}_i$. En connaissant les rayons des particules, on peut donc établir à un instant donné une liste des contacts, sachant que deux particules sont en contact, si la distance entre les centres est inférieure ou égale à la somme des rayons. Pour chaque contact, on calcule l'effort exercé entre les particules en fonction des lois de contact (voir Sec. 2.3). Le torseur $[F_i; M_i]$ résultant des forces de contact sur la particule p entraîne une accélération en translation et en rotation suivant le principe fondamental de la dynamique. Si l'on note m la masse de l'élément et I son moment d'inertie, on a :

$$\ddot{p}_i = \frac{F_i}{m} \quad (2.1)$$

$$\ddot{\theta}_i = \frac{M_i}{I} \quad (2.2)$$

La position des particules, qui évolue au cours de la simulation, est déterminée à des intervalles de temps dt . Pour cela, les accélérations \ddot{p}_i et $\ddot{\theta}_i$ sont intégrées suivant le schéma en différences finies centrées du premier ordre traduit dans les équations (2.3) à (2.6). Dans ces équations, un indice après une expression entre crochets désigne l'instant auquel l'expression est évaluée. Cette méthode d'intégration émet l'hypothèse que les vitesses et les accélérations sont constantes sur chaque intervalle de temps.

$$[\dot{p}_i]_{t+\frac{dt}{2}} = [\dot{p}_i]_{t-\frac{dt}{2}} + [\ddot{p}_i]_t \cdot dt \quad (2.3)$$

$$[\dot{\theta}_i]_{t+\frac{dt}{2}} = [\dot{\theta}_i]_{t-\frac{dt}{2}} + [\ddot{\theta}_i]_t \cdot dt \quad (2.4)$$

$$[p_i]_{t+dt} = [p_i]_t + [\dot{p}_i]_{t+dt}.dt \quad (2.5)$$

$$[\theta_i]_{t+dt} = [\theta_i]_t + [\dot{\theta}_i]_{t+dt}.dt \quad (2.6)$$

Entre chaque calcul des déplacements, les forces entre particules sont recalculées en tenant compte des nouvelles positions; on dispose alors d'un système de forces de contact à jour pour le pas de temps suivant. Le concept de cet algorithme est schématisé à la figure 2.1. On peut traiter par cette méthode des problèmes dynamiques où le temps apparaît comme un paramètre pertinent. Dans notre cas, le temps n'aura généralement pas de sens précis. Les itérations ont pour rôle essentiel de faire converger le système vers un état d'équilibre statique. Pour qu'il y ait une convergence du calcul, il faut que la valeur du pas de temps (dt) utilisé soit toujours inférieure à celle du pas de temps critique ($dt_{critique}$).

2.2.2 Pas de temps critique

L'algorithme de résolution des équations du mouvement utilisé dans la MED étant de nature explicite, la pertinence des résultats obtenus n'est assurée que si le pas de temps dt ne dépasse pas une valeur limite ($dt_{critique}$). Cette valeur limite assure que la valeur maximale du pas de temps soit faible devant le temps nécessaire à ce que le contact s'établisse entre deux particules. Le pas de temps est donc directement lié au temps de contact. Quel que soit le modèle de contact utilisé, la durée du contact entre deux particules est fonction de la masse moyenne (m_i) des particules en contact et de leur raideur de contact équivalente k_i . Le temps de contact diminue lorsque la taille moyenne des particules diminue et lorsque leur raideur de contact augmente. La valeur du pas de temps critique ($dt_{critique}$) est calculée comme étant une fraction de la durée du contact binaire purement élastique entre les deux particules en contact ayant les tailles et les raideurs les plus pénalisantes.

$$dt_{critique} = \alpha \min\left(\sqrt{\frac{m_i^n}{k_i^n}}\right) \quad (2.7)$$

Où $\alpha \in [0,5; 1[$ et n varie de [1:nombre total de contact].

2.2.3 Code de calcul Yade

Le code de calcul YADE ("Yet Another Dynamic Engine") [Kozicki et Donzé (2008a), Kozicki et Donzé (2008b)], propose un environnement open source écrit en langage C++ permettant le développement de modèles numériques éléments discrets en trois dimensions. Il s'agit en fait d'une évolution du code SDEC [Donzé et Magnier (1995)] basée sur la méthode de calcul aux éléments discrets (MED), dont les capacités sont en perpétuelle évolution grâce à la mise en commun du travail de ses utilisateurs. Comme de nombreux codes utilisant la MED, le code YADE considère des éléments sphériques identifiés indépendamment par leur propre masse m , rayon r et moment d'inertie I . A chaque itération du cycle de calcul (voir FIG. 2.1), les positions des grains sont recalculées par intégration du principe fondamental de la dynamique à partir des forces résultantes définies par les

lois d'interaction locales interparticulaires (voir Sec. 2.2.1).

Dans sa version de base, le code YADE propose des lois d'interaction classiques de type "contact" qui sont définies par des rigidités linéaires normales et tangentielles et un angle de frottement inter-granulaire (Φ_c) (voir Sec. 2.3). Par ailleurs, le code offre la possibilité d'utiliser le moment en rotation résistant pour simuler la résistance au roulement propre aux grains réels non sphériques. Mais étant donné la complexité du comportement inter-granulaire à reproduire, nous faisons le choix de ne pas intégrer le moment résistant dans le modèle de contact qui sera défini dans la section 2.3), ainsi le jeu de paramètres micromécaniques à calibrer nous concernant se restreint finalement à la rigidité normale kn , la rigidité tangentielle kt et l'angle de frottement inter-granulaire (Φ_c). Le fait de ne pas intégrer de moment résistant en rotation pour chaque particule a pour conséquence de restreindre notre champ d'investigation et de ne pas pouvoir simuler des cas de compression avec déviateur pour des poudres avec une géométrie anguleuse.

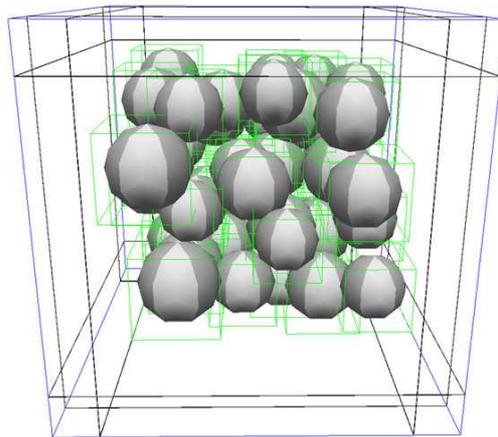


FIG. 2.2 – Représentation des boîtes englobantes (boîtes de couleur verte) dans le code éléments discrets open-source YADE.

Afin de permettre la convergence du système vers un état d'équilibre quasi-statique, outre la définition d'un pas de temps suffisamment petit pour assurer la stabilité du schéma d'intégration, les dissipations d'énergies sont rendues possibles grâce à un amortissement "non visqueux" s'appliquant indépendamment à chacun des éléments. Une particularité qui est propre au code de calcul YADE est l'algorithme de détection des contacts, qui est basé sur un principe de boîtes englobantes (voir FIG. 2.2). En effet chaque sphère est associée à une boîte englobante et pour savoir si il y a un contact potentiel entre deux sphères, les boîtes englobantes qui se touchent sont scrutées en procédant à un tri rapide à partir de leurs coordonnées (x,y,z) . Une fois que deux boîtes se touchent, le calcul de la distance entre deux sphères coûteux en temps de calcul est réalisé afin de calculer l'interpénétration (h) entre les sphères. D'autres algorithmes de détection des contacts tout aussi performants existent et les plus utilisés sont décrits dans cette thèse à l'annexe C.3.

2.3 Modèle de contact utilisé pour la compression de poudre

Dans la méthode des éléments discrets, le modèle de contact qui génère l'interaction entre les particules est écrit en fonction de différentes lois de contact. Chaque loi de contact intégrée au modèle dirige le comportement des sphères en contact pour un cas d'interaction bien précis. Dans un modèle de contact de base, on retrouve toujours une loi de contact normale (k_n), tangentielle (k_t) et de décharge (k_n décharge). Par la suite, ce modèle de contact peut être enrichi avec une loi qui décrit le moment résistant en rotation [Plassiard *et al.* (2009)] ou encore différents types de cohésion [Richefeu (2005)]. L'objectif du modèle de contact est de reproduire le comportement mécanique inter-granulaire réel pour tous les cas d'interactions qui peuvent survenir. Pour cela, on utilise des lois de contact basées pour la plupart sur une variable locale que l'on appelle l'interpénétration (h).

Pour la compression des poudres, différentes lois de contact normal ont été développées avec succès (voir Sec. 1.7.2). Ces lois de contact sont pour la plupart intégrées dans des modèles de contact avec ou sans cohésion, pour procéder à la modélisation de la phase de compression de la métallurgie des poudres. Concernant le modèle de contact qui est développé dans le cadre de cette thèse, les différentes lois qu'il intègre seront présentées dans la suite, mais nous pouvons d'ores et déjà annoncer que celui-ci n'intègre pas de lois de contact modélisant la cohésion et le couple résistant au roulement. Ce choix est fait pour qu'il n'y ait qu'un minimum de paramètres internes aux lois de contact à calibrer en même temps et pour comprendre l'influence de chaque composante du modèle de contact dans la comportement inter-granulaire. On rappelle pour mémoire que la composante normale du modèle de contact est basée sur une nouvelle loi de contact (voir Sec. 1.8) qu'il faudra valider pour les simulations éléments discrets.

2.3.1 Raideur normale de contact

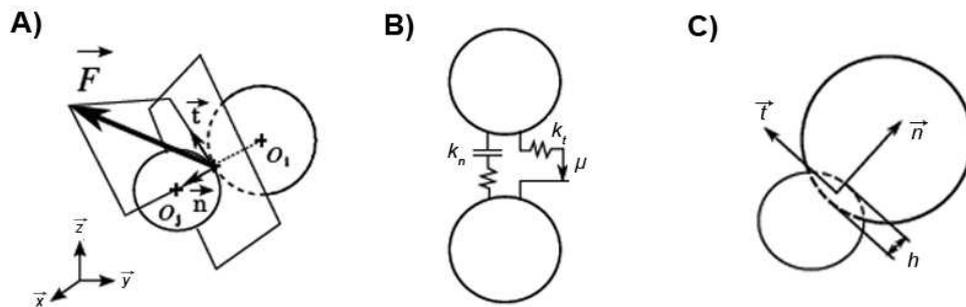


FIG. 2.3 – L'interaction entre deux particules discrètes en contact. A) Définition des notations et décomposition de la force d'interaction inter-granulaire. B) Interaction de contact selon Cundall et Strack. C) Définition de l'interpénétration (h)

Dans les simulations éléments discrets, les particules sont supposées déformables; on définit la composante normale F_n de la force de contact entre deux particules comme une fonction de l'interpénétration (h) dans toutes les lois de contact (voir Eq. 2.8).

$$F_n = k_n \cdot h \quad (2.8)$$

La déformation réelle des particules étant extrêmement complexe, on la prend en compte de façon globale par une légère interpénétration (h) au niveau du contact (voir Fig. 2.3), c'est l'approche "soft contact". La loi de contact normal de Hertz-Mindlin est la plus connue et la plus utilisée, c'est une relation non-linéaire basée sur la théorie de Mindlin et Deresiewicz. Elle traduit les petites déformations survenant lors du contact entre deux sphères élastiques de rayon r , en fonction du module de Young (E) et du coefficient de Poisson (ν) qui sont des constantes du matériau (voir Eq. 2.9). Cette expression qui est utilisée pour modéliser le stade 0 de la compression des poudres (voir Sec. 1.5.1) est la loi de contact normal originelle, sur laquelle sont basées toutes les lois de contact normal présentées dans le chapitre précédent. Hertz a été le premier à trouver la relation entre l'évolution de la surface de contact (A_c) entre deux sphères en fonction de l'interpénétration (voir Eq. 2.10). Grâce à cette relation, cette loi de contact élastique non-linéaire présente l'avantage d'avoir une majorité des paramètres matériaux (E, ν) et aucun paramètre à calibrer par différents tests expérimentaux.

$$k_n Hertz = \frac{dF_n}{dh} = \frac{4Eh^{\frac{1}{2}}r^{\frac{1}{2}}}{3(1-\nu^2)} \quad (2.9)$$

$$A_c = \frac{a^2}{r} \quad (2.10)$$

Dans la même lignée que la loi de contact de Hertz, la loi de contact normal intégrée dans le modèle de contact utilisée dans les simulations à venir est celle développée par Harthong [Harthong (2007)]. Cette loi de contact élastoplastique est privilégiée par rapport aux autres car elle semble être la seule à pouvoir modéliser la compression des poudres jusqu'à des valeurs élevées de compacité. Cette expression analytique qui a été présentée à la section 1.8 est issue d'analyses éléments finis menées avec la méthode élément finis multi-particules (MEFMP). L'expression de cette loi demande encore quelques ajustements et du développement dans le code YADE pour son intégration au sein d'un modèle éléments discrets.

En effet, l'intégration de la nouvelle variable locale ($\rho_{ij} local$ la densité locale) dans le code YADE, comme elle est définie dans les travaux de Harthong passe par le calcul de l'équation des plans de contact directs et virtuels, puis par la définition d'un polyèdre à partir de ces différents plans de contact (voir Sec. 1.8). Cette démarche nécessaire pour arriver au volume du polyèdre englobant une sphère semble très coûteuse en temps de calcul. De plus la définition des plans de contact virtuels avec la notion de gabarit virtuel n'est pas simple, car le rayon de la sphère virtuelle doit varier en fonction du nombre de voisins pour optimiser le calcul du nombre de plans virtuels.

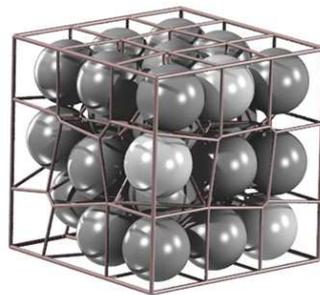


FIG. 2.4 – Représentation des cellules Voronoï pour un empilement de 32 sphères.

Pour rendre cette notion de densité locale plus accessible par d'autres codes éléments discrets, le terme de densité locale est redéfini sur la base des cellules de Voronoï [Gellatly et Finney (1982)] dans le cadre d'une collaboration avec Harthong et Chareyre. Ainsi chacune des cellules de Voronoï va décrire un polyèdre qui englobe initialement (i.e., avant la compression) une sphère. Cette astuce pour représenter la "déformation" des particules rigides par le diagramme de Voronoï a déjà été employée par Arzt (voir FIG. 1.20) pour écrire une expression analytique de l'évolution du nombre de coordination au cours de la déformation d'un empilement monodisperse de sphères (voir Sec. 1.7.3). On notera que les cellules de Voronoï peuvent être créées de différentes façons. Dans le cas le plus simple, la cellule de Voronoï est définie par des points dans l'espace Euclidien 3D. Pour les assemblages de sphères monodisperses, l'espace est divisé par des polyèdres où chacun d'eux va contenir une sphère. Chaque face du polyèdre est un plan médian d'un segment reliant le centre de deux sphères proches. Dans notre cas, où les assemblages de sphères sont monodisperses ou polydisperses, la construction du réseau de polyèdres se fait à partir de l'algorithme de tessellation de Dirichlet développé par P.G.L. Dirichlet en 1850 et amélioré par Gellatly et al., [Gellatly et Finney (1982)]. Chaque polyèdre est issu cette fois de l'assemblage de plans radicaux (i.e., plan perpendiculaire à un segment reliant les centres de deux particules proches, placé à une distance pondérée par le rayon des deux sphères) (voir FIG. 2.4).

En ce qui concerne l'intégration des cellules de Voronoï dans le code Yade, la programmation est réalisée à partir de la librairie CGAL développée en langage C++ [CGAL (2009)]. Ce logiciel libre est uniquement dédié à la construction géométrique et il contient différents algorithmes et structures de données à cet effet.

Fort de la collaboration mise en place avec Harthong, l'intégration de cette nouvelle loi de contact normal dans le code élément discret s'est poursuivie. En finalité, l'expression de la loi de contact en ressort modifiée et elle est maintenant sous la forme d'une raideur normale (voir Eq. 2.11). D'autres simplifications de l'expression de la loi de contact ont été réalisées dans le but de simplifier au maximum son écriture, tout en gardant le plus possible le comportement inter-granulaire initial induit par celle-ci. Cette mise au point a demandé un travail intensif avec l'auteur de la loi de contact, une collaboration qui s'est déroulée sur une année et qui a fait l'objet d'une publication internationale [Harthong *et al.* (2009)].

L'expression définitive de la loi qui a été intégrée dans Yade est présentée dans l'équation suivante:

$$\begin{cases} k_n = kr^*(k_1 + k_2 + k_3) \\ k_1 = \alpha(n)e^{\beta(n)\frac{h_{ij}}{r^*}} \\ k_2 = \alpha_1(n)e^{-\beta_1\frac{h_{ij}}{r^*}} \\ k_3 = \alpha_2(n)\frac{\rho_{ij}^{local}-\rho_{ij}^{initial}}{1-\rho_{ij}^{initial}} \end{cases}$$

(2.11)

Où $\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \beta$ et β_1 sont des paramètres constants ou fonction du paramètre d'écroutissage n , ils sont définis ainsi:

$$\begin{cases} \alpha(n) = \frac{0,97n-0,58}{1+\frac{n}{3}} - 4 \\ \alpha_1(n) = 15\left(\frac{n-1}{2n}\right) \\ \beta(n) = 1,75\left(\frac{n+1}{2n}\right) \\ \beta_1 = 8 \\ r^* = \frac{r_i \cdot r_j}{r_i + r_j} \end{cases}$$

En l'état, l'équation 2.11 représente la composante normale au sein du modèle de contact. La valeur de k_n est toutefois limitée par une valeur seuil ($k_n max$) qui est égale à la rigidité élastique du matériau. Cette rigidité $k_n max$ correspond à la rigidité du matériau dense quand il présente une compacité égale à 1. Au niveau du calcul, cette valeur seuil est atteinte lorsque la densité locale ($\rho_{ij local}$) est égale à 1, tout en sachant que lorsque la valeur de k_n est égale à $k_n max$, la valeur du pas de temps critique diminuera fortement. Pour éviter d'augmenter de façon outrageuse le temps de calcul, les simulations seront limitées à une valeur de compacité de 0,95.

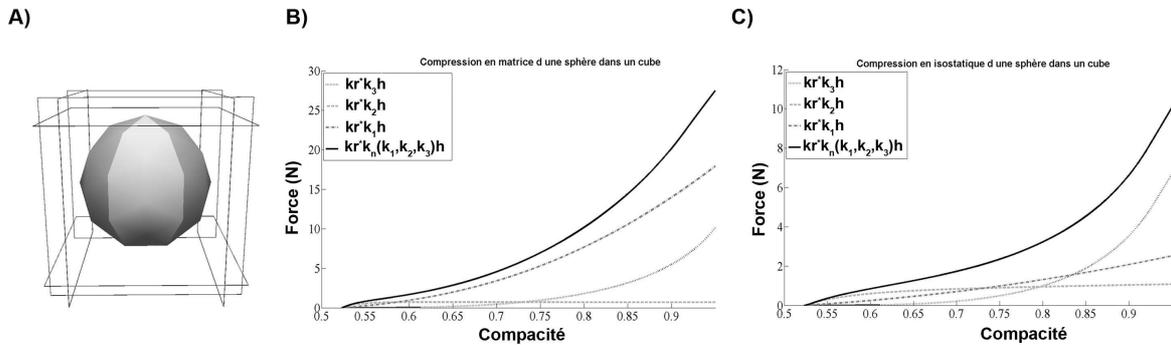


FIG. 2.5 – Courbes force-compacité résultant des différentes expressions k_1 , k_2 et k_3 pour une compression en matrice et isostatique d'une sphère dans un cube. A) Représentation d'une sphère dans un cube sous YADE. B) Compression en matrice d'une sphère. C) Compression isostatique d'une sphère.

Pour comprendre l'influence sur le comportement inter-granulaire de chaque expression k_1 , k_2 et k_3 issue de la raideur normale (k_n), nous représentons les courbes force-compacité générées par chacune de ces expressions lors de simulations de compression isostatique et en matrice d'une sphère (voir FIG. 2.5). Ces tests de compression modélisés avec YADE montrent que les expressions k_1 et k_2 jouent un rôle important sur la réponse aux faibles et moyennes valeurs de compacité (voir FIG. 2.5B-C); tandis que k_3 est la partie de la loi de contact qui va véritablement traduire l'augmentation exponentielle du niveau de contraintes pour les valeurs élevées de la compacité.

La décomposition de la raideur par trois expressions (k_1 , k_2 et k_3) montre également, pour une compression en matrice d'un empilement cubique, que l'expression k_1 est bien dédiée à reproduire la réponse de cet essai (voir FIG. 2.5-B). De plus, le fait d'avoir des expressions k_1 et k_2 élaborées et calées sur un type d'essai associé à un empilement cubique simple, explique pourquoi ces deux expressions ont une forme en exponentielle négative et positive (voir Sec. 1.8).

Afin de compléter le modèle de contact, une expression pour la composante tangentielle et pour la décharge doit être établie. Pour ce qui est de la raideur de décharge, elle intervient uniquement dans le sens normal du contact, quand deux particules en contact s'éloignent l'une de l'autre. Dans la réalité, après contact, la surface reste marquée par un plat (i.e., déformation locale) et un faible

rebond élastique non-linéaire intervient très localement. La déformation au contact étant permanente, le comportement local doit être reproduit par une raideur de décharge ($k_n decharge$) élastique non-linéaire. Pour obtenir cette raideur de décharge, on se base sur la raideur élastique non-linéaire de Hertz ($k_n Hertz$). Ainsi l'équation de la raideur de décharge est prise arbitrairement et elle est égale à :

$$k_n decharge = 100.k_n Hertz \quad (2.12)$$

Les figures 2.6A-B représentent le modèle de contact élastoplastique utilisé. On observe à la figure 2.6-B le comportement complet inter-granulaire dans la direction normale du contact. La décharge intervient lorsque les particules en contact s'éloignent l'une de l'autre (point de décharge), la raideur de décharge qui a une valeur élevée annule la force de contact rapidement. Si la recharge intervient entre ces deux particules, la valeur de la force suit le même trajet que pour la décharge. Une fois que la force atteint de nouveau le point de décharge, le modèle de contact bascule de la raideur de décharge ($k_n decharge$) à la raideur normale élastoplastique (k_n). Grâce à ce schéma numérique la déformation au niveau du contact est modélisée

2.3.2 Raideur tangentielle de contact

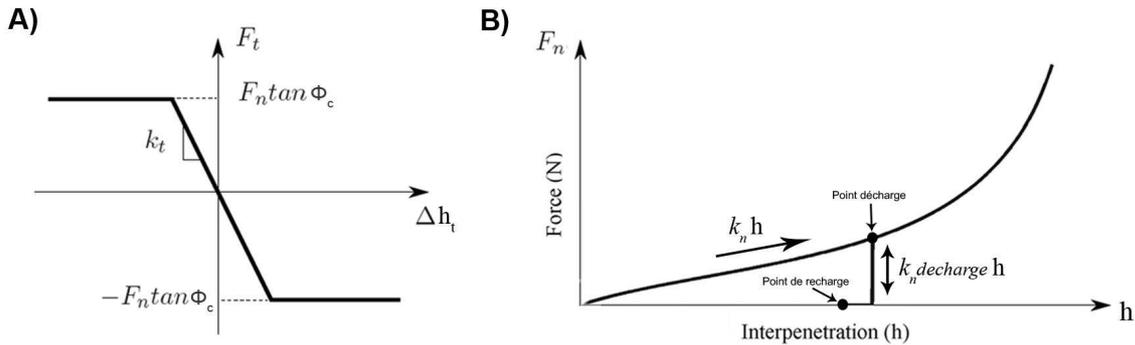


FIG. 2.6 – Comportement élastoplastique de l'interface entre deux sphères en contact dans la direction normale et tangentielle. A) Loi de contact tangentielle, où Δh_t est le déplacement relatif de 2 sphères en contact dans la direction tangentielle. B) Loi de contact normale, avec k_n la raideur normale et $k_n decharge$ la raideur de décharge. La décharge intervient lorsque deux sphères en contact s'éloignent l'une de l'autre.

Pour modéliser le comportement d'un matériau granulaire frottant, le comportement inter-granulaire dans la direction tangentielle doit être modélisé. Pour cela, on considère que les deux grains en contact sont reliés par un ressort dans la direction tangentielle au plan de contact (voir Fig. 2.3). Le ressort de rigidité (k_t) est associé à un patin d'angle de frottement Φ_c . Ainsi suivant la direction tangentielle au contact, cette loi d'interaction engendre un comportement élastoplastique parfait (voir Fig. 2.6-A) qui est décrit par l'équation suivante:

$$\Delta F_t = k_t \Delta h_t \quad |F_t| \leq F_n \tan \Phi_c \quad (2.13)$$

Où l'incrément de déplacement tangentiel relatif Δh_t est la projection sur le plan tangent au contact de l'incrément du déplacement relatif au point de contact des deux grains impliqués. Dans le

modèle de contact utilisé, le choix a été fait d'y intégrer cette loi de contact tangential avec une valeur de k_t constante égale à 0,5. Il faut savoir qu'un autre type de loi de contact tangential employé pour la compression de poudre existe. Cet autre choix consiste à prendre à la place d'un coefficient $\tan\Phi_c$ constant, une loi de frottement [Martin *et al.* (2003)]. En effet, Martin et al. ont émis l'hypothèse que cette relation (voir Eq. 2.13) avec un coefficient de frottement constant ne peut s'appliquer en l'état à la compression des poudres ; car elle surestime la valeur de la force tangentielle quand le contact a plastifié et que la valeur de la force normale est grande.

En conclusion de cette partie, on peut dire que le modèle de contact que l'on utilisera dans les simulations éléments discrets à venir est inédit, dans le sens où l'association des différentes lois de contact qui le composent n'a jamais été réalisée pour d'autres modélisations. Dès lors qu'un tel modèle est développé pour des simulations éléments discrets, on se doit de le valider avant d'entreprendre des simulations à caractère prédictif; une validation qui va se faire au prochain chapitre et qui passe par une certaine maîtrise de la génération d'empilements numériques afin que les assemblages de sphères utilisés pour le calcul soient assez représentatifs du milieu granulaire étudié.

2.4 Les empilements numériques représentatif de la poudre réelle

2.4.1 Volume élémentaire représentatif et variabilité des résultats

Dans les simulations aux éléments discrets, l'échelle à laquelle est modélisée le milieu granulaire étudié est importante et doit être prise en compte. Dans notre étude, toutes les simulations devraient être faites à l'échelle du grain (i.e., échelle microscopique), donc chaque particule constituant la microstructure du matériau devrait être représentée par un élément discret. Cette échelle permet en effet d'étudier l'influence de l'hétérogénéité du milieu, mais en contre partie elle requiert pour la modélisation beaucoup de ressources informatiques. Donc il faut avoir conscience que représenter la centaine de millions de grains de poudre dans un calcul élément discret n'est pas faisable et que cette application à ces limites.

Un paramètre important dans la démarche de la modélisation à l'échelle des grains du comportement global de la poudre est la taille du domaine microscopique représenté. Ce paramètre est bien connu des chercheurs qui utilisent les techniques d'homogénéisation et des approches multi-échelles [Cambou et Jean (2001)]. Pour représenter un comportement macroscopique, il faut que la taille du domaine microscopique soit assez grande (i.e., un grand nombre de particules discrètes) pour compenser les fluctuations stochastiques (i.e., variations aléatoires de la réponse) induites par les propriétés du matériau. D'un autre côté, pour des raisons de temps de calculs évidentes, le domaine microscopique doit être le plus petit possible. La taille de la cellule qui répond à ces critères est appelée volume élémentaire représentatif (VER).

Plusieurs définitions du VER existent dans la littérature, mais elles apparaissent non triviales pour établir des expressions servant à déterminer la taille du VER dans le cas d'un matériau hétérogène. Sans chercher à être complet, nous listons quelques une de ses définitions:

- Hashin [Hashin et me (1983)]: Le VER est une caractéristique dépendante de la microstructure

qui est utilisée pour déterminer les propriétés effectives du matériau¹. Le VER doit être assez grand pour contenir suffisamment d'informations sur la microstructure afin d'être représentatif, cependant il doit être beaucoup plus petit que le volume du matériau.

- Drugan and Willis [Drugan et Willis (1996)]: Le VER est le plus petit élément de volume d'un matériau qui génère une représentation macroscopique du comportement suffisamment précise pour définir une réponse mécanique moyenne.
- Ostoja-Starzewski [Ostoja-Starzewski (2002)]: Le VER peut être uniquement défini pour deux situations: (i) la cellule unitaire dans une microstructure périodique, et (ii) un volume contenant un nombre infini de particules à l'échelle microscopique (e.g., grains).

De toutes les définitions précédentes, le VER qui génère des propriétés statistiquement homogènes peut être défini pour un milieu granulaire désordonné (i.e., aucun arrangement périodique) comme un volume infiniment grand. En pratique, une cellule microscopique est choisie en accord avec l'erreur statistique admissible par l'utilisateur sur la réponse mécanique. Il faut savoir que dans le cas de l'approche discrète, si l'arrangement initial des grains est aléatoire, il existe une multitude de configurations initiales différentes possibles qui entraînent une variation de la réponse lors de la sollicitation mécanique de l'échantillon. Pour chaque configuration initiale, la méthode numérique fournit une approximation de la solution exacte correspondante. La variabilité des résultats est donc en définitive inhérente à l'approche discrète, indépendamment des erreurs liées à la méthode de résolution. Et plus le nombre de particules est important dans l'empilement, plus la réponse observée sera indépendante de la configuration initiale de celui-ci. Il faut également prendre en compte le fait que des chercheurs ont défini à travers leurs travaux des tailles de VER qui varient. En effet, Radjaï définit la taille du VER comme étant au delà de 10 fois le diamètre moyen des grains pour un cas en 2D ce qui représente 1.000 disques dans les simulations [Radjaï (2001)]. Aujourd'hui, force est de constater que la "tendance" en ce qui concerne la taille du VER est d'avoir 10.000 sphères dans les simulations.

A ce nombre de 10.000 sphères que l'on retrouve dans une grande majorité des simulations éléments discrets, on peut opposer le fait que beaucoup de propriétés physiques sont considérées sensibles à la structure et pour cela la taille du VER ne peut être fixe. Ces propriétés sensibles ont un éventail de valeurs de fluctuation plus étendu que les propriétés qui ne sont pas sensibles à la structure. Ainsi la détermination d'un VER n'est pas triviale et ne doit surtout pas se limiter à un nombre fixe de particules prédéfini par une tendance. Ce nombre de 10.000 sphères ne sera en aucun cas adapté à toute la variété des calculs effectués avec la MED. On préconise, dans le cas d'un matériau granulaire, une étude paramétrique qui indiquera en fonction des critères de l'utilisateur (propriétés physiques calculées, l'erreur admissible sur les résultats, ...) la taille du VER la plus optimale.

En conclusion, on peut supposer qu'il existe toujours une loi de comportement (ou une réponse mécanique macroscopique) asymptotique dans la limite des grands systèmes [Chareyre (2003)]. Nous observerons cette assertion lors de la validation du modèle de contact (voir Sec. 3.3), où des simulations avec différentes configurations initiales d'empilements et avec un nombre différent de particules seront effectuées.

1. à l'échelle macroscopique le milieu granulaire est vu comme un bloc continu (un matériau)

2.4.2 La génération d'empilements de sphères

L'intérêt grandissant pour la modélisation numérique des microstructures des matériaux, avec comme perspective d'étudier les propriétés micromécaniques et de les relier à un comportement macroscopique [Redanz et Fleck (2001)] présente de fortes contraintes. On l'a vu dans la section précédente, ce type de modélisation requiert comme première étape, la création d'empilements désordonnés de sphères de tailles différentes [Feng *et al.* (2003), Cui et Sullivan (2003)], des empilements virtuels ayant des propriétés géométriques proches ou identiques aux milieux granulaires réels [Troa-dec (1993), Oger (1987), Aim et Goff (1967), MacGeary (1961)]. La génération de tels empilements numériques avec des particules à géométrie simplifiée est indispensable pour avoir des résultats rapides tout en maintenant une bonne adéquation avec les observations expérimentales.

Cette précaution portée à la génération de l'échantillon numérique concerne la modélisation de la compression des poudres métalliques abordée à une échelle microscopique. Il est utile de préciser que ces types de matériaux particuliers (poudres métalliques, poudres pharmaceutiques, céramiques, etc.) possèdent certaines caractéristiques (distribution de la densité relative, granulométrie, orientation géométrique des contacts, nombre de contacts par particule) qui changent du tout au tout en fonction du type de poudre et de l'historique des écoulements imposés aux grains, notamment pendant les phases de remplissage et de transfert (voir chapitre 1). Par ailleurs, les échantillons numériques ainsi créés vont constituer et rassembler les conditions initiales à l'étude des comportements mécaniques durant la compression proprement dite.

Dans ce contexte général, l'intérêt de cette section est d'approfondir notre connaissance sur les différentes modalités de construction d'assemblages numériques de sphères choisis au sein de la littérature pour reproduire la texture du matériau granulaire avant compression et dans le même temps de présenter un nouvel algorithme géométrique de génération d'empilement de sphères. La présentation choisie consacrera la première partie de cette section au développement de la notion de modélisation d'un tas de grains par un empilement de sphères comme étape initiale aux calculs DEM. Dans la deuxième partie, un inventaire des algorithmes dynamiques et géométriques de génération les plus employés pour la création d'échantillons numériques sera présenté. Puis dans la dernière partie, un nouvel algorithme géométrique de génération développé dans le cadre de la thèse sera présenté.

2.5 La modélisation numérique d'un tas de grains de poudres dans la littérature

Des sections précédentes, on sait que l'empilement de particules sphériques prend une part importante pour la bonne modélisation de la phase de compression des grains de poudre. Avec la notion du VER, il faut que l'empilement de sphères générées pour les simulations contienne les hétérogénéités présentes dans le milieu granulaire. De plus, il a d'ores et déjà été identifié que les propriétés mécaniques de la pièce finie sont liées à sa microstructure (i.e., la taille des grains, la distribution de taille des vides) et que la présence de défauts microscopiques conduisent inexorablement à une pièce défectueuse [Evans (1982), Danzer *et al.* (2008)]. Afin de connaître la texture granulaire de l'empilement avant compression, dans les années soixante, on s'est fortement intéressé aux travaux de recherches sur les fluides, les verres et les matériaux amorphes. Les chercheurs de la métallurgie des poudres ont ainsi découvert les travaux de Bernal [Bernal (1960)] et Scott [Scott (1960)], qui ont fait un certain nombre d'expériences de lâchers de billes de roulement dans un container. Grâce à ces

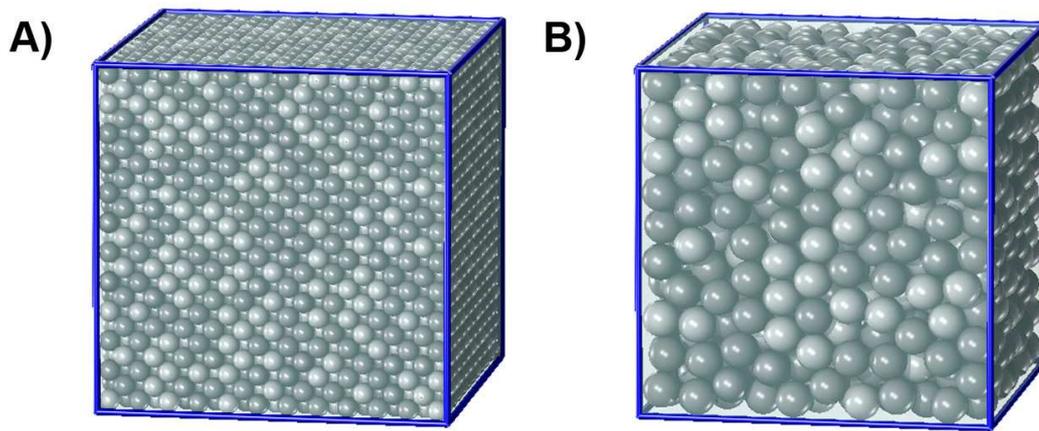


FIG. 2.7 – Les différents assemblages de sphères de taille unique existant dans la littérature. A) Empilement ordonné de sphères de taille unique (Ordered Close Packing). B) Empilement aléatoire compact de sphères de taille unique (Random Close Packing).

expériences et à une forte culture mathématique, trois configurations différentes d'empilements de sphères de taille unique (i.e., sphères de taille unique) ont pu être identifiées :

- Le Random Loose Packing (RLP) qui a une compacité équivalente à 0,58, est l'empilement désordonné de sphères de taille unique obtenu sans aucune phase de réarrangement [Onoda et Liniger (1990)].
- Le Random Close Packing (RCP) qui a une compacité proche de 0,64, est l'empilement désordonné de sphères de taille unique connu pour être le plus compact [Berryman (1983)] (voir FIG. 2.7-B).
- Le Ordered Close Packing (cubiques faces centrées ou hexagonal compact) qui a une compacité égale à 0,7405, est selon une majorité des mathématiciens, l'empilement ordonné de sphères de taille unique le plus dense, qu'il soit possible d'obtenir (voir FIG. 2.7-A).

Depuis ces travaux, la très grande majorité des empilements de sphères générés pour la simulation de la phase de compression sont des assemblages de sphères de taille unique de type RCP. Ce choix surprenant s'explique par un aspect historique, qui veut que la plupart des résultats numériques de références dans ce domaine ont été obtenus avec ce type de configuration [Scott (1960)]. La dernière raison qui renforce l'hégémonie de l'empilement RCP dans les simulations numériques discrètes de type DEM, est que celui-ci a l'avantage d'être stable mécaniquement. A partir de cette configuration l'empilement ne pourra être densifié que sous déformation plastique des grains au niveau des zones de contacts.

A travers toutes ces bonnes raisons, la modélisation plus précise de la texture granulaire de la poudre réelle avant compaction est relayée à un second plan pour une question de "commodités". Pour autant, l'importance de la distribution de tailles des particules et du nombre de contacts par particule dans le comportement mécanique d'un empilement sous sollicitations mécaniques semble prévaloir. Cette réalité incite à faire l'hypothèse que dans les futurs travaux de recherches soutenus par les avancées technologiques, comme par exemple les données accessibles par la tomographie, sera pris en compte l'ensemble des propriétés granulaires dans les modélisations.

Pour résumer, peu de simulations micromécaniques de la phase de compression de grains de poudres ont été réalisées jusque là en tenant compte réellement de l'hétérogénéité du milieu granulaire réel (nombre de coordinations, distribution de la taille des particules et de la distribution de la densité relative,...). Il est donc intéressant de connaître dans le cadre de futurs travaux, la propension des différents algorithmes de génération d'échantillon à générer des assemblages de sphères qui reflètent la texture granulaire d'un matériau comme la poudre métallique.

2.6 Les algorithmes de générations d'assemblage de sphères

2.6.1 Les algorithmes dynamiques

Ce type d'algorithme intègre une procédure de génération qui est basée sur la simulation par la méthode des éléments discrets [Roux *et al.* (2007)]. Ainsi, la position finale de chaque sphère appartenant à l'empilement est dictée par les nombreuses forces physiques extérieures qui lui sont appliquées. Sachant que la formation d'un tas de grains avant compression est issue dans la réalité d'un procédé dynamique où de nombreuses forces d'interactions agissent sur les particules, l'intérêt des algorithmes dynamiques de génération est immédiat. En effet, leur capacité à reproduire le procédé de mise en place des grains de poudre avec toutes les différentes forces (gravité [Stroeven et Stroeven (2003)], Van der Walls [Yen et Chaki (1992)], électrostatiques [Siiriä et Yliruusi (2003)], capillarités [Scholtes *et al.* (2009)], ...) qui y sont associées, est l'argument qui fait que certains chercheurs voient en ce type d'algorithme, la seule méthode capable de reproduire correctement la texture d'un matériau granulaire [Liu et Yuan (2000), Yang *et al.* (2000)].

Aujourd'hui, il existe un nombre très important d'algorithmes dynamiques qui créent des empilements de sphères. Cette grande variété découle du fait que les chercheurs ont rivalisé d'ingéniosité pour créer des algorithmes avec différentes lois de contacts inter-granulaires très réalistes, couplées à des démarches de génération novatrices. Ainsi, il est possible de trouver au sein de la littérature des algorithmes dynamiques avec une démarche basée sur: la compression isotrope [Bargiel et Moscinski (1991)], le grossissement des sphères [Kansal *et al.* (2002), Lubachevsky et Stillinger (1990)], la compression uniaxiale [Dutt *et al.* (2005), Jiang *et al.* (2003)] ou encore un couplage avec une approche cinématique [Fu et Dekelbab (2003)], etc...

2.6.1.1 L'algorithme de compression isotrope

Cette méthode [Skrinjar et Larsson (2004), Roux *et al.* (2007)] a été utilisée pour générer des échantillons compacts pour les simulations en éléments discrets. Dans cette méthode:

1. Toutes les particules sont aléatoirement positionnées dans un volume cubique, suffisamment grand de façon à ce qu'aucun recouvrement ou intersection n'apparaisse entre les particules. Le rayon des particules peut être ainsi contrôlé pour suivre une distribution de tailles données (voir Fig. 2.8-A).
2. Ensuite, une loi de contact généralement du type Hertz avec un coefficient de frottement (Φ_c) proche de zéro est intégrée entre les particules, afin qu'il y ait un maximum de désordre lors de la phase de rapprochement des parois du volume cubique. Cette phase consiste donc à translater les parois vers le centre du domaine d'étude, en leur imposant un déplacement ou en leur appliquant une pression. Cette procédure permet aux particules de se mouvoir pour que l'empilement tende vers un état dense du type d'un empilement RCP (voir Fig. 2.8-B).

3. Une fois que sont atteints la fraction volumique voulue et l'état d'équilibre, une valeur de frottement plus réaliste est ensuite affectée dans le but d'effectuer une simulation numérique plus réaliste sous des conditions de chargement.

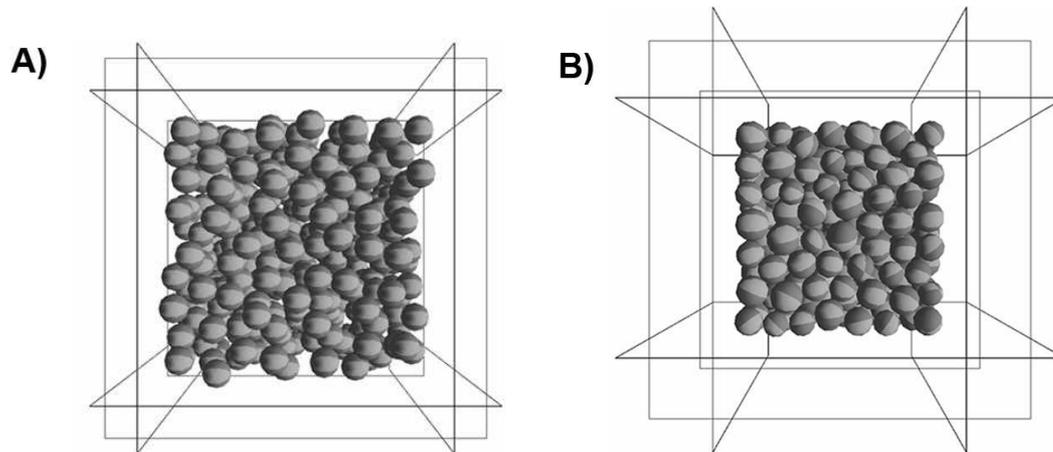


FIG. 2.8 – L'algorithme dynamique de génération d'empilement par le rapprochement des murs. A) Placement des sphères avec un rayon prédéfini de façon aléatoire dans un container plus grand. B) Phase de rapprochement des murs (diminution du volume de l'échantillon).

Cette méthode est utilisée pour la modélisation d'un tas de poudre car, avec une telle procédure, le contrôle de la distribution de tailles des sphères et de la compacité finale est possible, tout en ayant un nombre élevé de contacts par particule. Il convient également de souligner la présence d'une hétérogénéité de l'échantillon final due aux effets de bords. Cette variation de la compacité se manifeste par un empilement plus lâche au centre de l'assemblage que sur les parois du volume cubique, à cause des blocages créés par l'apparition de voûtes. Ce phénomène est à l'inverse de ce que l'on observe dans les assemblages de poudres métalliques avant compression (voir chapitres précédents). De plus, l'orientation géométrique des vecteurs de contacts est isotrope et n'est donc pas représentative de la légère anisotropie qui est présente dans les poudres réelles déposées sous gravité dans une matrice. Mais le plus grand inconvénient qui est imputable à cet algorithme, mais aussi à tous ceux qui utilisent l'approche dynamique dans leur démarche de génération, est le temps de calcul qui peut s'avérer particulièrement long dans le cas où la modélisation d'un échantillon composé de très nombreuses sphères s'avère nécessaire.

2.6.1.2 L'algorithme de grossissement des sphères (méthode d'expansion)

Cet algorithme de génération fait partie, tout comme le précédent, des procédures de mise en place d'échantillons les plus utilisés dans les simulations DEM. Il a été dans un premier temps développé par Lubachevsky [Lubachevsky et Stillinger (1990)] pour les échantillons de sphères avec un rayon unique, puis il a été adapté par Kansal [Kansal *et al.* (2002)] pour les empilements de tailles différentes. La démarche qui y est associée peut se décrire en deux étapes:

1. Comme dans la méthode de génération précédente, chaque particule est aléatoirement positionnée sans aucun recouvrement entre les particules voisines déjà placées (voir FIG. 2.9-A). Dès qu'une particule interpénètre une autre, sa position sera légèrement changée. Si toutefois,

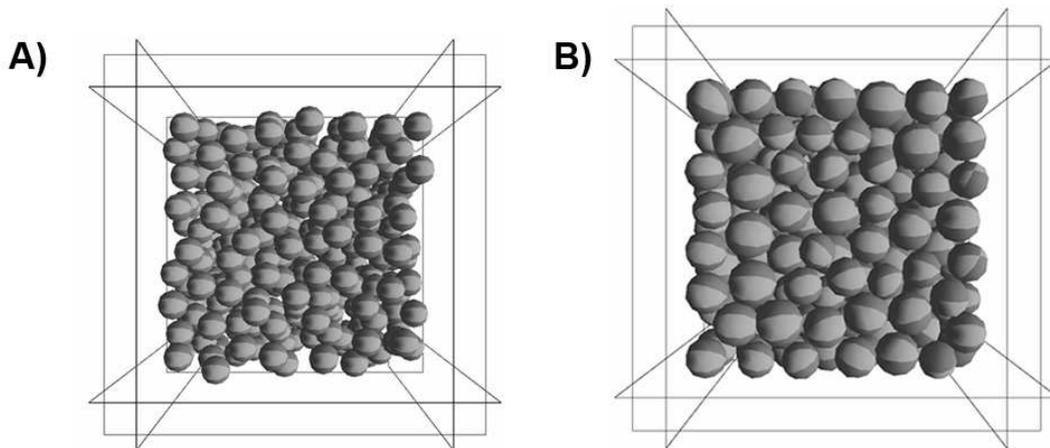


FIG. 2.9 – L’algorithme dynamique de génération d’empilement par le grossissement des particules. A) Placement des sphères avec un rayon prédéfini de façon aléatoire dans un container plus grand. B) Phase de grossissement itératif des sphères.

après plusieurs changements, le recouvrement n’est toujours pas résorbé, la particule sera supprimée. Cette première étape a donc besoin d’un grand volume pour former l’échantillon avec le nombre désiré de particules. Si le volume initial est trop petit, un échantillon de taille pré-établi en termes de nombre et de taille de sphères ne peut pas être formé. D’un autre côté, si le domaine initial est trop grand, la simulation ne sera pas efficace (i.e., on peut avoir un temps de mise en place de l’échantillon trop important). Afin de dépasser cette limitation, dans la méthode d’expansion, toutes les particules sont aléatoirement positionnées dans le domaine d’étude avec un rayon réduit intentionnellement. Il importe qu’aucune force de contact ne soit développée entre deux particules.

2. Une fois que toutes les particules sont positionnées, leurs rayons sont graduellement restaurés, tandis que la pression de consolidation est gardée constante sur les parois (voir FIG. 2.9-B). Durant cette phase de grossissement itératif, des interpénétrations apparaissent, ainsi que des forces d’interactions dues à la loi de contact de Hertz qui est intégrée dans la plupart des simulations. Cela permet aux particules de se réarranger entre elles, pour tendre vers un état compact globalement en équilibre.

Cette méthode d’expansion des rayons tout comme la méthode précédente est très efficace pour la génération d’échantillons de sphères. L’utilisateur peut, à travers de telles méthodes, contrôler des paramètres tels que la distribution de la taille des sphères ainsi que la compacité finale pour un empilement qui sera géométriquement (i.e., orientation des contacts) isotrope. Le seul inconvénient de cette méthode et pas des moindres est un nombre de contacts par particule qui est relativement faible, pour un empilement de sphères de tailles différentes. En sachant que pour les poudres métalliques, la géométrie polyédrique des grains favorise le nombre de contacts entre particules pour des compacités relativement lâches (voir Sec. 1.3), cette méthode ne semble pas la mieux appropriée à nos simulations numériques de la compression de poudre.

2.6.1.3 L’algorithme couplé avec une méthode cinématique

Cette méthode de génération est développée pour modéliser le processus d’empilement des particules avec des tailles variables dans un espace 3D. La démarche de l’algorithme se fait en deux

étapes de simulation : une simulation cinématique et une autre dynamique

1. L'étape qui concerne la partie cinématique de la simulation consiste à réaliser une procédure de déposition verticale avec détection de contacts des particules suivant l'axe Z, au sein d'un container. Cette étape simule uniquement le mouvement cinématique des grains. Il en résulte un arrangement géométrique des particules dans l'empilement. Ainsi à la fin de cette première étape, la particule termine dans une position stable (i.e., le centre de la sphère est dans un triangle formé par trois points de contact issus de ses objets de support). Les objets qui supportent les sphères en position stable peuvent être des parois ou des sphères. La compacité finale de l'empilement à la fin de cette première phase est très proche de celle d'un random loose packing (RLP) (voir FIG. 2.10-A).
2. Ensuite, l'étape avec la partie dynamique de la simulation commence à partir des sphères placées à l'étape précédente. Avec cette étape, l'empilement de sphères va tendre vers un état plus compact, en utilisant la méthode des éléments discrets et en intégrant l'effet de la gravité (voir FIG. 2.10-B).

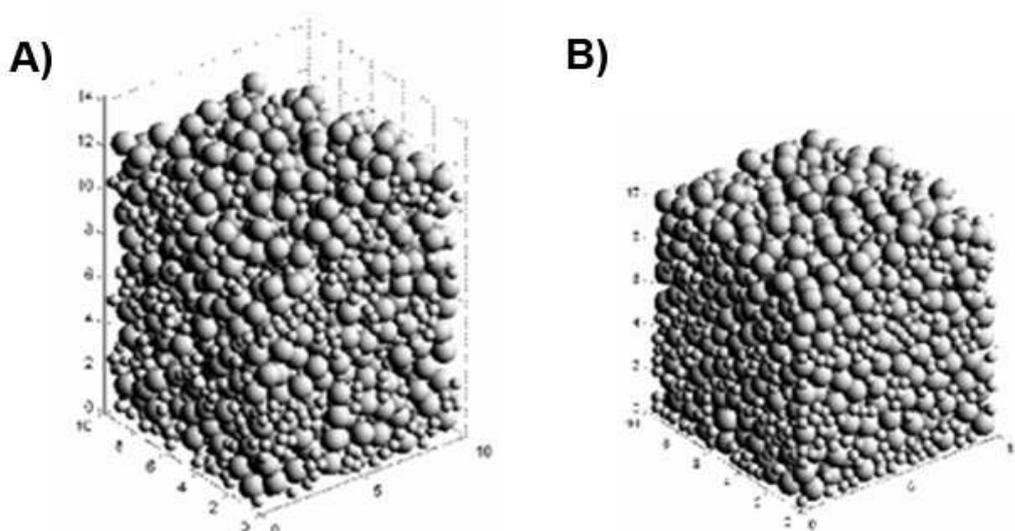


FIG. 2.10 – L'algorithme dynamique de génération d'empilement couplé avec une approche cinématique. A) Empilement de sphères après la simulation cinématique. B) Empilement de sphères après la simulation dynamique.

La simulation cinématique de l'algorithme présentée ci-dessus permet d'atteindre un état proche du random loose packing. Avec cette première étape, l'empilement de sphères qui en résulte ne peut avoir une compacité très élevée. En effet, les auteurs ont fait l'hypothèse qu'une fois stabilisée la sphère aura sa position fixée. Alors pour obtenir un tas de sphères plus compact, la simulation dynamique est employée dans une seconde étape avec la présence des forces extérieures et des forces de contact adaptées.

L'avantage de cet algorithme est que la simulation cinématique requiert un temps de calcul très faible pour déterminer en premier lieu la position des particules. Ce type d'algorithme, dédié à la modélisation du béton de Portland, peut être appliqué à la modélisation des poudres métalliques avec un certain succès. Le seul impératif est que la phase de simulation dynamique arrive à reproduire

par le biais des différentes lois de contacts, une certaine réalité physique qui prend place dans le processus de fabrication. Lors de cette phase de simulation dynamique, il convient de prendre en compte le temps du calcul qui peut rapidement s'avérer très coûteux.

De ces présentations succinctes sur différents algorithmes dynamiques apparaissent certaines contraintes qui sont liées à la modélisation numérique d'un tas de poudre :

1. La première contrainte est le temps de calcul. Actuellement, les algorithmes dynamiques les plus utilisés le sont pour leur procédure efficace (grossissement des sphères, rapprochement des murs) qui permet un gain de temps dans la mise en place de l'échantillon par rapport à d'autres approches dynamiques plus lentes (déposition gravitaire).
2. La seconde contrainte concerne la compacité de l'échantillon de grains, la plupart des méthodes de génération dynamiques sont capables de contrôler cette valeur de façon très générale. Mais plus rares sont celles qui réalisent un contrôle localisé de la compacité dans l'empilement pour y reproduire une distribution préétablie à l'avance de la compacité.
3. La troisième et dernière contrainte concerne les autres propriétés de la texture granulaire telles que : le nombre de contacts par particule, la distribution de taille des particules et l'orientation géométrique des contacts au sein de l'empilement. Ces propriétés peuvent dans la plupart des algorithmes dynamiques de génération être reproduites très fidèlement.

Dans le cadre de ces premières présentations, il a été montré que deux types principaux d'algorithmes dynamiques de génération conviennent à la modélisation d'échantillons de grains de poudre. Mais l'inconvénient majeur de ces deux méthodes et de l'approche dynamique en général sont les temps de calcul associés aux modélisations afin d'aboutir à des empilements représentatifs.

2.6.2 Les algorithmes géométriques

Les algorithmes géométriques génèrent des empilements de sphères en utilisant uniquement des fonctions mathématiques appliquées aux sphères; celles-ci leur confèrent une grande rapidité d'exécution par rapport à l'approche dynamique. Comme pour le cas des algorithmes dynamiques, le nombre des algorithmes géométriques existant au sein de la littérature est important. En effet, un certain nombre de chercheurs ont développé des algorithmes géométriques pour créer des assemblages de sphères dans un container de formes : cylindrique [Mueller (2005)], cubique [Jodrey et Tory (1985)], ou encore conique [Kadushnikov et Nurkanov (2001)].

Afin de positionner les principes de l'approche géométrique intégrée dans les algorithmes, deux méthodes géométriques différentes, qui ont été éprouvées et validées par un certain nombre de simulations, sont préalablement présentées.

2.6.2.1 L'algorithme de réarrangement collectif

L'algorithme de réarrangement collectif [Jodrey et Tory (1985)] génère des empilements de sphères de taille unique de type random close packing (RCP) à partir d'un placement aléatoire des sphères dans le domaine étudié. Cet algorithme est utilisé pour produire de grands empilements de sphères avec une compacité qui peut être très élevée [Bargiel et Tory (1993)].

1. L'algorithme commence par créer une configuration initiale de sphères molles (i.e., les sphères

peuvent s'interpénétrer). Ainsi, un nombre total de sphères N sont placées aléatoirement dans un container parallélépipédique avec un diamètre choisi (D_{in}) afin de respecter une certaine distribution de tailles des particules (voir Fig. 2.11-A).

2. L'algorithme améliore cette configuration initiale pas à pas. Lors de la première itération, deux diamètres distincts sont assignés à chaque sphère : un diamètre réel (D_{in}) et un grand diamètre virtuel (D_{out}). Une fois ces deux diamètres mis en place, l'algorithme va réduire les interpénétrations par deux types d'opérations:
 - En écartant le long de la droite passant par leurs centres respectifs les deux sphères qui ont la plus forte valeur de recouvrement (voir Fig. 2.11-B).
 - En faisant une diminution progressive du rayon virtuel (D_{out}) de chaque sphère

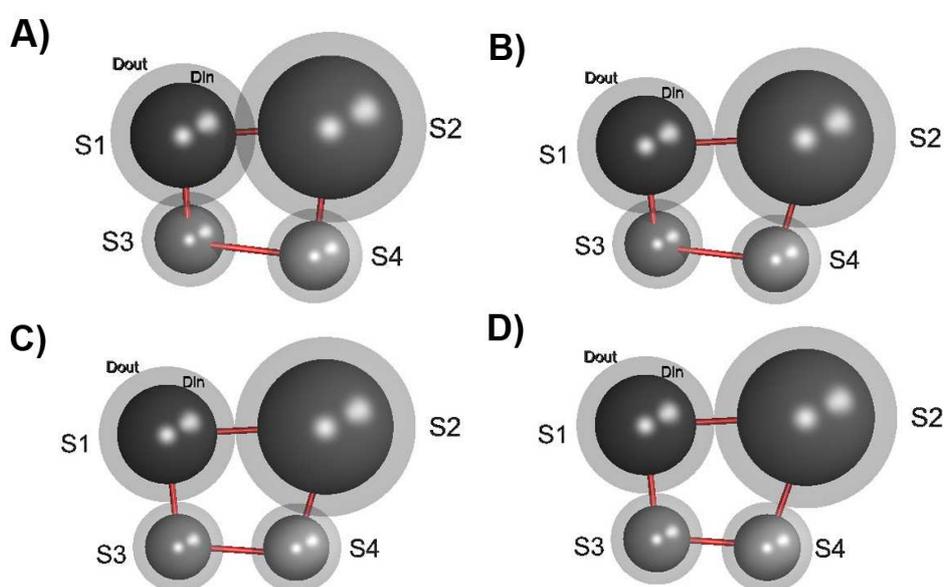


FIG. 2.11 – L'algorithme géométrique de réarrangement collectif entre quatre sphères. A) On répertorie les différents recouvrements entre les sphères (S1, S2, S3, S4). B) Puis on diminue le recouvrement le plus important entre la sphère S1 et S2 en déplaçant les sphères le long de la droite passant par leur centre. C) Le recouvrement le plus important se trouve maintenant entre la sphère S1 et la sphère S3. D) Le dernier recouvrement entre deux sphères S2 et S4 sera annulé sans créer de nouveaux recouvrements.

Donc à chaque itération, l'algorithme va détecter la plus forte valeur de recouvrement, puis il va utiliser l'une de ces deux opérations pour réduire et annuler le recouvrement entre les deux sphères concernées. Par ailleurs, l'opération 1 peut être exécutée tant que la valeur du recouvrement qui va être créée avec d'autres sphères voisines est plus faible que la valeur recouvrement maximum présente dans l'empilement (voir Fig. 2.11C-D). Concernant l'opération 2, elle peut être également effectuée tant que le gabarit virtuel n'aura pas atteint la taille de la sphère réelle (i.e., tant que $D_{out} > D_{in}$).

Si après ces 2 opérations le recouvrement est toujours présent, on peut en dernier recours réduire le rayon (D_{in}) de la sphère. Mais dans ce cas là, on ne respectera plus la distribution de tailles des sphères voulue par l'utilisateur.

Ce type d'algorithme développé depuis 1985 a remporté un certain succès auprès des chercheurs, car il a été le tout premier algorithme géométrique qui de surcroît a apporté une petite révolu-

tion en terme de coûts de calculs. Mais ce type d'algorithme reste encore trop proche des algorithmes dynamiques car il intègre dans sa démarche la détection des contacts et le calcul des différentes valeurs de recouvrements. L'exécution de telles fonctions à chaque itération pénalise le rendement de cet algorithme géométrique. Aujourd'hui, il existe des algorithmes géométriques comme l'algorithme de déposition balistique qui a la particularité de pouvoir reproduire un empilement granulaire avec un nombre très important de sphères pour un temps de calcul très faible.

2.6.2.2 L'algorithme de déposition balistique

La méthode de déposition balistique [Jullien et Meakin (2000)] est très proche de la simulation cinématique décrite dans la section 2.6.1.1. Cette méthode est pour A.C.F Cocks [Aparicio et Cocks (1994)] l'une des méthodes capables de modéliser l'empilement granulaire réel par un assemblage de sphères. Cet algorithme peut se décrire en quatre étapes:

1. Chaque sphère avec un rayon prédéfini est lancée dans un container ou sur un réseau de sphères déjà placées.
2. Aussitôt qu'une sphère touche un élément de l'empilement (un plan ou une autre sphère), un contact permanent est créé (voir FIG. 2.12-A).
3. Les sphères avec un contact chercheront une position stable (i.e. la sphère a comme support trois autres objets) en réalisant une rotation autour du premier point de contact (voir FIG. 2.12-B).
4. Une fois stabilisée (voir FIG. 2.12-C), la sphère est fixée et l'algorithme continue le placement des sphères une par une jusqu'à ce qu'une sphère atteigne le dessus du container(voir FIG. 2.13).

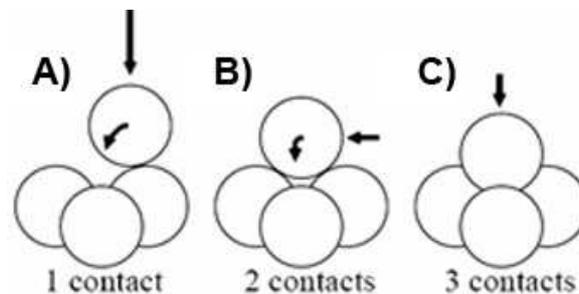


FIG. 2.12 – La séquence de placement d'une sphère dans une position stable. A) Une nouvelle sphère touche une sphère fixée. B) La nouvelle sphère roule autour de la sphère fixée jusqu'à atteindre un deuxième contact. C) La nouvelle sphère va ensuite atteindre une position stable en roulant sur ces deux sphères support pour atteindre un troisième contact.

Cette procédure géométrique en quatre étapes assure une certaine rapidité à la génération de l'empilement. Par l'ajout séquentiel des sphères, la distribution de tailles des particules est contrôlée et le critère de stabilité associé à la démarche induit un nombre de coordination (i.e., le nombre de contacts par particule) élevé.

En général, les propriétés des empilements numériques réalisés sont proches de celles observées expérimentalement : un résultat peu surprenant dans la mesure où la démarche de génération reflète le procédé de déposition des grains de poudre dans une matrice. Cependant l'algorithme de déposition balistique n'a encore subi aucune modification de sa démarche afin de générer des échantillons avec

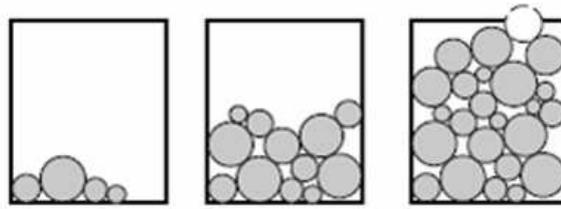


FIG. 2.13 – L’algorithme géométrique de construction d’un empilement de sphères par la déposition balistique.

une distribution de la compacité au sein de l’échantillon [Aparicio et Cocks (1994), Kadushnikov et Nurkanov (2001)].

Concernant l’approche géométrique, l’avantage de ne procéder à aucune simulation dynamique pour avoir un temps de génération relativement faible est un atout indéniable. C’est un avantage qui séduit un certain nombre de chercheurs, car ils savent que les futures simulations devront intégrer un nombre important de sphères.

Il a donc été fait le choix durant mes travaux de recherches de développer un nouvel algorithme géométrique de génération d’empilement de sphères avec pour objectif d’associer à un faible coût de calculs, un certain nombre de paramètres pilotables par l’utilisateur. Ces différents paramètres donnent un maximum de souplesse à l’utilisateur pour la création des empilements de sphères dont les propriétés seront le plus proche possible de celles du matériau granulaire étudié.

2.7 L’algorithme géométrique de génération d’empilement de sphères basé sur le maillage tétraédrique

L’algorithme géométrique développé est basé sur le maillage tétraédrique et s’inspire de l’algorithme géométrique proposé par Cui et O’Sullivan [Cui et Sullivan (2003)]. Ce dernier crée des assemblages poreux de sphères à partir de la triangulation du domaine d’étude, en plaçant une sphère inscrite dans chaque tétraèdre et une sphère en chaque nœud du maillage en contact avec la sphère la plus proche.

La distribution de la taille des sphères dépend ainsi de la distribution de la taille des tétraèdres qui peut être contrôlée lors de la génération du maillage. En s’appuyant sur l’efficacité des mailleurs tétraédriques tels que Ghs3D [George (1997)], Gmsh [Geuzaine et Remacle (2002)] ou encore Netgen [Schoberl (2000)], l’algorithme de Cui et O’Sullivan peut générer instantanément de très grands empilements poreux de sphères tout en respectant la géométrie complexe du domaine d’étude.

Concernant l’algorithme géométrique développé dans le cadre de cette thèse, sa démarche s’inspire de celle de Cui et O’Sullivan avec le changement du schéma de remplissage d’une maille tétraédrique qui va se propager dans tout le maillage pour générer un empilement. Ce nouvel algorithme géométrique de génération de sphères de tailles différentes vous sera présenté plus en détail dans cette deuxième partie du chapitre.

2.7.1 Description générale de l'algorithme développé

La génération d'un empilement compact de sphères de tailles différentes avec ce nouvel algorithme géométrique commence très simplement par la création d'un maillage tétraédrique (voir Fig. 2.14-Etape1). Toutefois, afin de comprendre l'ensemble de la démarche de génération, l'algorithme est détaillé étape par étape pour préciser les phases primaires utilisées pour l'élaboration d'un empilement de sphères à partir de deux tétraèdres (voir Fig. 2.14).

Etape 1 : La création du maillage est une étape sensible à la charge de l'utilisateur, celui-ci doit à l'aide d'un mailleur libre (Gmsh) ou payant (GHS3D) générer un maillage tétraédrique avec certaines contraintes :

- Une longueur d'arête (paramètre présent dans tous les logiciels de maillage) égale à environ huit fois le rayon moyen ($8.R_{moy} = 8 \cdot \frac{(R_{min} + R_{max})}{2}$).
- Ou
- Un nombre de tétraèdres égal au dixième du nombre total de sphères voulu

Les contraintes définies ci-dessus trouvent leur source dans un schéma de remplissage d'un tétraèdre qui sera présenté à partir de l'étape 2.

L'utilisateur doit aussi au cours de cette étape affecter certaines valeurs à des différents paramètres d'entrée tels que :

- La taille minimale et maximale de sphères (R_{min} et R_{max}).
- Ou
- Une valeur de ratio ($ratio = R_{max}/R_{min}$) qui permettra à l'algorithme de définir une valeur de R_{min} et R_{max} en fonction de la dimension des mailles.
- Et
- Le nombre total de sphères dans l'empilement.
- Ou
- Une valeur de compacité finale dans l'empilement. Il peut aussi indiquer les différentes zones de l'empilement où il veut que la valeur de la compacité soit plus élevée.
- Et
- Un ordre de grandeur du recouvrement autorisé entre deux sphères (ordre de grandeur qui par défaut est égale à 10^{-7} fois le plus petit rayon).

Etape 2 : Les premières sphères sont placées au centre de chaque segment du maillage (voir Fig. 2.14-Etape 2), leur rayon est égal à la longueur du segment divisé par 8 en respectant les valeurs R_{min} et R_{max} imposées.

Etape 3 : Les nouvelles sphères sont placées à chaque nœud du maillage (voir Fig. 2.14-Etape 3), leur rayon est égal au quart de la plus petite distance entre le nœud du maillage et le centre des sphères placées à l'étape 1. Les valeurs du rayon doivent respecter les valeurs R_{min} et R_{max} imposées, donc si une valeur n'est pas comprise entre R_{min} et R_{max} , l'algorithme imposera la valeur du rayon.

Etape 4 : Les nouvelles sphères sont placées sur chaque face du tétraèdre en contact avec quatre sphères voisines (voir Fig. 2.14-Etape 4) grâce à une routine géométrique spécifique développée. En

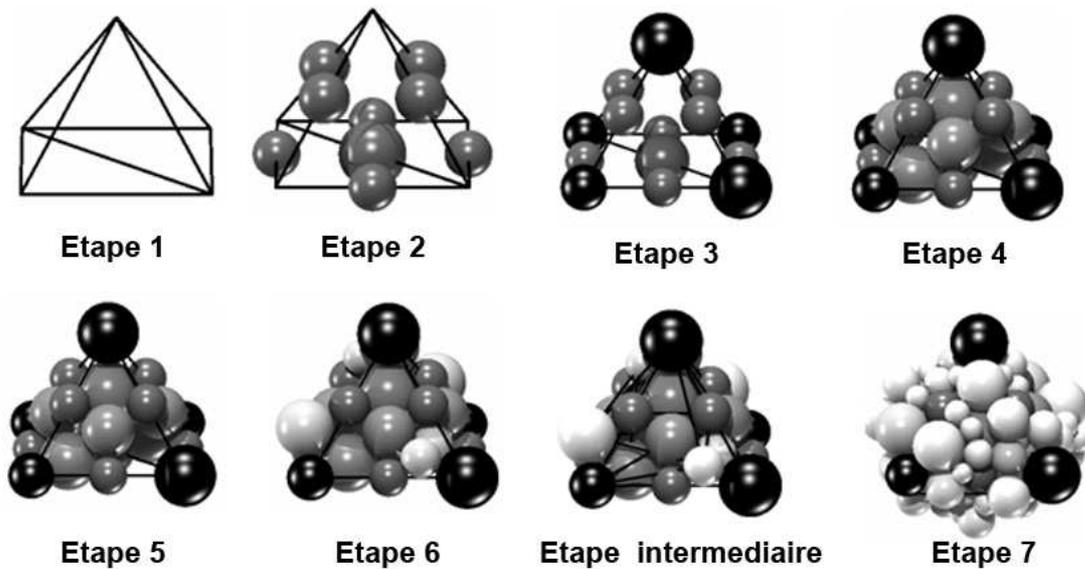


FIG. 2.14 – Les différentes étapes de remplissage de deux tétraèdres.

effet à partir de cette étape, toutes les nouvelles sphères placées dans l'empilement seront en contact avec quatre sphères via une routine basée sur l'inversion géométrique qui sera expliquée par la suite. A noter que cette routine géométrique de placement contrôle la position et le rayon des nouvelles sphères, donc l'algorithme n'aura que le choix de garder ou de rejeter la nouvelle sphère proposée. Le rejet s'opère si la sphère proposée a une valeur de rayon qui ne respecte pas les valeurs R_{min} et R_{max} imposées ou si le recouvrement avec une sphère voisine est plus important que celui autorisé par l'utilisateur.

Etape 5 : Une nouvelle sphère est placée au centre de chaque tétraèdre (voir FIG. 2.14-Etape 5) via la routine géométrique. Le placement d'une sphère proche du centre de chaque tétraèdre est nécessaire pour combler une zone de vide observée qui peut empêcher l'empilement d'atteindre une forte valeur de compacité.

Etape 6 : Une nouvelle sphère est placée en contact avec la sphère au nœud du maillage (voir FIG. 2.14-Etape 6). Cette étape permet là encore de combler un espace vide présent près des sphères placées à l'étape 2 (voir FIG. 2.14-Etape 5).

Jusque là, l'agencement des sphères à chaque étape constitue notre schéma de remplissage d'une maille. Le remplissage se fait au même rythme pour chaque tétraèdre contenu dans le maillage comme pour le remplissage des deux tétraèdres en figure 2.14. Donc pour chaque étape du remplissage, l'algorithme passe en revue tous les tétraèdres; ceci permet parallèlement de répertorier : les sphères appartenant à un tétraèdre; les différents tétraèdres voisins à un tétraèdre donné, les faces des tétraèdres qui composent ou non la frontière du domaine maillé.

Mais dans le cas où un empilement doit atteindre une densité relative supérieure à 0,55 quelle que soit la valeur du ratio, il est nécessaire de combler des espaces vides encore présents dans l'empilement à l'étape 6. En effet, des porosités peuvent apparaître à cause des différences géométriques (i.e., une différence de taille ou de forme) qu'il peut y avoir entre tétraèdres voisins dans les maillages désordonnés. Pour réduire ces porosités, l'algorithme les détecte dans l'empilement (voir FIG. 2.14-Etape intermédiaire), afin de pouvoir y placer une nouvelle sphère en contact avec quatre sphères

voisines (voir Etape 7).

Etape intermédiaire : Cette étape est normalement incluse dans l'étape 7 et permet de détecter les porosités mais, pour une question de clarté, elle est présentée de manière disjointe.

A partir des centres de sphères placées dans les étapes précédentes, un maillage tétraédrique via l'algorithme de Delaunay [Delaunay (1934)] est effectué. L'idée est de calculer le volume de vide V_V qui est présent dans chacun de ces nouveaux tétraèdres. Pour cela, les travaux de développement de l'algorithme ont conduit à intégrer dans la programmation la notion de l'aire du triangle sphérique A_{TSi} (voir Fig. 2.15-B) pour déterminer le volume d'occupation V_{OSi} d'une sphère i de volume V_{Si} et de rayon R_{Si} placée au sommet i du nouveau tétraèdre (voir équation 2.14, 2.15, 2.16, 2.17). Ainsi, il devient aisé de connaître la portion des sphères dans le volume du tétraèdre V_T et d'en déduire le volume de vide.

Pour calculer le volume de vide, on se sert de l'équation suivante:

$$V_V = V_T - \sum_{i=1}^4 V_{OSi} \quad (2.14)$$

En sachant que:

$$V_{OSi} = V_{Si} \cdot \frac{A_{TSi}}{A_{Si}} \quad (2.15)$$

Le calcul de la surface du triangle sphérique d'une sphère i est calculé:

$$A_{TSi} = (\beta + \gamma + \alpha - \pi) \cdot R_{Si} \quad (2.16)$$

Avec :

$$\alpha = \arccos\left(\frac{\cos c + \cos a \cdot \sin b}{\sin a \cdot \sin b}\right), \beta = \arccos\left(\frac{\cos a + \cos b \cdot \sin c}{\sin b \cdot \sin c}\right), \gamma = \arccos\left(\frac{\cos b + \cos a \cdot \sin c}{\sin a \cdot \sin c}\right) \quad (2.17)$$

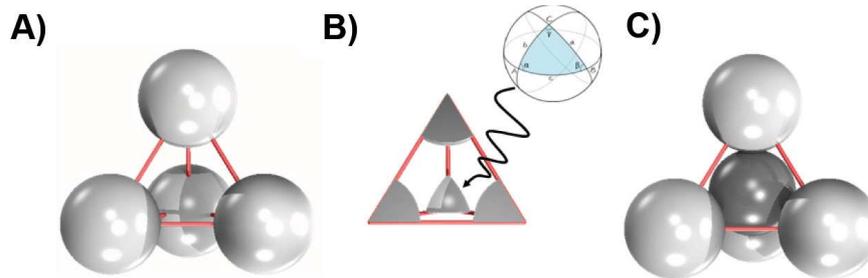


FIG. 2.15 – Détection et diminution de l'espace vide contenu dans un tétraèdre formé par quatre sphères. A) Création d'une maille tétraédrique par l'algorithme de Delaunay à partir des quatre sphères présentes dans l'empilement. B) Représentation d'un triangle sphérique à partir d'une sphère placée au sommet du tétraèdre. C) Positionnement d'une sphère sur quatre sphères voisines pour combler l'espace vide.

Etape 7 : Cette étape est la dernière étape de l'algorithme, elle est normalement couplée avec l'étape intermédiaire pour former l'étape de densification de l'algorithme. Cette étape numéro 7 a pour objectif de parcourir toutes les porosités qui ont une valeur supérieure ou égale au volume de la

plus petite sphère, afin d'essayer de placer une nouvelle sphère via la routine géométrique développée pour le placement d'une nouvelle sphère (voir FIG. 2.14-Etape 7). La particularité de cette étape de densification est d'être répétée tant que n'est pas atteint le nombre total voulu de sphères ou la compacité voulue.

Une fois ces deux dernières étapes intégrées, l'algorithme possède un avantage indéniable par rapport aux autres algorithmes existants : celui de pouvoir détecter les porosités, de les classer par ordre de grandeur et de les combler de la plus importante à la plus petite. Cette fonctionnalité est naturellement mise à la disposition de l'utilisateur, en lui permettant de définir un sous-espace de l'empilement qu'il veut densifier jusqu'à une valeur définie et avec, s'il le souhaite, une valeur de R_{min} et R_{max} différentes (voir Sec. F.1). L'algorithme proposé permet donc de générer des empilements avec une distribution de compacité dans des zones définies.

Remarques : Notons que l'algorithme intègre quelques signaux d'alertes qui informent l'utilisateur des difficultés rencontrées pour réaliser un empilement. Par exemple, dans le cas :

- Où le maillage tétraédrique donné est trop grand ou trop petit par rapport aux tailles de sphères voulues.
- Où la valeur du ratio de taille ne permet pas d'atteindre la compacité ou le nombre voulu de sphères ; alors on reçoit un message d'information.

Un message d'information très clair va conseiller l'utilisateur sur les paramètres de génération du maillage tétraédrique ou sur les valeurs des paramètres d'entrée à changer dans le but d'obtenir l'empilement souhaité.

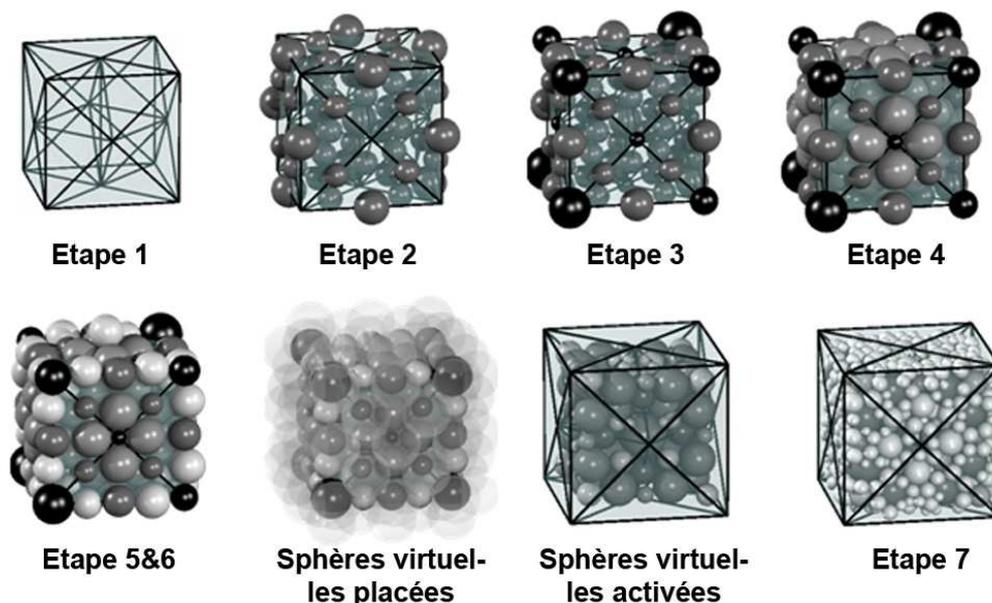


FIG. 2.16 – Les différentes séquences de la génération d'un empilement cubique à partir du nouvel algorithme géométrique développé.

Les sept étapes principales de la démarche de génération d'empilement de l'algorithme géométrique proposé dans cette thèse ont été présentées en éludant certains détails (voir FIG. 2.16). Parmi ces détails figurent la routine de placement d'une nouvelle sphère en contact avec quatre autres sphères, ainsi que la fonction qui permet aux sphères de l'empilement de respecter les frontières spatiales

du domaine d'étude. De sorte à compléter la description détaillée de l'algorithme proposé ces deux routines nommées respectivement routine géométrique quatre contacts et routine de placement des sphères virtuelles sont décrites ci-dessous.

2.7.2 La routine géométrique quatre contacts

Ce nouvel algorithme géométrique tire tout son potentiel à partir de cette routine géométrique qui permet de positionner une sphère tangente à quatre autres sphères non coplanaires. Ce type de placement quasi-instantané assure à l'assemblage de sphères un nombre de coordination très élevé. Cette procédure, si importante pour ma méthode, s'appuie sur une seule fonction géométrique qui est connue au sein de la littérature et par les chercheurs qui font des assemblages apolloniens de sphères sous le nom de fonction géométrique d'inversion [Borkovec et de Paris (1994)].

2.7.2.1 La fonction géométrique d'inversion

La fonction inversion est une simple transformation homothétique appliquée sur les différents points qui composent des éléments géométriques comme :

- le point pour le 1D.
- le cercle et la droite pour le 2D.
- le plan et la sphère pour le 3D.

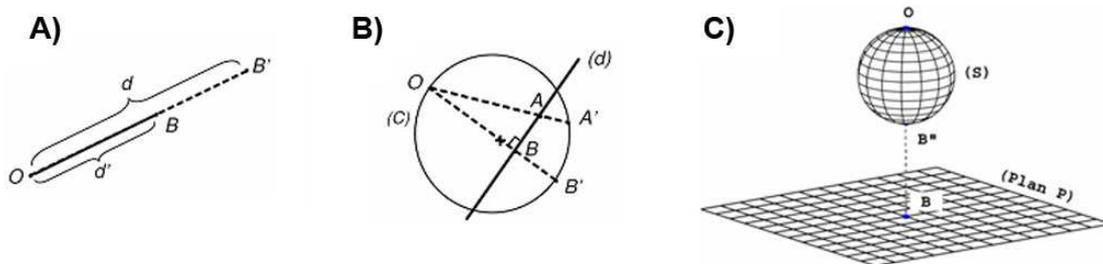


Fig. 2.17 – La fonction géométrique d'inversion de centre O et de rapport k appliquée : A) sur un point B en 1D. B) sur une droite (d) en 2D. C) sur un plan (P) en 3D.

Par exemple en 1D, l'inversion de centre O et de rapport k (avec k appartenant à \mathbb{N}^*) appliqué sur le point B crée un point image B' qui est le point inverse du point B . On peut noter que B and B' appartiennent à la même droite passant par le point O (voir Fig. 2.17-A). De plus, le produit des longueurs $\|OB\| \cdot \|OB'\|$ est égale à la valeur du rapport d'inversion au carré (k^2). Donc $\|OB\| \cdot \|OB'\| = d \cdot d' = k^2$

Pour résumer, on peut noter que $B' = I(B)$ où B' est le point inverse du point B avec O, B et B' qui sont alignés :

$$\overrightarrow{OB'} = \frac{k^2}{\|OB\|^2} \cdot \overrightarrow{OB} \quad (2.18)$$

Remarque : Si on applique la fonction inversion de rapport k et de centre O sur le point B' , on obtient comme point inverse le point B car la fonction inversion est une fonction involutive (i.e., elle est sa propre réciproque).

En 2D, quand la fonction inversion est appliquée sur une droite (d) ou plus précisément sur tous les points appartenant à cette droite (d), tous les points inverses obtenus se placent sur un cercle (C) passant par le centre d'inversion O , si et seulement si le centre d'inversion O est un point distinct de la droite (d) (voir FIG. 2.17-B).

Remarque : La fonction inversion étant une fonction involutive telle que : $I \circ I = id$, donc le cercle (C) peut donc être transformé en une ligne (d) par une inversion de centre O et de rapport k , si et seulement si le centre d'inversion O appartient au cercle (C). Sinon, un autre cercle différent sera un cercle image.

En 3D, l'inversion fonctionne de la même façon que pour l'exemple en 2D. En effet, une sphère peut être créée à partir d'un plan (P), en réalisant une inversion sur tous les points appartenant à un plan P. Les différents points inverses obtenus décriront une sphère passant par le point O (voir FIG. 2.17-C), si et seulement si le centre d'inversion appartient au plan.

Remarque : Pour obtenir un plan à partir de l'inversion d'une sphère, il faut que le centre d'inversion soit placé sur la sphère sinon une sphère image à la première sphère sera créée.

Dans le cas de notre routine géométrique quatre contacts, l'utilisation de la fonction géométrique inversion en 3D en est la base. Le fait de pouvoir créer une sphère à partir d'un plan est une transformation géométrique très intéressante tout comme cette notion d'involution qui une fois mise dans un certain contexte présente des avantages considérables, lesquels seront abordés en présentant la procédure géométrique de placement d'une sphère basée sur l'inversion géométrique.

2.7.2.2 La procédure géométrique de placement d'une sphère

Dans la présentation de cette routine géométrique que va intégrer notre algorithme pour le placement d'une grande majorité des sphères, il est important d'avoir à l'esprit les définitions suivantes :

- L'inversion géométrique d'un plan crée une sphère (objet inverse) passant par le centre d'inversion, si celui-ci n'appartient pas à ce plan.
- L'inversion d'une sphère donne un plan (objet inverse) si le centre d'inversion appartient à la sphère. Dans le cas contraire on aura une sphère image.
- L'inversion de deux objets tangents donne deux objets inverses tangents. Par exemple, l'inversion d'une sphère tangente à un plan crée deux sphères tangentes si le centre d'inversion n'appartient à aucun des deux objets.

Sur la base de ces trois définitions, une procédure qui consiste à créer une cinquième sphère tangente à quatre autres sphères non coplanaires a été construite :

Etape A : Initialement, quatre sphères sont sélectionnées. La plus petite des quatre sphères est détectée et elle est notée P(O,R) avec son centre O. Les autres sphères sont notées P1(O1, R1), P2(O2, R2) et P3(O3, R3) (voir FIG. 2.18-A).

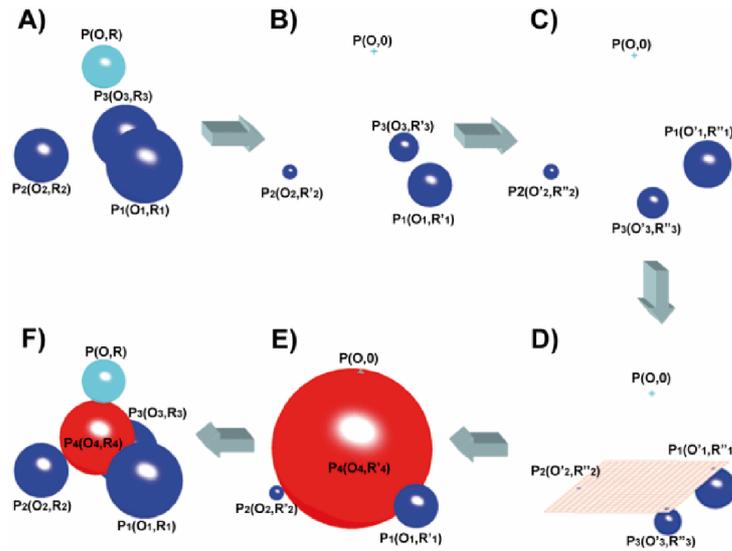


FIG. 2.18 – Description de la procédure géométrique de placement d'une sphère tangente à quatre autres sphères.

Etape B : Les rayons des quatre sphères sont réduits de la valeur R . Ainsi les rayons des sphères P , P_1 , P_2 , P_3 prennent respectivement comme valeur 0 , $R'1$, $R'2$, $R'3$ (voir FIG. 2.18-B). Ensuite le centre O de la sphère P est pris comme centre d'inversion.

Etape C : Une inversion de centre O et de rapport k est appliquée sur les sphères P_1 , P_2 , P_3 . Le centre d'inversion n'appartenant pas aux différentes sphères, des sphères inverses $P'1(O'1, R''1)$, $P'2(O'2, R''2)$ et $P'3(O'3, R''3)$ sont alors créées (voir FIG. 2.18-C). Notons que la valeur du rapport d'inversion k est un entier positif qui reste constant tout au long de cette procédure.

Etape D : Un plan posé sur les sphères $P'1$, $P'2$ et $P'3$ est créé. Si ce plan existe alors il existe une cinquième sphère tangente aux quatre sphères initiales (P_1 , P_2 , P_3) (voir FIG. 2.18-D).

Etape E : Une fois le plan créé, l'inversion de centre O et de rapport k est appliquée sur les sphères inverses ($P'1$, $P'2$, $P'3$) et sur le plan créé. Grâce à la propriété involutive, la procédure revient à l'état de l'étape B avec les sphères $P_1(O_1, R'1)$, $P_2(O_2, R'2)$ et $P_3(O_3, R'3)$ avec en supplément une nouvelle sphère $P_4(O_4, R'4)$ (voir FIG. 2.18-E).

Etape F : Les sphères P , P_1 , P_2 et P_3 ont leur rayon augmenté de la valeur R pour obtenir les sphères initiales $P_1(O_1, R_1)$, $P_2(O_2, R_2)$ et $P_3(O_3, R_3)$ présentes à l'étape A. Tandis que la sphère P_4 a son rayon réduit de la valeur R pour obtenir une sphère P_4 tangente aux quatre autres sphères (voir FIG. 2.18-F).

Le fonctionnement de cette procédure est basé sur la propriété involutive de la fonction géométrique d'inversion et sur le fait que deux objets tangents après inversion engendrent deux objets inverses tangents. Son efficacité est liée de fait à l'existence d'un plan tangent aux sphères $P'1$, $P'2$ et $P'3$ (voir FIG. 2.18-D) qui ne coupe pas le plan défini par les trois centres des sphères. Dès lors que ce plan est créé, l'existence d'une cinquième sphère en contact avec quatre autres sphères est alors possible.

2.7.3 La routine de placement des sphères virtuelles

A ce stade du chapitre, la présentation du fonctionnement de l'algorithme touche à sa fin. Les principales étapes concernant la génération d'un échantillon de sphères en contact ont été passées en revue. Mais l'exécution de l'algorithme sur un maillage tétraédrique aboutira à la génération d'un ensemble de sphères avec le centre des particules positionnées sur la frontière (voir Fig. 2.19).

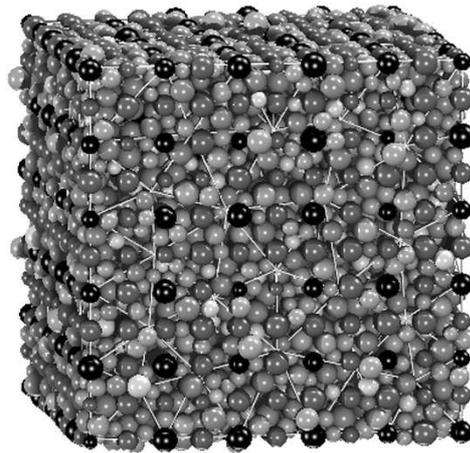


Fig. 2.19 – Un assemblage de 10.000 sphères crée par le nouvel algorithme sans la prise en charge des limites physique du container.

Ce nouvel algorithme géométrique n'étant pas destiné pour le moment aux simulations périodiques, il se doit de respecter les frontières du container. La périodicité du calcul éléments discrets n'impose aucune limite physique à l'empilement, un ensemble de conditions aux limites pour simuler un système reproduit à l'infini étant utilisé. En termes topologiques, l'espace peut être pensé comme pouvant être décrit par un tore.

Dans le cas des empilements générés avec l'algorithme développé, les frontières du domaine sont représentées par de simples facettes triangulaires issues du maillage tétraédrique initial. La problématique qui en découle automatiquement est de savoir comment intégrer cette notion de limite spatiale ou physique du container au sein de l'algorithme.

La première piste exploitée pour élaborer une procédure apte à la détection des limites spatiales a consisté à mettre en œuvre la fonction géométrique d'inversion pour transformer les facettes triangulaires qui définissent la frontière du domaine en des sphères de "contours". L'inconvénient majeur de cette première piste est que la transformation (une homothétie) associée doit être appliquée sur tous les nœuds du maillage et sur toutes les particules déjà placées, si il y en a pour que tous les éléments (contours, nœuds, sphères) gardent la même proportion les uns par rapport aux autres. Dès lors il devient difficile, voire impossible de contrôler le maillage d'entrée ainsi que la taille des sphères placées au cours de la génération, car on se trouve dans un tout autre repère.

La seconde piste, finalement retenue, pour ce nouvel algorithme est le positionnement de sphères "virtuelles" tangentes à la surface frontière et placées en dehors du domaine d'étude. Ces sphères sont qualifiées de virtuelles car elles ne servent qu'à représenter les limites spatiales de l'empilement, elles ne font pas partie de l'empilement final. L'algorithme va ainsi placer les sphères dites virtuelles au cours de l'étape 4 (voir 2.7.1-Etape 4) qui consiste à placer une nouvelle sphère tangente à quatre

autres sphères sur chaque face triangulaire. Ainsi, dès que l'algorithme se positionnera sur une face triangulaire appartenant à la frontière, trois sphères virtuelles tangentes à cette face seront placées, en fonction de la normale sortante, de la valeur du rayon des sphères virtuelles et des coordonnées des trois sommets du triangle (voir Fig. 2.20). De plus, il faut savoir que les rayons de ces sphères auront le même ordre de grandeur que les segments du maillage; ce rayon est choisi intentionnellement grand pour qu'une plus grande surface de la sphère virtuelle soit en contact avec la paroi extérieure.

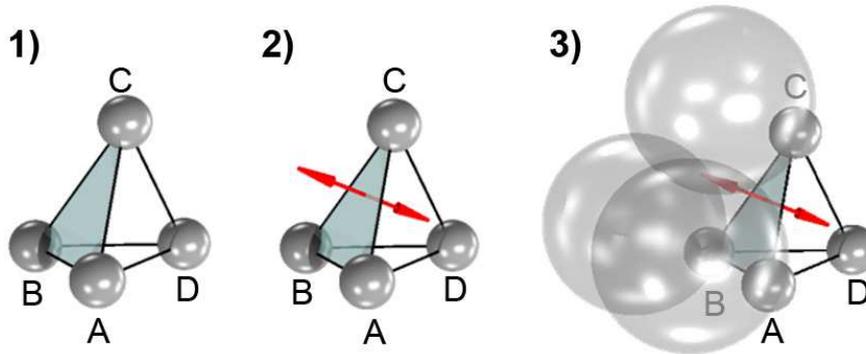


FIG. 2.20 – La démarche de placement de trois sphères virtuelles par rapport à une face extérieure d'un tétraèdre : 1) L'algorithme détecte un tétraèdre avec une face (A, B, C) qui représente la frontière 2) Les deux normales à cette face sont calculées, ne sera retenu que la normale sortante 3) En fonction de leur rayon et en s'aidant de la position des sommets A, B et C les sphères virtuelles sont placées tangentes à la face.

Une fois que ces sphères virtuelles seront créées, elles seront activées par l'algorithme juste avant l'étape 7 qui est l'étape de densification (voir Etape 7 à la section 2.7.2.2) ce qui engendrera la suppression de toutes les sphères fixées qui les interpénètrent (voir Fig. 2.16). L'autre intérêt de ces sphères virtuelles est qu'elles servent également de support au placement de nouvelles sphères. Ainsi, pendant l'étape de densification (voir Etape 7 à la section 2.7.2.2), il s'agira dans un même temps d'augmenter la compacité et de replacer les sphères supprimées lors de l'activation des sphères virtuelles. Ceci aura pour effet de placer un maximum de sphères en contact avec les parois du container (voir Fig. 2.16).

2.7.4 Synthèse de la procédure de génération d'un empilement

L'algorithme présenté tout au long de ce chapitre a fait l'objet de deux publications internationales [Jerier *et al.* (2009a), Jerier *et al.* (2009b)], des articles qui sont présents à la fin de cette thèse et qui présentent en supplément différents axes de recherche que l'on peut investir grâce à ce nouvel outil. Concernant la procédure de génération de l'algorithme, elle est synthétisée dans un schéma prenant la forme de blocs fonctionnels (voir Fig. 2.21).

Ce tableau apporte aussi son lot d'informations supplémentaires qu'il est plus facile de comprendre à travers cette représentation, telle que la possibilité pour l'algorithme de ne pas effectuer certaines étapes (Etape 4 et Etape 5 à la section 2.7.2.2). En effet, si l'utilisateur définit une valeur de compacité faible ($C \leq 0,45$), l'algorithme fera le choix de passer les étapes 4 et 5 de placement de sphères pour arriver directement à l'étape de densification pour ensuite densifier le milieu jusqu'à la compacité souhaitée.

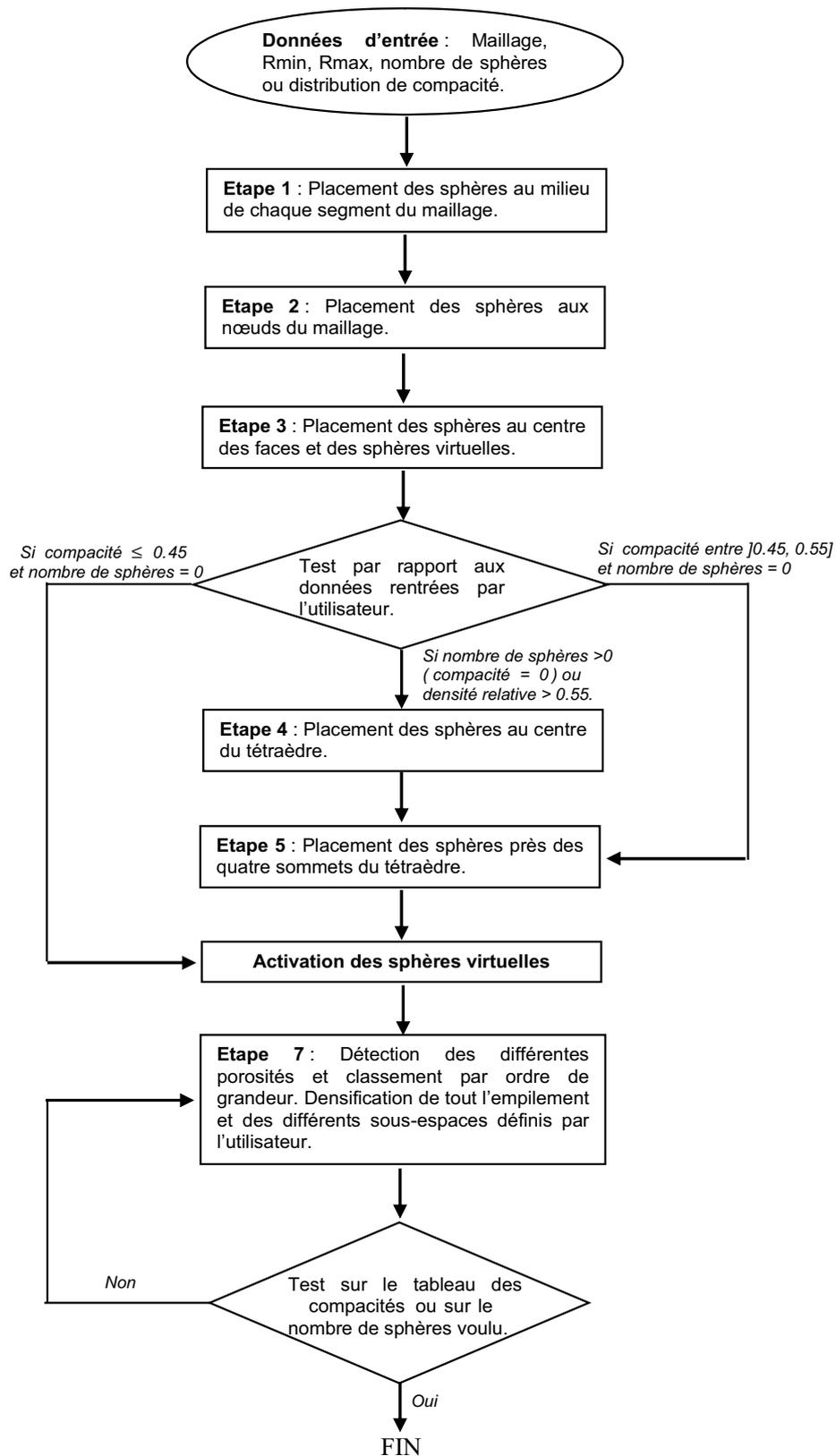


FIG. 2.21 – La synthèse du processus de génération de l'algorithme géométrique.

L'algorithme développé est relativement souple et a l'avantage d'offrir un panel de paramètres et d'options assez importants pour obtenir l'empilement granulaire avec la texture que l'on souhaite. A travers cette étude sur les poudres métalliques et de l'intérêt général que l'on porte aux autres matériaux granulaires comme le béton et les roches, on prend conscience de la très grande diversité des empilements granulaires qu'il peut y avoir d'une étude à l'autre. C'est pour cela que le désir de créer un outil qui peut reproduire toutes les caractéristiques granulaires est l'objectif fixé à ce nouvel algorithme.

Afin de prendre la mesure du potentiel de ce nouvel algorithme de génération, le prochain chapitre sera dédié à la caractérisation des empilements. Ces différentes propriétés vont être générées et étudiées à partir de diverses procédures de post-traitements.

2.8 Les différents outils de caractérisation d'un empilement numériques de sphères

Les empilements aléatoires de sphères polydisperses sont utilisés comme modèles numériques aux milieux granulaires réels dans beaucoup de domaines scientifiques. Actuellement, les chercheurs qui utilisent ces modèles savent à quel point il est important de caractériser la texture granulaire. Pour cela ils utilisent des outils numériques appartenant au domaine de la chimie pour l'analyse de possible structure cristalline, car les chimistes considèrent les atomes comme des sphères. Dans la suite de ce chapitre, nous présentons les divers post-traitements qui seront appliqués dans le chapitre 3 aux empilements de sphères générés par l'algorithme géométrique pour les caractériser.

2.8.1 Compacité ou densité relative

La compacité (C), qui est appelée la densité relative dans la métallurgie des poudres, est calculée à partir du volume des particules sphériques contenues dans une boîte divisée par le volume total du contenant. Dans cette thèse, nous utiliserons la notion de sphère de mesure pour calculer la compacité. La sphère de mesure d'un volume V_S ($V_S = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R_S^3$) peut être placée n'importe où dans l'empilement avec n'importe quelle valeur de rayon R_S . Une fois placée, toutes les particules contenues (i.e., les particules inscrites) sont dénombrées, ainsi que celles qui intersectent sa frontière. Le calcul du volume des sphères inscrites (V_i) et des calottes sphériques (V_c) des sphères placées à la frontière de la sphère de mesure est effectué. A partir de là, le calcul de la compacité est réalisé avec l'équation suivante :

$$C = \frac{(V_i + V_c)}{V_S} \quad (2.19)$$

On précise que dans le programme qui gère la sphère de mesure, on a intégré le calcul du nombre de contact moyen appelé également nombre de coordination. Donc, les sphères considérées pour le calcul du nombre de coordination sont uniquement les sphères inscrites dans la sphère de mesure. Bien entendu, on comptabilise le contact établi entre :

- une sphère inscrite et une sphère qui intersecte la sphère de mesure.
- une sphère inscrite et une sphère placée en dehors de la sphère de mesure.

2.8.2 Nombre de coordination

Le nombre de coordination (Z) est une moyenne du nombre de contacts sur les sphères appartenant à un milieu granulaire. Il est un paramètre incontournable dans les empilements de sphères qui spécifie l'arrangement des particules dans un assemblage désordonné. Sa connaissance aide à la compréhension de nombreuses caractéristiques physiques de l'empilement telles que la consolidation, la conductivité électrique ou thermique et la résistance en traction, ...

Le nombre de coordination joue aussi un rôle déterminant dans l'analyse du frottement inter-granulaire, de la déformation élastique et la répartition des forces de contact [Voivret *et al.* (2009)].

Pour un empilement ordonné, le nombre de coordination est le même pour toutes les sphères et il prend une valeur spécifique qui dépend du type d'arrangement:

- 6 contacts par sphères pour un empilement cubique.
- 8 contacts par sphères pour un empilement rhombique.
- 12 contacts par sphères pour un empilement rhomboédrique 1.

Dans les empilements ordonnés, normalement le nombre de coordination (Z) varie de 4 à 12, tandis que pour ceux qui sont désordonnés le nombre de coordination varie de 2 à 9 uniquement. Le nombre de coordination pour chaque sphère dans un empilement est calculé en cherchant les différents contacts entre les sphères. Dans certains systèmes granulaires, on considère que le contact granulaire est établi dès lors que la distance (d_p) entre deux sphères de rayons r_i et r_j est comprise dans l'intervalle $(1 \pm 10^{-8}).(r_i + r_j)$. Dans cette thèse le contact est considéré valide si et seulement si $d_p \leq (r_i + r_j)$. Ainsi les sphères qui se touchent ou qui s'interpénètrent sont considérées en contact et sont comptabilisées dans le calcul du nombre de coordination (voir Eq. 2.20).

$$Z = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{sphere}}} N_c(i)}{N_{\text{sphere}}} \quad (2.20)$$

Où N_{sphere} est le nombre total de sphères et $N_c(i)$ représente le nombre de contact pour la sphère i .

A partir du nombre de coordination et plus précisément de la variable $N_c(i)$, on peut tracer un histogramme qui représente la distribution du nombre de contacts. Ce diagramme est intéressant car il permet d'avoir une vision plus détaillée du nombre de contact par sphère. Avec un tel diagramme, il est effectivement aisé de voir l'écart-type autour de la valeur moyenne et de savoir le nombre de sphères qui ne compte aucun contact ainsi que le nombre de contacts maximum sur une sphère.

2.8.3 Tenseur de fabrique

Les caractéristiques géométriques du réseau des contacts sont quantifiables grâce à la définition du tenseur de fabrique. Il s'agit d'un tenseur d'ordre 2 en 3D qui réalise une statistique sur les directions de contact (voir FIG. 2.22). Il permet donc de rendre compte de la géométrie moyenne de l'empilement [Luding (2004)]. Si N_c est le nombre de contacts total dans un volume V , le tenseur de fabrique ϕ est donné par:

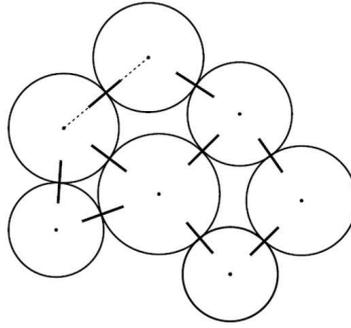


FIG. 2.22 – Empilement de sphères en contact avec les directions de contact données par les directions des segments joignant les centres des grains en contact.

$$\phi_{ij} = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha=1}^{N_c} (n_i^\alpha \cdot n_j^\alpha) \quad (2.21)$$

Où n^α est le vecteur (unitaire) de la direction du contact α , et i et j désignent les directions de l'espace. Les valeurs propres (β_1 , β_2 et β_3) du tenseur représentent l'anisotropie de la structure. Si les valeurs β_1 , β_2 et β_3 sont égales à $\frac{1}{3}$, l'assemblage est isotrope.

2.8.4 Représentation graphique de l'orientation des contacts

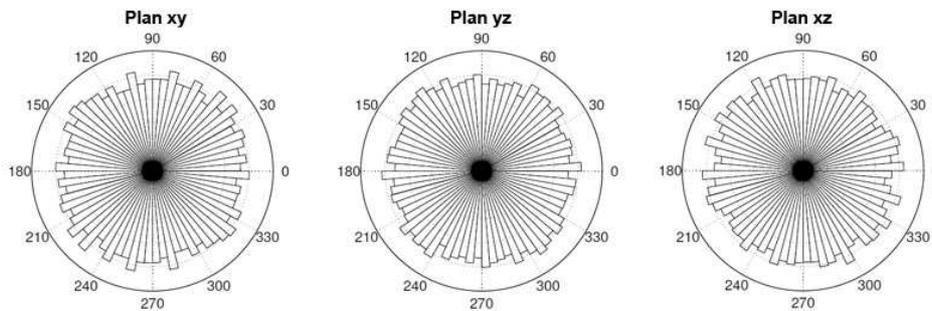


FIG. 2.23 – Distribution des orientations de contact dans les plans (xy) , (yz) et (xz) .

Dans le but d'obtenir toujours plus d'informations sur l'orientation des contacts dans chaque assemblage, trois histogrammes représentant la projection sur les plans XY, YZ et XZ de la distribution angulaire des vecteurs de contacts sont tracés (voir FIG. 2.23). Ces histogrammes (ou rosas de contact) donnent des informations additionnelles, pour déterminer si il existe des directions privilégiées à l'intérieur de l'empilement. A la figure 2.23, les rosas de contact représentent la distribution des contacts d'une compression isostrope d'un empilement de sphère réalisée dans la thèse de Sibille [Sibille (2006)]. L'auteur a conclu de façon qualitative à une bonne isotropie de la direction des contacts.

Dans la caractérisation des milieux granulaires, on se restreint à regarder la projection de la

direction des contacts en 2D avec les rosas de contact, car il semble que peu d'outils de post-traitement n'ont été développés à cet effet. Le fait de réaliser la projection des vecteurs de contact sur les trois plans principaux donne une vision limitée de l'orientation des contacts.

Pour palier à cette restriction, un nouvel outil qui permet également de visualiser la distribution de l'orientation des contacts en 2D est créé sur la base de la sphère cubique [Capdeville *et al.* (2003)]. Le principe sur lequel repose ce nouvel outil est simple, il consiste à mailler la surface d'une sphère d'un rayon unitaire avec des quadrangles (sphère cubique). La sphère cubique est créée à partir d'une homothétie des points du maillage placés sur le cube (voir FIG. 2.24A-B). Ensuite, tous les vecteurs unitaires de contact sont placés au centre de cette sphère cubique (voir FIG. 2.24-C), afin de dénombrer le nombre ($N_v(i)$) de vecteurs qui passe dans chaque maille i de surface $S(i)$. Pour finir, on divise le nombre de vecteur $N_v(i)$ par la surface $S(i)$ de la maille correspondante pour s'affranchir de la taille de la maille (voir FIG. 2.24-D). On obtient ainsi pour chaque maille une valeur qui est représentée sur la sphère par un code de couleur, avec le blanc pour la valeur nulle et le noir pour la valeur maximale. Cette démarche n'a d'intérêt que si on peut visualiser le quadrillage de la sphère cubique en 2D. Pour cela on fait la transformation inverse qui permet de revenir au cube de départ (voir FIG. 2.24E-F) et pour finir on déplie le cube en un plan (voir FIG. 2.24-F).

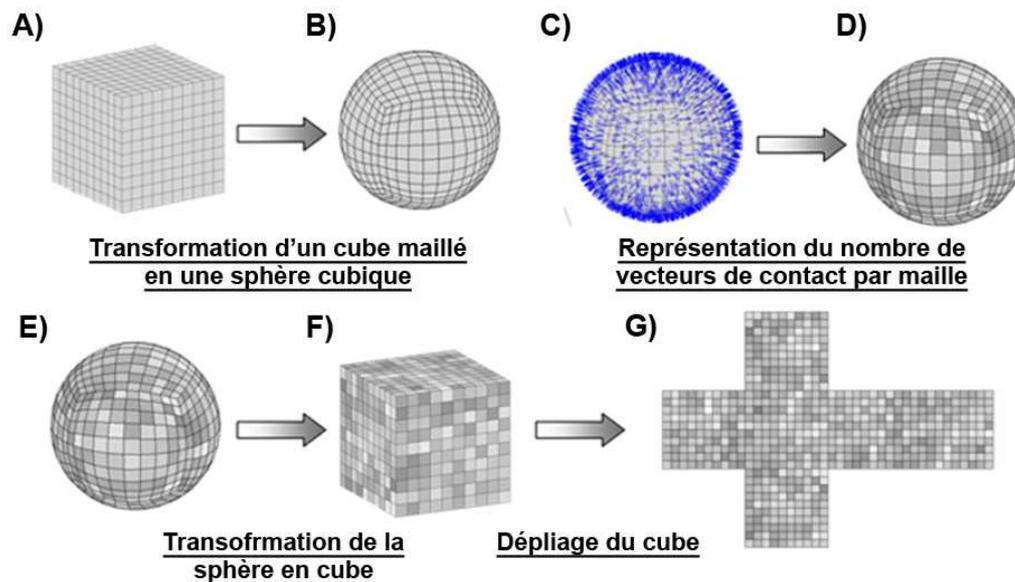


FIG. 2.24 – Représentation en 2D de la distribution des contacts d'un empilement avec le concept de sphère cubique. A) Cube avec un maillage surfacique composé de quadrangle. B) Transformation homothétique du cube en une sphère (sphère cubique). C) Représentation des vecteurs de contact unitaire dans la sphère cubique. D-E) Représentation par un code de couleur du nombre de vecteur de contact qui passe dans chaque maille. F) Transformation homothétique inverse pour passer de la sphère cubique au cube maillé. G) Dépliage du cube en un plan.

A la figure 2.24-F, on peut visualiser les directions de contacts privilégiées dans l'empilement. Tel que le plan est représenté, la distribution du niveau des couleurs sur la figure montre que l'empilement n'a pas de directions privilégiées fortement marquées, mais celui-ci n'est pas totalement isotrope car la couleur du plan n'est pas monochrome.

Pour se faire une idée de l'allure du résultat, dans le cas d'un milieu anisotrope, on prend le cas extrême d'un empilement en étoile représenté à la figure 2.25-B. Pour cet exemple, on voit de suite qu'il y a trois directions de contact privilégiées, malgré le fait que le tenseur de fabrique indique que cet

empilement en étoile soit isotrope ($\beta_1 = 0,3263$, $\beta_2 = 0,3368$ et $\beta_3 = 0,3368$). Si on se reporte au résultat du post-traitement développé dans la thèse (voir FIG. 2.25-A), le plan contient 12 carrés de couleur noire qui représentent clairement les directions de contact privilégiées dans l'empilement.

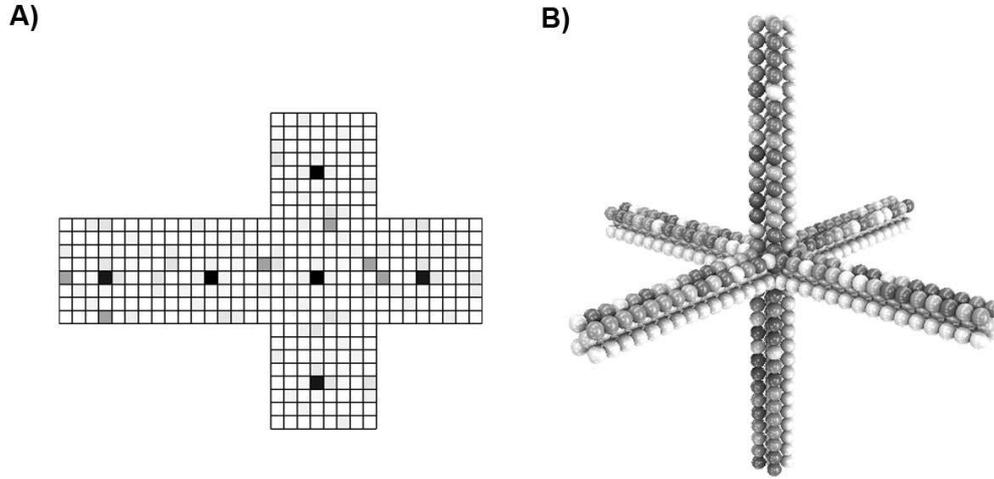


FIG. 2.25 – A) Représentation en 2D de la distribution des contacts d'un empilement anisotropes. B) Empilement de sphères en étoile avec des valeurs propres du tenseur de fabrique égales à: $\beta_1 = 0,3263$, $\beta_2 = 0,3368$ et $\beta_3 = 0,3368$

2.8.5 Fonction de distribution radiale

Cette fonction permet de mettre en évidence la disparition progressive d'un arrangement spatial des particules avec l'étalement [Agnolin et Roux (2007)]. La fonction de distribution radiale $g(r)$ des positions radiales des centres des particules est une mesure qui détermine la probabilité de trouver une particule à une distance r d'une particule donnée (voir FIG. 2.26). Pour calculer cette fonction en 3D, on sélectionne une sphère au centre de l'empilement, puis on se fixe une épaisseur dr qui est l'épaisseur d'une coque sphérique de rayon interne r (voir FIG. 2.26). On augmente la valeur de r jusqu'à ce que la coque touche une des limites de l'empilement. Pour chaque valeur de r , on calcule le nombre de centres de particule ($N_c(r)$) dans la coque, pour ensuite déterminer la densité de particules $\chi(r)$ dans le volume de la coque $V_c(r)$.

A partir de là pour déterminer $g(r)$, il faut calculer la densité de l'empilement χ qui sert à normer la valeur de $\chi(r)$ (voir Eq. 2.22).

$$g(r) = \frac{\chi(r)}{\chi} \quad (2.22)$$

L'analyse de la courbe donnée par la fonction de distribution radiale est simple à décrypter, on retrouve généralement un premier pic au voisinage du rayon moyen. Il faut savoir que la finesse d'un pic traduit la netteté des corrélations (comme dans un cristal parfait), tandis qu'une largeur importante traduit un certain bruit dans les positions autour d'une position moyenne fréquente.

Mais l'élément le plus important à observer sur cette courbe est la signature d'un ordre à longue distance à travers la présence de pics de fortes amplitudes régulièrement espacés, avec une période correspondant à un diamètre moyen. Dans la mesure où il y a une forte atténuation de l'amplitude dès le deuxième pic, on peut conclure que l'empilement n'est pas ordonné.

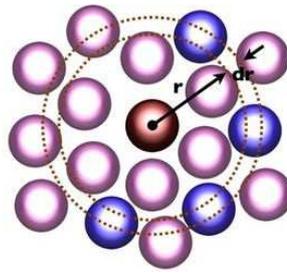


FIG. 2.26 – Représentation de la distribution radiale pour un empilement 2D [Frenkel et Smit (2002)].

2.9 Conclusion

Dans le contexte général de l'étude de la compression des poudres par la méthode des éléments discrets, on a pris le parti de développer un nouvel algorithme géométrique de génération pour réaliser les assemblages granulaires destinés à l'étape initiale des calculs de comportement mécanique sous charge de ces assemblages. Par rapport aux autres méthodes déjà développées, ce nouvel algorithme géométrique se positionne comme un outil capable d'une grande flexibilité pour l'utilisateur et pouvant générer très rapidement des empilements avec des textures granulaires très diversifiées. Sa finalité est d'être utilisable pour tout type de milieu granulaire avec le moins de restrictions possibles. Ceci est indispensable du fait des formes géométriques variées des particules qui induisent des propriétés mécaniques variées au sein des empilements réels. Pour savoir si cet algorithme peut générer des textures granulaires intéressantes pour la modélisation de la compression des poudres, on propose au début du chapitre suivant de caractériser à partir des différents post-traitements, les différents empilements générés via cette méthode.

Dans ce chapitre, on a également présenté un nouveau modèle de contact pour modéliser la phase de compression des poudres par la méthode des éléments discrets. Ce modèle basé sur une loi de contact normal inédite intègre une nouvelle variable physique dans la méthode numérique qui est la densité locale. Ce nouveau paramètre est pris en compte dans le calcul grâce aux cellules de Voronoï. Le taux de déformation de chaque cellule de Voronoï au cours de la densification sera relié au paramètre de densité locale. La validation de ce modèle de contact est une étape incontournable qui sera réalisée au chapitre suivant.

Résultats et validations

Résumé du chapitre: Par rapport aux méthodes existantes, le nouvel algorithme géométrique développé apporte de fortes améliorations en temps de calcul pour la génération de l'échantillon ainsi qu'en terme de contrôle de la distribution de compacité obtenue. Grâce aux post-traitements appliqués sur des échantillons, il apparaît que l'algorithme géométrique génère des empilements désordonnés isotropes. De plus, ces empilements peuvent être très lâches ou denses avec un nombre de coordination très élevé. En ce qui concerne le modèle de contact développé pour les simulations aux éléments discrets de compression, les résultats obtenus par ce modèle sont validés par rapport aux résultats expérimentaux issus de la compression de poudres métalliques réelles. Fort de ces résultats, un exemple de la modélisation de la compression en matrice de poudre d'aluminium est réalisé à partir d'empilements présentant un gradient de compacité. Des textures granulaires proches de celles rencontrées dans une matrice sont générées par l'algorithme géométrique développé. Des résultats découlant de l'association du modèle de contact et de l'algorithme de génération, on observe l'évolution de la texture et du gradient de la compacité durant la compression à une forte valeur de compacité.

3.1 Introduction

Dans ce dernier chapitre, la mise en pratique de l'algorithme géométrique de génération et l'application du modèle de contact, présentées au chapitre précédent, seront réalisées dans le cadre de la modélisation de la compression des poudres.

Avant de passer à la partie mécanique du mémoire, nous allons procéder à la caractérisation de l'algorithme géométrique développé. Cette caractérisation consiste à définir à l'aide des différents types de post-traitements présentés à la section 2.8, la multitude de textures granulaires qu'il est possible de générer. On s'attachera à donner dès le début de ce chapitre un maximum d'informations sur les attentes vis-à-vis d'un tel outil. Une fois cette première partie réalisée, la deuxième section du cha-

pitre sera consacrée à l'utilisation du modèle de contact dans le cadre de simulations de compression d'un empilement similaire à la poudre réelle.

Dans un premier temps, pour réaliser cette modélisation étape par étape, la validité du modèle de contact employé dans les simulations aux éléments discrets est testée. Pour rappel, ces simulations concernent spécifiquement la compression de poudres jusqu'à des valeurs élevées de compacité (compacité supérieure à 0,9). La validation du modèle est faite en comparant les résultats obtenus par la méthode des éléments discrets (MED) et la méthode éléments finis multi-particules (MEFMP). On précise que ces deux méthodes sont appliquées à partir d'empilements et de chemins de chargements identiques pour les deux méthodes. Le processus de validation entrepris continuera avec des comparaisons entre les simulations aux éléments discrets et des résultats expérimentaux issus de la littérature.

L'intérêt de valider au préalable le modèle de contact utilisé permet d'acquérir un certain degré de confiance dans les résultats issus des simulations à venir et pour lesquelles il n'existe pas toujours de données expérimentales disponibles. La démarche scientifique privilégiée est celle qui consiste à partir d'un modèle reconnu fiable, d'étudier la réponse et l'évolution d'un milieu granulaire, dans des cas où seule la simulation numérique peut intervenir.

Dans la métallurgie des poudres, cette démarche est employée pour l'étude des phases de remplissage et de transfert (voir Sec. 1.4). Pour ce qui est de la compression des poudres, Martin et al. ont montré tout l'intérêt et le potentiel d'un modèle de contact fiable, en simulant la compression d'une poudre bimodale [Martin et Bouvard (2004)] ou encore celle d'une poudre pré-alliée [Martin et Bouvard (2003)]. Ces différentes études opérées jusqu'à une valeur de compacité égale à 0,85 permettent de façon rapide et peu coûteuse de mieux comprendre le procédé de fabrication avec l'objectif sous-jacent de pouvoir améliorer les propriétés du matériau.

Dans le cas de notre étude, nous tenterons de déterminer à partir de simulations MED, l'influence et l'évolution du gradient de compacité présent dans l'empilement granulaire avant la phase de compression. Il s'agit d'un axe de recherche que l'algorithme géométrique de génération d'empilements de sphères permet de réaliser avec une certaine aisance.

3.2 Résultats et propriétés du nouvel algorithme géométrique

L'objectif de cette section en rapport avec l'algorithme géométrique développé est de montrer de façon simple et claire le potentiel de celui-ci. Pour cela, la présentation consiste dans un premier temps à analyser les différentes plages de compacité qui peuvent être atteintes, pour des valeurs de ratios de taille entre les sphères, dans un deuxième temps d'étudier les différentes propriétés géométriques (orientation géométrique des contacts, distribution de tailles, ...) de l'assemblage granulaire. Concrètement, deux empilements radicalement différents seront générés et post-traités; les résultats issus des divers post-traitements seront ainsi analysés. Par ailleurs une partie de cette analyse conduira à formuler des généralités sur tous les agrégats de sphères générés par ce nouvel outil.

Dans la conclusion de cette partie, nous nous attacherons à faire apparaître l'intérêt d'un tel outil pour l'étude de la compression des poudres.

3.2.1 La diversité des textures générées

Au sein d'un milieu granulaire réel, la compacité de l'agrégat est limitée par la différence des tailles entre les particules (ratio de taille) et par le frottement inter-particulaire. Il est établi que plus la valeur du ratio de taille entre les grains est élevée et plus l'agrégat pourra tendre vers une compacité (C) élevée. Cette influence du ratio de taille sur la compacité repose sur l'hypothèse que le frottement inter-particulaire ne bloque pas le réarrangement granulaire.

Le deuxième corollaire qui est induit par l'effet de la polydispersité sur la texture granulaire est que : la variation du nombre de coordination (Z) dans un assemblage granulaire est liée à la valeur de la compacité de ce dernier. Il est constaté expérimentalement que plus le milieu granulaire est compact, plus le nombre de coordination peut être élevé. Donc il semble logique que les assemblages numériques créés par les différentes procédures de génération doivent respecter le fait que plus les particules sont polydisperses et plus ces échantillons ont la possibilité d'être compacts avec un nombre élevé de contacts par sphère (i.e., nombre de coordination).

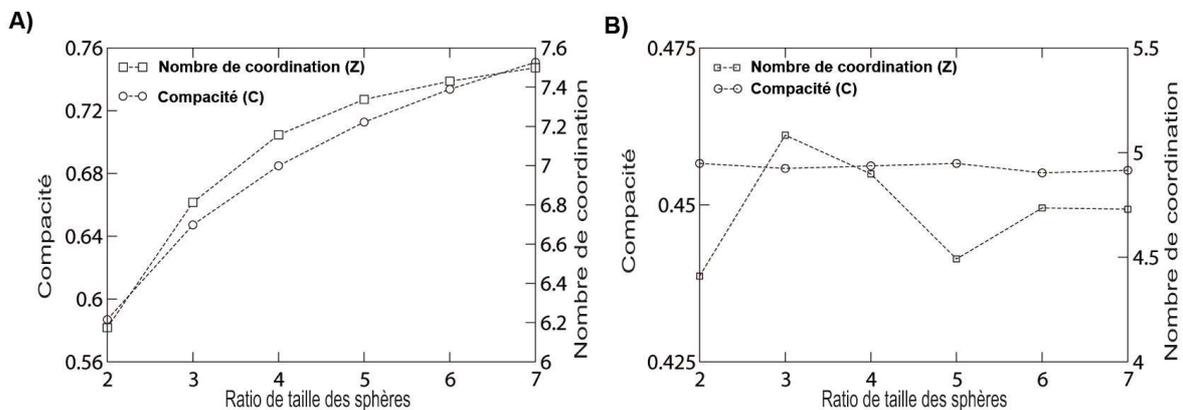


FIG. 3.1 – Le graphe de compacité et du nombre de coordination en fonction du ratio de taille: A) Les assemblages les plus compacts. B) Les assemblages "poreux" avec une compacité fixée à 0,45.

Afin de positionner les caractéristiques des empilements issus de l'algorithme développé au cours de la thèse, des échantillons avec une valeur de ratio qui varie de 2 à 7 sont générés, ceci à partir d'un même maillage cubique ($1 \times 1 \times 1$) comportant 1112 tétraèdres. Ces empilements feront l'objet d'une étude spécifique portant sur la compacité et sur la valeur du nombre de coordination par mise en œuvre des outils de post-traitement présentés à la section 2.8.

La démarche d'analyse proposée consiste à créer pour chaque valeur de ratio de taille, un empilement cubique poreux avec une compacité fixée à une valeur de $C = 0,45$ et un deuxième plus dense avec une compacité maximale induite par les limites de l'algorithme. Du point de vue de l'utilisateur, la procédure adoptée conduit à définir un fichier de maillage cubique et d'indiquer la valeur du ratio (entre 2 et 7), de la compacité (0,45 ou 1) et de l'ordre de grandeur de l'interpénétration maximale autorisée entre les sphères (fixée à $10^{-7} \cdot R_{min}$).

Du point de vue de l'algorithme, la séquence réalisée est aussi simple. Dans un premier temps, celui-ci va fixer la taille des sphères en fonction de la taille des mailles tétraédriques et de la valeur du ratio. Puis, l'adaptation de la démarche de génération va s'opérer en fonction de la valeur de la compacité voulue (voir FIG. 2.21 à la section 2.7.4). Précisons que si l'algorithme n'arrive plus à placer de nouvelles sphères dans l'assemblage, il s'arrête automatiquement en proposant à l'utilisateur d'augmenter la valeur du ratio. Cette réaction, fonction de l'ensemble des valeurs numériques associées

aux données d'entrée fournies, peut être traduite comme les limites de l'algorithme en termes de placement de sphères (voir le paragraphe 2.7.1).

Une fois tous les échantillons générés, les résultats des différentes valeurs de compacité et du nombre de coordination obtenus sont représentés dans des graphes du type de la figure 3.1. Afin de mieux appréhender les morphologies d'agrégats en cours d'analyse, l'empilement le plus poreux (ratio=2, $C = 0,45$) et l'empilement le plus compact (ratio=7, $C = 0,8$) sont respectivement présentés à la figure 3.2.

L'analyse simultanée portant sur les deux graphes traitant de la compacité et du nombre de coordination des empilements denses (voir FIG. 3.1-A) et poreux (voir FIG. 3.1-B) permet de relever un certain nombre d'informations très pertinentes qui jouent tant en faveur qu'en défaveur de ce nouvel algorithme géométrique. La première conclusion significative liée aux deux graphes de la figure 3.1 est que l'évolution du nombre de coordination est bien en concordance avec l'évolution de la compacité.

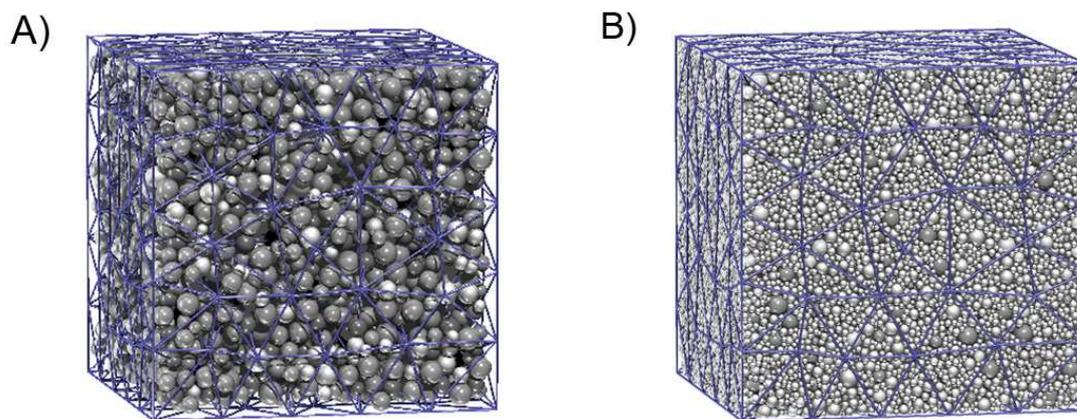


FIG. 3.2 – Les différents empilements cubiques générés en respectant les frontières du domaine: A) Empilement poreux de ratio égal à 2 avec une compacité fixée de 0,45 réalisé en 80s (4.736 sphères). B) Empilement compact de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,8 réalisé en $2,2390 \cdot 10^4$ s (66.000 sphères)

Suite à une analyse portant sur chaque graphe individuel en commençant par le graphique A (voir FIG. 3.1-A), il ressort que les valeurs du nombre de coordination sont très élevées pour un empilement de sphères, cela quelque soit la valeur du ratio. De plus, des valeurs très élevées de la compacité ($C > 0,7$) sont disponibles pour un ratio de taille de sphères ayant une valeur moyenne (ratio=4). Il est en effet très intéressant pour un coût de calcul faible associé à ce type de génération d'empilement de pouvoir accéder à des empilements très compacts à partir de telles valeurs de ratio.

Concernant l'identification d'un point faible de l'algorithme proposé, il est apparent sur ce graphe pour les résultats (valeur de la compacité et nombre de coordination) à une valeur de ratio de taille égale à 2. Ainsi pour de faibles valeurs de ce ratio, on remarque que l'algorithme place très peu de sphères en contact et ne peut générer des agrégats très compacts. Dans ce contexte spécifique aux empilements plutôt monodisperses, les algorithmes dynamiques présentent par exemple de meilleures performances en termes de compacité, comparativement à l'algorithme géométrique proposé. Ce défaut au regard de la recherche de grande compacité est principalement dû aux principes de placement des sphères. En effet, la routine de placement d'une sphère en contact avec quatre autres

sphères se trouve très contrainte par ces petites valeurs de ratio. Toutefois, cette "difficulté" demeure peu gênante pour la modélisation de milieux granulaires très polydispersés tels que les poudres industrielles.

Concernant le graphique B (voir FIG. 3.1-B), on remarque que quelque soit la valeur du ratio, l'algorithme peut générer des assemblages poreux (compacité fixée à 0,45) sans aucune difficulté, avec un nombre de coordination qui reste là encore élevé.

Une dernière information exploitable au travers de cette étude est l'histogramme de la distribution de probabilité cumulée du nombre de contacts par sphères (voir FIG. 3.2). Ce type de diagramme permet de savoir s'il existe des sphères au sein de l'empilement dont le nombre de contacts est insuffisant pour assurer un équilibre mécanique. Cette information relative à l'équilibre de chacune des sphères ne peut pas transparaître au travers de la simple valeur du nombre de coordination moyen. Afin de se faire une idée plus précise sur la forme de ce diagramme, deux histogrammes de probabilité cumulée du nombre de contacts par sphères correspondant aux deux empilements sont proposés à la figure 3.3. Ces histogrammes permettent de conclure que pour des valeurs de compacité égales ou supérieures à 0,45, chaque sphère a établi au moins un contact.

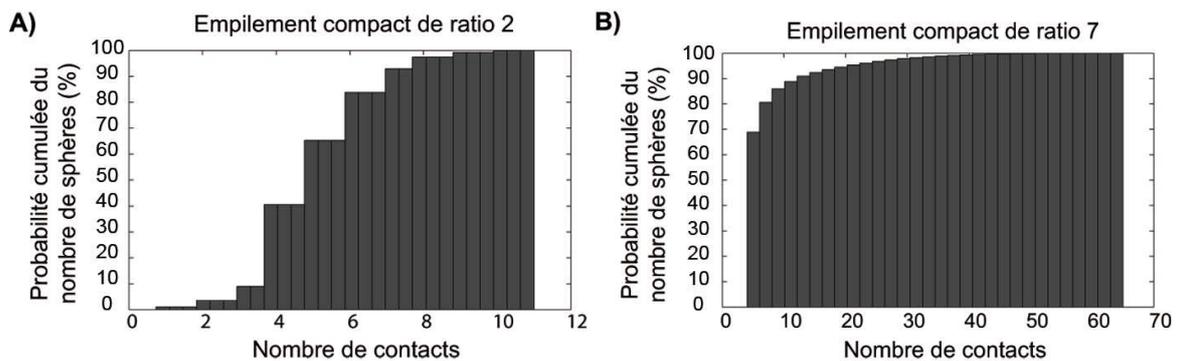


FIG. 3.3 – Les histogrammes de la distribution de probabilité cumulée du nombre de contacts par sphère: A) Histogramme correspondant à l'empilement de ratio égal à 2 avec une compacité fixée de 0,45. B) Histogramme correspondant à l'empilement de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,8.

Cette partie a traité de la diversité des textures granulaires créées à partir d'un maillage unique, l'algorithme géométrique révèle globalement des propriétés très intéressantes. Nous n'irons pas jusqu'à affirmer que les empilements obtenus avec cette nouvelle méthode sont mécaniquement stables de manière systématique, car les empilements sont conçus en ne tenant compte d'aucun paramètre physique (gravité, frottement, viscosité, ...). Ces paramètres physiques interviendront dans les simulations mécaniques, une fois les empilements générés.

Le nombre de coordination très élevé induit par la routine géométrique de placement de sphères favorise une stabilité mécanique très rapide lors de la phase de simulation. Aujourd'hui, seul un nombre très restreint de méthodes de génération peuvent produire un nombre de coordination aussi élevé dans de larges plages de valeurs de compacité. Avec ce type de valeurs, les résultats de générations sont bien adaptés par rapport à ce qui est observé dans le cas des poudres industrielles (voir Sec. 1.3).

Bien que cette première étude ait produit un recueil d'informations intéressantes, elle semble cependant un peu réductrice pour mener une caractérisation exhaustive de l'outil développé. D'autres études compléteront ce travail et porteront en substance sur : l'orientation géométrique des contacts,

l'évolution du nombre de coordination en fonction de l'ordre de grandeur de l'interpénétration maximale fixée par l'utilisateur, sur la distribution de taille des sphères pour un assemblage et sur les temps de calculs associés aux générations.

Tous ces résultats seront abordés dès le prochain paragraphe avec l'étude de différents empilements. Profitant également de la génération de ces nouveaux empilements, la séquence réalisée par l'utilisateur pour aboutir à la bonne exécution de l'algorithme sera passée en revue.

3.2.2 Caractérisation d'un empilement granulaire

Dans cette section dédiée à la caractérisation détaillée des empilements granulaires, tout un ensemble d'outils de post-traitement (sphère de mesure, fonction de distribution radiale, tenseur de fabrique, ...) sera utilisé pour caractériser deux assemblages de sphères très différents. Le but consiste à observer les propriétés géométriques communes aux empilements et celles qui sont radicalement différentes d'un empilement à l'autre.

Avant de mener la caractérisation détaillée de ces deux empilements, il est indispensable d'analyser l'influence de la valeur de l'interpénétration maximale autorisée, ceci dans le contexte des fortes valeurs du nombre de coordination trouvées dans le paragraphe précédent. Pour cela, cinq empilements cubiques (cube de $1 \times 1 \times 1$) de 10.000 sphères sont considérés avec une taille de sphère contrôlée ($R_{min} = 0,012$ et $R_{max} = 0,036$) et des valeurs de l'ordre de grandeur d'interpénétration maximale variant de 10^{-7} à 10^{-11} sont créées.

Ces cinq assemblages sont générés en créant dans un premier temps, un maillage à partir d'un cube ($1 \times 1 \times 1$) dessiné et maillé sous GMSH, avec comme seul paramètre fixé dans le maillage la longueur des arêtes du tétraèdre égale à 0,16 (i.e., longueur des arêtes = $R_{moy} \cdot 8 = 0,02.8$). Dès que le maillage est disponible, les paramètres d'entrée prennent les valeurs suivantes:

- Le nombre de sphères voulu égale à 10.000,
- Une compacité égale à 0 (car le nombre de sphères est fixé).
- Des valeurs minimale et maximale de rayon respectivement égales à 0,01 et 0,03,
- Une valeur de ratio égale à 0 (car les rayons des sphères sont fixés).
- Un ordre de grandeur de l'interpénétration entre les sphères fixées successivement à: 10^{-7} (Empilement 1), 10^{-8} (Empilement 2), 10^{-9} (Empilement 3), 10^{-10} (Empilement 4), 10^{-11} (Empilement 5) qui donnera une valeur d'interpénétration maximale égale à $-1 \times R_{min} \times$ ordre de grandeur de l'interpénétration.

Une fois les cinq assemblages de sphères créés avec ces cinq valeurs d'interpénétration maximale, l'exécution de divers post-traitements est effectuée pour analyser sur quels paramètres influe la variation de l'interpénétration maximale autorisée dans l'empilement.

3.2.2.1 Effets de la valeur d'interpénétration fixée sur les propriétés de l'empilement généré

La valeur maximale d'interpénétration autorisée (i.e., valeur minimale des interpénétrations = ordre de grandeur $\times R_{min}$) au sein de l'échantillon est un paramètre très pratique qui est facilement

contrôlable par l'utilisateur dans ce nouveau code de génération d'empilement. Il permet en fonction de la valeur de la raideur initiale de la loi de contact, d'ajuster la valeur maximale autorisée de l'interpénétration. De manière essentielle à la pratique de la MED, cet ajustement initial de la valeur d'interpénétration est opéré afin d'éviter l'apparition de forces de contacts élevées qui conduirait à l'éclatement de l'échantillon lors de la phase de simulation.

Les cinq échantillons considérés, se distinguant par la seule valeur de l'interpénétration 10^{-7} (Empilement1) à 10^{-11} (Empilement 5) sont soumis au post-traitement en vue de mettre en relief d'éventuelles variations sur : la compacité (C), le nombre de coordination Z et l'orientation des contacts. Tous les résultats obtenus sont récapitulés dans le tableau 3.1 :

TAB. 3.1 – Résultats des différents post-traitements pour les cinq empilements générés via P4 dual-core 2GHz

Empilement	C	Z	Valeurs propres $\beta_1, \beta_2, \beta_3$	Interpénétration max	Temps de calculs
1	0,573	6,54	0,332, 0,333, 0,334	$1,19.10^{-9}$	266 sec
2	0,576	6,56	0,332, 0,334, 0,334	$1,19.10^{-10}$	273 sec
3	0,572	6,54	0,332, 0,332, 0,335	$1,19.10^{-11}$	248 sec
4	0,576	6,57	0,333, 0,334, 0,333	$1,19.10^{-12}$	254 sec
5	0,586	6,15	0,333, 0,333, 0,334	$1,19.10^{-13}$	300 sec

Dans l'étude de ces cinq échantillons comportant 10.000 sphères, les résultats affichés permettent d'observer que la compacité de l'empilement et l'orientation des contacts ne varient pas en fonction de l'ordre de grandeur de l'interpénétration maximale fixée par l'utilisateur. Par contre, si on se réfère au temps de calcul et au nombre de coordination, il s'amorce une certaine tendance logique. En diminuant de manière progressive la valeur de l'interpénétration autorisée, une augmentation du temps de calcul et une diminution du nombre de coordination sont simultanément observées.

Ainsi pour une faible valeur de l'interpénétration d'une sphère avec ses voisines, l'algorithme va rejeter plus de sphères et aura besoin d'un plus grand nombre d'itérations pour atteindre la consigne utilisateur de 10.000 sphères. De plus avec une plus faible valeur des interpénétrations, les sphères peuvent interpénétrer et être en contact avec moins de sphères. Toutefois, ces variations de caractéristiques relatives au nombre de coordination Z et aux temps de calculs sont considérées comme n'étant pas vraiment pénalisantes.

3.2.2.2 Différents post-traitements appliqués à deux échantillons différents

Dans cette deuxième partie portant sur la caractérisation des propriétés des échantillons, au travers de deux empilements compacts générés avec deux ratios égaux à 1,5 et 7 respectivement, la présence ou non d'un ordre induit par les modalités algorithmiques de répartition spatial des particules au sein d'un empilement va être mise en évidence. Dans le cas d'un algorithme géométrique comme celui développé, la notion générale d'ordre spatial peut être induite par la démarche de génération et il est très important d'aborder cette notion. D'autre part, il est également opportun dans le cas des empilements créés de déterminer certaines propriétés comme l'orientation géométrique des contacts et le contrôle de la distribution de taille des sphères.

Pour cela, les deux empilements étudiés sont intentionnellement très différents. Ils constituent les "extrêmes" de ce que l'on peut générer par l'algorithme développé. Dès lors, l'hypothèse est faite qu'une grande partie des conclusions tirées des résultats obtenus pour ces deux assemblages pourra être généralisée à tous les empilements créés par cette nouvelle méthode géométrique.

Concernant l'étude de l'ordre dans un empilement de sphères, elle ne s'impose que pour des particules de taille unique. Dans la plupart des autres cas, la polydispersité induit généralement du désordre. Mais, au sein de notre démarche de génération, le même schéma de placement des sphères est répété dans chaque tétraèdre; ceci peut favoriser la création d'empilements ordonnés de sphères. Afin de donner un début de réponse à cette question, l'ordre spatial des deux empilements sera qualifié à l'aide de la fonction de distribution radiale (voir FIG. 3.4) de la distribution du nombre de facettes par sphère issues des polyèdres de Voronoï (voir FIG. 3.5), deux types de post-traitement déjà présentés au chapitre 2 (voir Sec. 2.8).

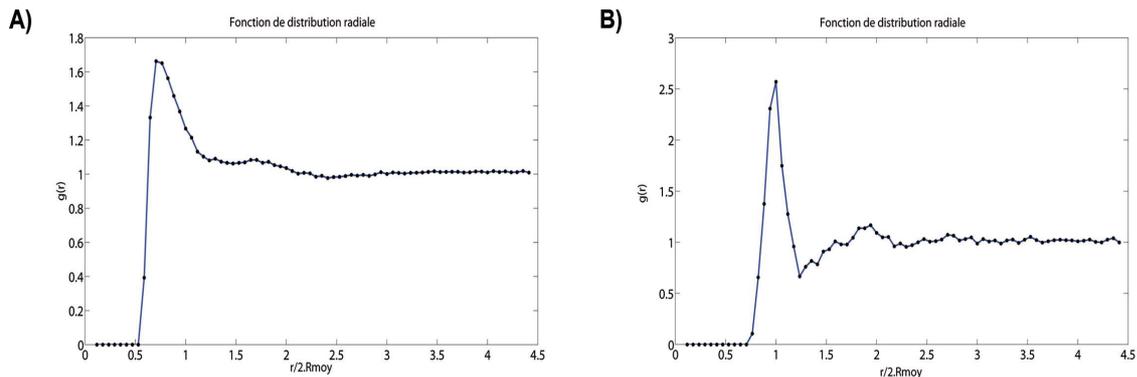


FIG. 3.4 – Les courbes de la fonction de distribution radiale: A) L'empilement avec un ratio égal à 7 le plus compact (voir FIG. 3.2-B) présente un fort amortissement des pics. B) L'empilement avec un ratio égal à 1,5 (voir FIG. 3.2-A) présente un amortissement de 50% au niveau des pics.

Une analyse de la courbe de la fonction de distribution radiale $g(r)$ pour les deux empilements traités (voir FIG. 3.4) conduit à constater sans équivoque qu'il n'y a qu'un seul pic supérieur ou égal à la valeur 3. Les autres pics présents sont rapidement amortis pour tendre vers une amplitude de 1. Ce résultat signifie bien que le positionnement du centre des sphères au sein de l'empilement ne suit aucune répétition géométrique et se fait de façon totalement désordonnée. L'analyse des histogrammes de distribution de probabilité du nombre de sphères pour les facettes polyédriques de Voronoï (voir FIG. 3.5) conclut à un étalement de la distribution du nombre de facettes par sphère pour les deux empilements. Ces résultats montrent bien que les sphères incluses à l'empilement ont des nombres de sphères proches qui varient. De ce constat, il apparaît que le positionnement des sphères n'est pas ordonné et qu'une éventuelle configuration géométrique de placement des particules n'est pas répétée. Il est important de garder à l'esprit que la démarche de remplissage d'une maille à l'autre est la même, mais que le positionnement d'une sphère au sein de l'empilement est contraint par l'environnement direct de cette sphère. Dans ce cas, la position et le rayon d'une sphère placée sont adaptés par la routine géométrique de placement en fonction des autres sphères déjà placées, ceci au cours des étapes rappelées à la figure 2.21.

Dans le cadre spécifique à l'empilement avec une valeur de ratio très élevée, il est intéressant de savoir si l'algorithme géométrique a tendance à placer plus de petites sphères uniquement autour des sphères de plus forts rayons. Pour vérifier cette éventuelle caractéristique, l'analyse porte sur l'empilement compact de ratio égal à 7. Le tracé de la distribution de probabilité du nombre de sphères pour les facettes polyédriques de Voronoï, pour toutes les sphères ayant une valeur de rayon supérieure ou égale à 80% du rayon maximum présent dans l'échantillon est alors pertinent (voir FIG. 3.6). En effet, le décompte de facettes de Voronoï situées à proximité des sphères de grands rayons est directement lié au nombre de sphères voisines. L'étude de cet histogramme montre que

les nombres de facettes proches des sphères à grands rayons varient de 10 à 70 ceci de manière assez étalée au regard du pourcentage des sphères représentées. Les nombres de facettes de plusieurs dizaines traduisent que les sphères de grands diamètres ont un voisinage direct composé de beaucoup de sphères de petits diamètres. Ces sphères de faibles diamètres sont elles-mêmes associées à des cellules de Voronoï situées à proximité des sphères de grands diamètres. Ceci semble assez logique dans la mesure où l'empilement caractérisé ici est fortement compact ($C = 0,749$) avec une valeur de ratio égale à 7 (voir le tableau 3.2).

L'autre conclusion majeure à tirer de ce diagramme est que là encore l'étalement des valeurs est très important et traduit une forte variation du nombre de sphères voisines proches des grosses sphères. Ce dernier résultat contredit l'hypothèse de la présence éventuelle d'un ordre dans les empilements générés. Il est donc possible d'affirmer que l'algorithme proposé n'a pas une tendance à placer systématiquement un nombre très élevé de petites sphères autour des sphères de plus grands diamètres puisque le diagramme associé à cette analyse présente un histogramme étalé.

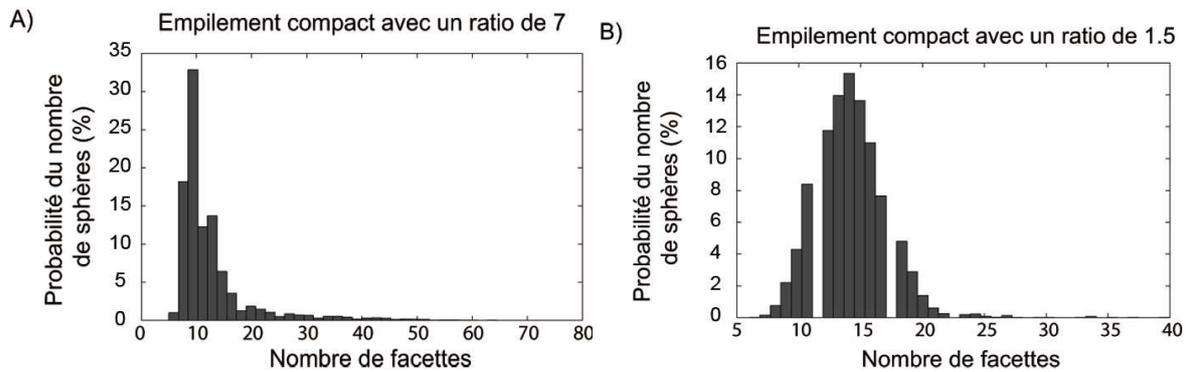


FIG. 3.5 – La distribution de probabilité du nombre de sphères pour les facettes polyédriques de Voronoï. A) Empilement de ratio égal à 7 avec une compacité de 0,749. B) Empilement de ratio égal à 2 avec une compacité de 0,505

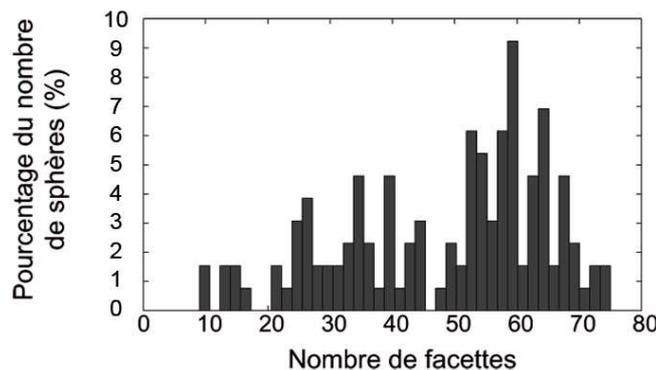


FIG. 3.6 – La distribution de probabilité du nombre de sphères en fonction du nombre des facettes polyédriques de Voronoï pour les sphères (129 sphères) ayant un rayon supérieur ou égal à $80\% \times R_{max} = 0,0384$.

Les empilements générés par cette nouvelle méthode ne sont pas ordonnés au sens où les distributions de répartition spatiale des rayons sont aléatoires. L'étude se poursuivra avec la détermination d'une orientation géométrique privilégiée ou non des vecteurs de contact au sein de l'empilement. Pour réaliser cette étude, trois types de post-traitement sur les deux empilements compacts sont ap-

TAB. 3.2 – Résultats caractéristiques des deux échantillons

Empilement	C	Z	Valeurs propres $\beta_1, \beta_2, \beta_3$	Nombre de sphères	Temps de calculs
ratio=1,5	0,5042	6	0,334- 0,332- 0,333	5.000	266 sec
ratio=7,0	0,7491	7	0,333- 0,333- 0,333	63.000	$2,2390 \cdot 10^4$ sec

pliqués : les valeurs propres du tenseur de fabrique (voir Tab. 3.2), les trois rosaces de contact (voir FIG. 3.7 et FIG. 3.8) puis finalement la quantification des directions de contact représentée en 2D (voir la FIG. 3.9). Il s'agit d'outils dont la présentation a été faite dans le chapitre 2 (voir Sec. 2.8).

Dans le cadre de cette étude de caractérisation des échantillons, les trois résultats établis, dans le cadre de cette étude de caractérisation des échantillons donnent des informations à une échelle globale (tenseur de fabrique) et à une échelle plus fine (rosaces de contacts et représentation 2D de la direction des contacts). De l'analyse des valeurs propres du tenseur de fabrique (voir Tab. 3.2), Il ressort que les deux empilements sont isotropes avec un degré d'isotropie légèrement plus marqué pour l'empilement compact de ratio égal à 7 (63.000 sphères).

Afin de confirmer cette hypothèse induite par l'égalité des valeurs propres du tenseur de fabrique, on se reporte aux rosaces de contacts (voir FIG. 3.7 et FIG. 3.8). Ces histogrammes représentent le projeté de tous les vecteurs de contacts dans les trois plans principaux. Si aucune direction de contacts n'est privilégiée au sein des deux empilements, l'histogramme aura une forme quasi circulaire. Dans le cas des résultats issus de ce post-traitement, il apparaît que la forme des différentes rosaces sont bien circulaires, ce qui tend à valider l'hypothèse sous-tendue par les valeurs propres du tenseur de fabrique. Il est encore possible d'observer un certain degré d'isotropie relatif entre les deux empilements puisque la forme circulaire des rosaces est plus marquée dans le cas de l'empilement compact de ratio égal à 7 (voir les figures 3.7) que pour une valeur de ratio égale à 1,5 (voir les figures 3.8).

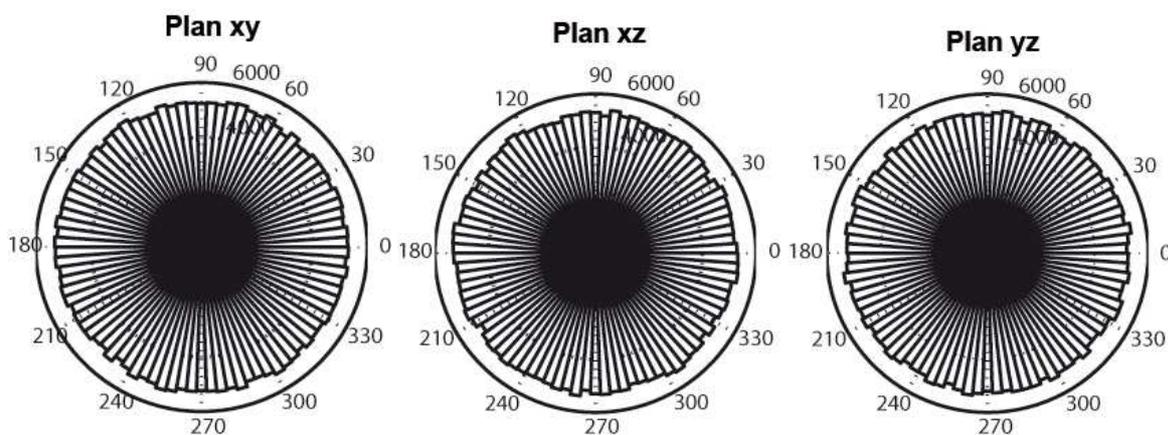


FIG. 3.7 – Le diagramme des orientations des contacts projetés sur les trois plans principaux pour l'empilement de ratio égal à 7

Le dernier outil de post-traitement utilisé, pour qualifier l'orientation géométrique des contacts au sein des deux empilements, est la représentation en 2D du nombre de vecteurs de contacts dans chaque direction de l'espace. Cet outil développé pendant cette thèse permet d'observer directement

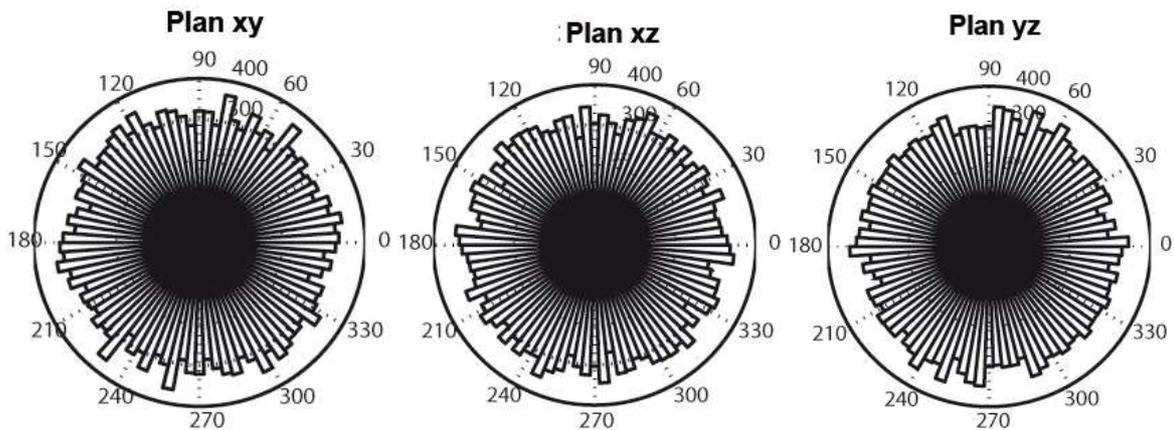


FIG. 3.8 – Le diagramme des orientations de contact projetées sur les trois plans principaux pour l'empilement de ratio égal à 1,5

toutes les directions privilégiées par rapport à d'autres. L'interprétation du résultat est très simple, il suffit de déceler une zone sur le plan qui est plus sombre que les autres. Autrement dit dans le cas d'un empilement parfaitement isotrope, le plan présente une couleur totalement uniforme. Dans la figure 3.9 où les deux plans issus de l'étude sont représentés, nous pouvons conclure que les empilements ne sont pas parfaitement isotropes. En effet, des niveaux de gris distincts sont apparents sur chacune des figures. Toutefois l'ordre de grandeur du nombre de vecteurs de contacts pour chaque direction de l'espace est le même car il n'y a que de très faibles variations de couleur d'une zone à l'autre. La couleur moyenne associée à la figure 3.9-A est plus foncée que la couleur moyenne de la figure 3.9-B car une échelle de gris commune à ces deux figures a été adoptée. Il est de nouveau possible de conclure qu'il n'y a pas de directions privilégiées déclarées par les vecteurs de contacts.

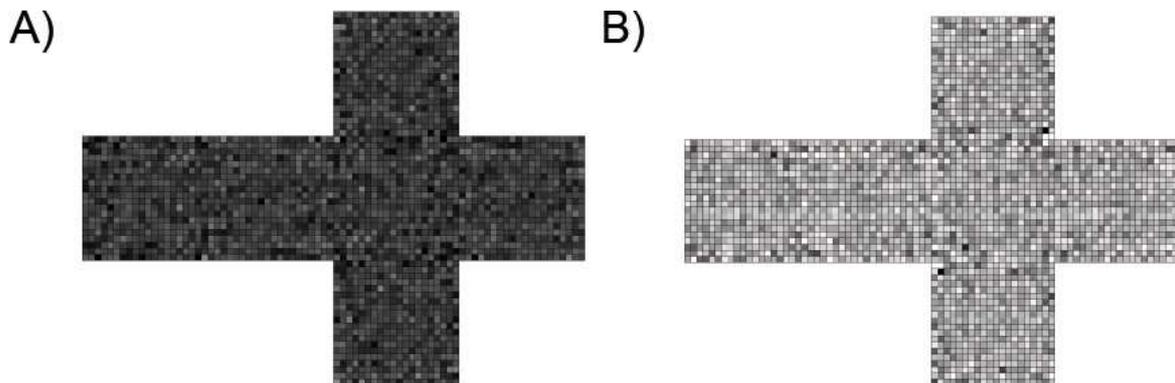


FIG. 3.9 – La représentation en 2D de l'orientation des contacts A) Empilement dense de ratio égal à 7 (nombre minimum de vecteurs de contact dans une direction égale à 25, nombre maximum de vecteurs de contact dans une direction égale à 234). B) Empilement compact de ratio égal à 1,5 (nombre minimum de vecteurs de contact dans une direction égale à 0, nombre maximum de vecteurs de contact dans une direction égale à 20).

La dernière propriété abordée dans cette section est la distribution de taille des particules. Ce paramètre a une importance capitale dans la modélisation du milieu granulaire, comme cela a déjà été précisé (voir Sec. 2.5). Pour l'algorithme développé dans le cadre de cette thèse, les deux valeurs minimale et maximale du rayon des particules peuvent être contrôlées par l'utilisateur. La définition

numérique de ces deux valeurs extrêmes ne permet pas pour autant le contrôle exhaustif de la distribution des tailles des particules proprement dites car celle-ci sera en fait conditionnée par les formes géométriques des différentes mailles tétraédriques et les principes fondant les étapes de l'algorithme. Comme le montre la figure 3.10-B, la distribution de probabilité de la taille de l'empilement avec un ratio égal à 1,5 est très étalée. La seule particularité consiste en deux pics pour chaque valeur extrême des rayons. Ce phénomène spécifique aux deux valeurs extrêmes des rayons n'est pas réellement physique au regard de cas de milieux granulaires réels à granulométries dites étalées. Cette caractéristique particulière est imposée par la routine de placement des sphères en fonction du maillage et des contraintes fixées par l'utilisateur.

Par contre une fois de hautes valeurs de compacité atteintes, la distribution de taille des particules a un sens plus physique au regard de certains milieux granulaires réels avec une granulométrie qui ressemble aux observations sur des empilements très compacts (voir Fig. 3.10-A). Dans ce cas, la distribution de taille des sphères a l'allure d'une loi statistique du type : log-normale supérieure.

Ce que l'on peut retenir de cette propriété, c'est que l'algorithme de génération peut imposer les limites de taille des sphères en respectant les contraintes utilisateurs (R_{min}, R_{max}). La seule véritable évolution à apporter à ce nouvel outil est la gestion de la distribution des tailles des particules par l'utilisateur comme la plupart des algorithmes déjà développés dans la littérature.

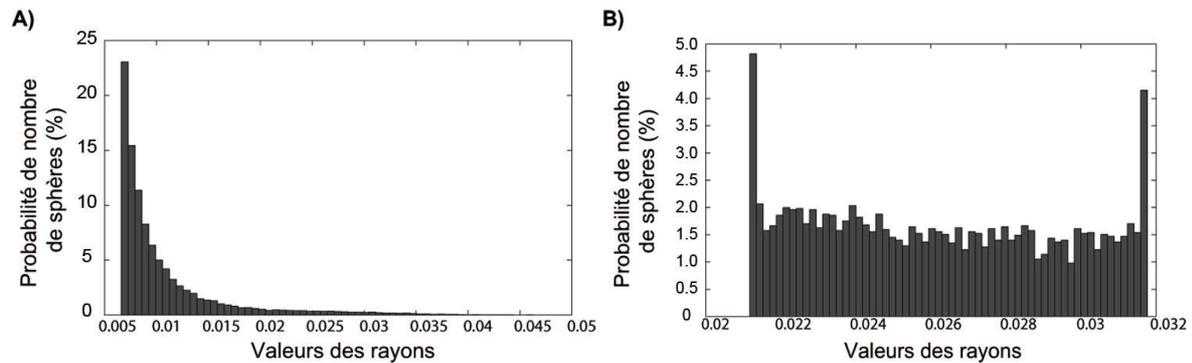


FIG. 3.10 – La distribution de tailles des sphères pour les deux empilements A) Empilement compact de ratio égal à 7. B) Empilement compact de ratio égal à 1,5.

En conclusion de cette partie sur la caractérisation des différents échantillons générés, nous avons vu que grâce à la méthode de placement des sphères dans l'assemblage, la notion d'ordre est absente. Pour autant, il est raisonnable d'éviter la génération des empilements de particules à partir de maillages où les tétraèdres sont ordonnés. Précisons que le maillage désordonné permet de changer l'environnement dans lequel les sphères sont placées d'un tétraèdre à l'autre. Concernant l'orientation des vecteurs de contacts, les nombreux résultats issus des divers post-traitements ont montré qu'aucune direction n'est privilégiée. En plaçant une bonne partie des sphères sur quatre contacts, l'isotropie géométrique des contacts ne peut que résulter de ce type de génération. Ceci est un avantage conséquent dans la plupart des simulations effectuées.

Une exception cependant : la modélisation d'un tas de poudres métalliques déposé par gravité est un cas particulier où l'algorithme ne peut reproduire la légère anisotropie présente dans l'empilement réel (voir chapitre 1). Les seules pistes exploitables à l'heure actuelle pour réaliser une telle configuration sont la génération des assemblages à partir de mailles tétraédriques orientées dans la direction souhaitée comme privilégiée et le placement des sphères sur trois contacts au lieu de quatre. Il demeure que ces hypothèses demandent encore à être vérifiées et validées. Néanmoins cette caractéristique intrinsèque de cette nouvelle approche correspondant à une forte majorité des modélisations réalisées pour les simulations discrètes est entièrement assumée.

TAB. 3.3 – Empilement avec $R_{min} = 1,7.10^{-2}$: $R_{max} = 3,4.10^{-2}$.

Algorithme	C	Z	$\beta_1, \beta_2, \beta_3$	Interpénétration maximale	Temps (min)
Géométrique	0,58	6	0,329- 0,333- 0,338	$1,7.10^{-9}$	10
Dynamique	0,639	5,5	0,331- 0,333- 0,336	$6,9.10^{-9}$	180

Le seul désavantage réel que peut concéder cette nouvelle méthode est le contrôle très précis de la granulométrie induit par le maillage et la routine géométrique de placement des sphères. Il semble difficile de contrôler précisément cette caractéristique, ceci sans que l'utilisateur n'ait un contrôle total sur la distribution de taille des tétraèdres du maillage. Pour avancer sur cette thèse, il s'agirait de pouvoir créer le maillage en fonction de la distribution de taille des particules imposée par l'utilisateur. La procédure consisterait à positionner des nœuds du maillage les uns par rapport aux autres dans le domaine d'étude avec un écartement réglé. Ensuite par l'application de l'algorithme de Delaunay, il doit être possible d'obtenir notre propre maillage réglé.

3.2.3 Le temps de calcul de génération d'empilement par rapport à l'algorithme dynamique de grossissement

La dernière propriété étudiée dans le cadre de la caractérisation de l'algorithme est le temps de génération d'un assemblage de sphères par rapport à un algorithme dynamique de grossissement des sphères, dont la démarche a été présentée dans la section 2.6.1.2 au chapitre 2. La comparaison de ces deux types d'algorithme peut sembler décalée. La grande différence entre ces deux méthodes est que l'algorithme dynamique à un temps de génération conditionné en grande partie par la stabilité mécanique de l'échantillon. Parallèlement l'algorithme géométrique ne porte aucune considération à cette notion de stabilité mécanique.

Cependant l'algorithme géométrique peut reproduire mis à part la distribution de taille des sphères, les mêmes propriétés (nombre de coordination, nombre de sphères, valeur d'interpénétration, orientation géométrique des contacts, R_{min} et R_{max}) que l'algorithme dynamique sur un empilement donné. L'intérêt de comparaison consiste donc sur la base d'une majorité de propriétés similaires de comparer le temps de génération.

Toujours dans un souci de généraliser les résultats et d'éviter les cas particuliers, deux types d'empilements sont étudiés. Dans les deux cas, l'empilement est généré dans un cube de $(1 \times 1 \times 1)$ avec 10.000 sphères. Le premier empilement étudié a une valeur de ratio égale à 2, avec une distribution de taille comprise entre $1,7.10^{-2}$ et $3,4.10^{-2}$. Le second empilement est construit avec une valeur de ratio beaucoup plus élevée (ratio=10) et une distribution de taille comprise entre $5,1.10^{-3}$ et $5,1.10^{-2}$ ce qui le démarque bien du premier empilement.

Considérant le premier empilement du tableau 3.3, on constate que l'empilement généré par l'approche géométrique n'est pas aussi compact que dans le cas de la génération dynamique. Cela est dû à la limitation maintenant bien connue de l'algorithme géométrique pour atteindre des valeurs de compacité supérieure à 0,6 pour un ratio inférieur à 2,5. Par contre, la valeur du nombre de coordination est supérieure dans le cas de la génération par l'approche géométrique, ce qui permet d'espérer à raison que l'empilement obtenu est aussi stable que l'empilement généré dynamiquement. En ce qui concerne l'orientation des contacts et la valeur maximale des interpénétrations, ces propriétés pour les deux empilements sont presque identiques. Par opposition à cela, les temps de calculs relatifs pour

TAB. 3.4 – Empilement avec $R_{min} = 5,1.10^{-3}$: $R_{max} = 5,1.10^{-2}$.

Algorithme	C	Z	$\beta_1, \beta_2, \beta_3$	Interpénétration maximale	Temps (min)
Géométrique	0,676	7	0,333- 0,333- 0,333	$5,1.10^{-8}$	24
Dynamique	0,668	3	0,330- 0,334- 0,336	$2,1.10^{-8}$	577

la génération sont totalement différents : le temps de calculs est de 18 fois inférieur pour l'algorithme géométrique par rapport à l'algorithme dynamique pour le premier type d'empilement.

Dans le deuxième cas d'empilement étudié, les résultats issus des analyses sont récapitulés par le tableau 3.4. Pour une valeur de ratio égale à 10, l'empilement généré par l'algorithme géométrique est aussi compact que l'empilement généré dynamiquement. Les valeurs de la compacité ne sont pas tout à fait égales. En effet parmi les paramètres d'entrée de l'algorithme géométrique, la valeur du nombre de sphères à 10.000 a été utilisée à la place de la valeur de la compacité.

Concernant les valeurs propres du tenseur de fabrique ($\beta_1, \beta_2, \beta_3$) et la valeur maximale des interpénétrations, on constate que les valeurs de ces paramètres sont très proches pour les deux techniques comparées. Par contre, en ce qui concerne les paramètres relatifs au nombre de coordination et au temps de génération, les deux algorithmes sont très différents et l'avantage tourne très nettement vers l'algorithme géométrique développé. Si on oublie la valeur très faible du nombre de coordination qui est uniquement induite par cette méthode dynamique et que l'on se concentre sur la forte différence du temps de génération pour 10.000 sphères dans un cas polydisperse, on perçoit bien l'intérêt des algorithmes géométriques et plus particulièrement celui développé durant cette thèse; lequel se révèle relativement souple d'utilisation.

Sur le temps de génération du nouvel algorithme proposé, il est possible d'affirmer au vu des résultats ci-dessus que l'approche proposée a un vrai potentiel. En effet les possibilités intrinsèques de cet outil peuvent être exploitées dans le domaine de la recherche et jouer un rôle dans l'utilisation de la méthode des éléments discrets dans l'industrie.

Conscient encore une fois qu'une étude plus approfondie doit être menée pour déterminer que cet algorithme n'a pas un temps de calcul quadratique. L'élément de réponse qui peut être avancé sans rallonger cette section est que: la recherche des voisins par l'algorithme ne s'étend pas sur tout le domaine d'étude et reste très localisée (voir Sec. 2.7.1). Donc le temps de génération va croître, plus la valeur de la compacité va augmenter (augmentation du nombre des sphères voisines proches) et plus la valeur du ratio indiquée sera petite.

Mais afin d'ôter certains doutes, il faut garder à l'esprit que l'algorithme géométrique qui est en train d'être transcrit en langage compilé (C++) annonce une réduction du temps de génération divisé au minimum par six ce qui en fera incontestablement un outil encore plus efficace.

En conclusion de cette section sur la caractérisation de l'algorithme géométrique, nous avons vu que ce nouvel outil numérique a de nombreux avantages tels que : un faible temps de calcul, un nombre de coordination élevé, les empilements désordonnés et isotropes, les fortes valeurs de compacité possibles pour un faible ratio, ...

Le seul défaut potentiel de l'algorithme est que celui-ci ne peut respecter une distribution de taille des particules préalablement imposée par l'utilisateur. Si cette contrainte est gérée par la plupart des autres algorithmes, elle n'est pas prise en compte par notre outil. En contrepoint, il est appréciable de savoir que des options comme le contrôle de la valeur minimale, maximale des rayons et de la valeur de l'interpénétration maximale sont disponibles.

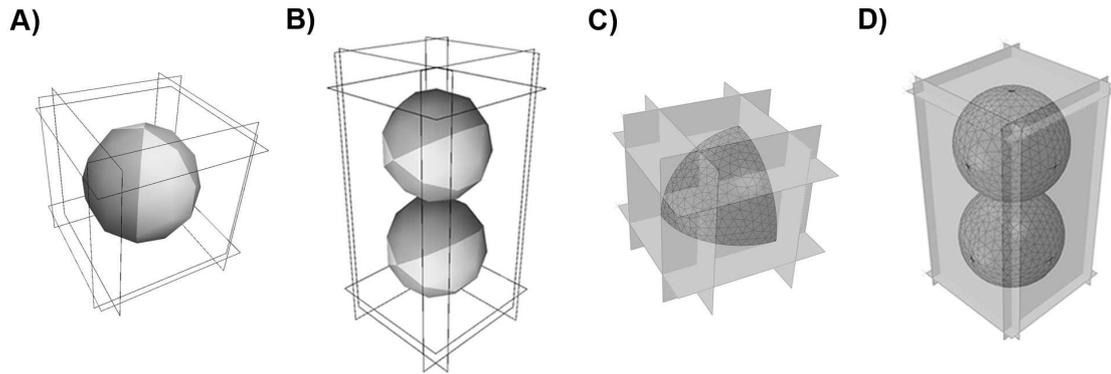


FIG. 3.11 – Représentation des différentes configurations initiales utilisées dans les tests de validation des interactions sphères-parois et sphères-sphères. A) Une sphère rigide dans un cube pour les simulations MED. B) Deux sphères rigides dans un parallélogramme pour les simulations MED. C) Un quart de sphère maillé dans un cube pour les simulations MEFMP. D) Deux sphères maillées dans un parallélogramme pour les simulations MEFMP

Tout comme le choix pour l'utilisateur d'imposer un nombre final de sphères ou une valeur de la compacité finale, la richesse des options à disposition ne s'arrête pas là. Elles se déclinent avec la possibilité de créer une distribution de la compacité dans l'empilement ainsi que des formes géométriques illimitées du domaine d'étude pré-maillé (voir annexe F). Toutes ces possibilités sont d'un très grand intérêt dans l'étude de la compression des poudres. Elles seront employées à la fin de la section suivante, lors d'une simulation de compression en matrice d'une poudre réelle, une fois que le modèle de contact utilisé dans les simulations MED sera validé.

3.3 Validation du modèle de contact utilisé dans l'approche discrète

Le modèle de contact employé pour modéliser la compression de poudres jusqu'à des valeurs élevées de compacité est développé en associant différents types de lois de contact, dont la loi de contact normal développée par Harthong et al. [Harthong *et al.* (2009)] (voir Sec. 2.3.1). Cette loi de contact est développée à partir d'analyses éléments finis faites sur des empilements ordonnés (voir Sec. 1.8). Pour notre étude sur la compression des poudres métalliques, il est donc nécessaire de valider à partir d'empilements désordonnés de sphères le modèle de contact, où la loi de contact normal y est intégrée. Dans le cadre de cette thèse, le modèle de contact est implanté dans le code open-source Yade, afin de procéder à différents tests de validation. Des tests consistent dans un premier temps à valider l'interaction entre les sphères et celle entre la sphère et une paroi. Une fois que ces tests sont validés, la robustesse du modèle de contact sera appréciée en comparant les résultats de simulations discrètes avec des résultats issus de la méthode éléments finis multi-particules et de l'expérience.

3.3.1 L'interaction paroi-sphère et sphère-sphère

Avant de réaliser des simulations de compression à plus grande échelle (i.e., avec un nombre de particules supérieure à 2) où le comportement local du grain sera masqué par la réponse globale du milieu granulaire, il est important d'évaluer les différentes interactions (sphère-paroi et sphère-

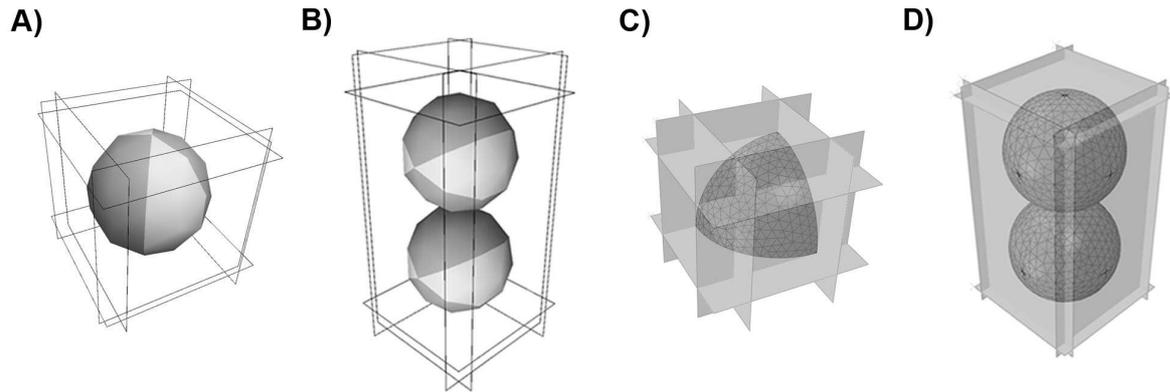


FIG. 3.12 – Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression isostatique réalisées par la MED et la MEFMP jusqu'à une valeur de compacité de 0,97 sur: A) une sphère B) deux sphères.

sphère) implantées entre les particules. La démarche privilégiée pour procéder à la vérification de l'interaction entre une sphère et une paroi et entre deux sphères est de confronter des résultats issus des simulations aux éléments discrets, à la méthode de référence MEFMP (voir Sec. 1.7.1).

Les simulations consistent à comprimer de façon isostatique une sphère puis deux sphères de plomb ($k = 20,5\text{MPa}$, $n = 4,166$) placées dans un parallélogramme (voir Fig. 3.11) en imposant le déplacement des six parois. Dans le cas de l'interaction sphère-paroi, nous nous intéresserons à la pression induite sur une paroi lors de la compression d'une sphère de rayon 0,5 dans un cube de $1 \times 1 \times 1$ (voir Fig. 3.11-A et Fig. 3.11-C). Pour l'interaction sphère-sphère, nous étudierons également la pression appliquée sur une paroi lors de la compression de deux sphères de rayon 0,25 dans un parallélogramme de $1 \times 0,5 \times 0,5$ (voir Fig. 3.11-B et Fig. 3.11-D).

Une fois les simulations exécutées, les figures 3.12A-B montrent une superposition quasi parfaite des courbes réponses issues des simulations MED et MEFMP. Cette superposition des courbes dans le cas de la simulation avec une sphère et avec deux sphères montre que le modèle de contact reproduit le comportement de particules fortement déformées à partir d'un corps rigide. On peut donc conclure que l'intégration du modèle de contact dans le code élément discret Yade est réussie. Finalement le développement nécessaire pour le bon fonctionnement de la loi de contact normal est validé. Le choix de courbes réponses représente l'évolution de la pression appliquée sur les parois en fonction de la compacité favorise la lecture directe des valeurs de compacité. Mais ce type de représentation ne permet pas d'avoir des informations sur la valeur de l'interpénétration en fin de simulation (compacité égale à 0,97), une donnée importante pour les spécialistes du domaine. Dans le test de validation de l'interaction sphère-paroi, l'interpénétration en fin de compression est de 18% par rapport au rayon de la sphère égale à 0,5. Pour le deuxième test avec les deux sphères, la valeur de l'interpénétration entre les sphères à la fin de la simulation est de 40% par rapport au rayon des sphères égale à 0,25. Ces informations donnent ainsi une idée de l'amplitude des déformations mises en jeu et de l'influence qu'elles peuvent avoir sur la réponse macroscopique.

On notera que les mêmes simulations ont également été réalisées avec succès en faisant varier les deux paramètres matériaux que sont k et n (voir Sec. 1.8).

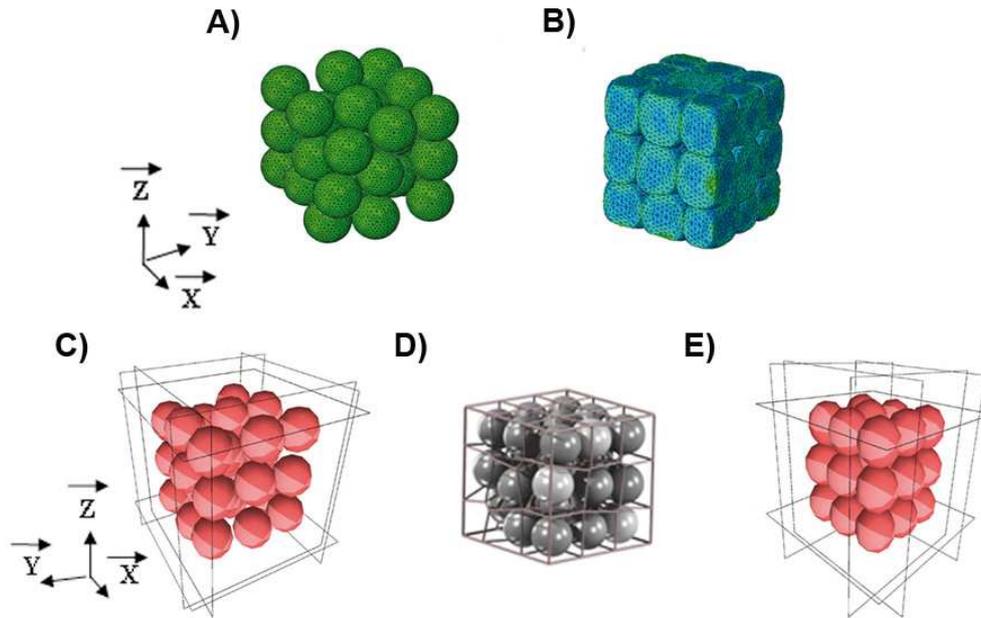


FIG. 3.13 – Compression isostatique d'un empilement de 32 sphères de plomb (rayon=0,153) par la MEFMP et la MED. A) Empilement initial de sphères maillées utilisé dans les simulations éléments finis. B) Empilement de sphères maillées comprimé isostatiquement. C) Empilement initial de sphères rigides utilisé dans les simulations aux éléments discrets. D) Empilement de sphères représenté avec les cellules de Voronoï associées. E) Empilement de 32 sphères rigides comprimé isostatiquement par le logiciel Yade.

3.3.2 Comparaison entre la DEM et la MPFEM pour deux chemins de chargement

Maintenant que le comportement local des grains est intégré dans le code Yade, la validation du modèle de contact se poursuit avec la compression d'un empilement désordonné de sphères positionnées dans un cube ($1 \times 1 \times 1$). Ces tests vont se faire encore une fois sur la base d'une comparaison entre des résultats issus de la méthode éléments discrets (MED) et ceux de la méthode éléments finis multi-particules (MEFMP). Comme dans le cas précédent de validation, les contraintes sur les parois dans les trois directions du déplacement sont les valeurs comparées.

Concernant les simulations de compression, elles sont faites suivant deux chemins de chargement (matrice et isostatique) sur un empilement qui comporte 32 sphères de même taille (voir FIG. 3.13 et FIG. 3.14). Le faible nombre de sphères présentes dans l'empilement limite le temps de calcul au niveau de la MEFMP. Précisons au passage que chacune des simulations éléments finis réalisées à partir d'un empilement de 32 sphères compte en moyenne 55 heures de temps de calcul et mobilise 16 processeurs. D'un autre côté, la même simulation aux éléments discrets se fait en moyenne en 10 minutes, un gain de temps au niveau du calcul qui est considérable. Cette performance ne sera valide que si les simulations MED reproduisent un comportement similaire aux simulations de référence MEFMP.

Les premières simulations réalisées dans le cadre de cette comparaison ont été faites sans frottement, à partir de sphères qui ont les propriétés matériaux du plomb ($k = 20,5\text{Mpa}$ et $n = 4,1667$). Les figures 3.15A-B représentent les courbes d'évolution des contraintes suivant les trois directions principales. On peut rappeler que ces contraintes sont générées par le déplacement des parois nécessaire à la réalisation du chargement isostatique ou en matrice. La figure 3.15-A montre la réponse

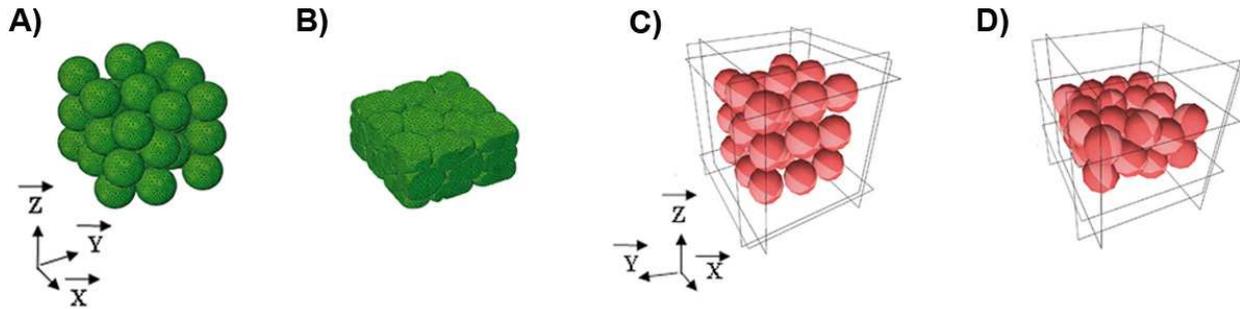


FIG. 3.14 – Compression en matrice d'un empilement de 32 sphères de plomb par la MEFMP et la MED. A) Empilement initial de sphères maillées utilisé dans les simulations éléments finis. B) Empilement de sphères maillées comprimé en matrice. C) Empilement initial de sphères rigides utilisé dans les simulations aux éléments discrets. D) Empilement de 32 sphères rigides comprimé en matrice par le logiciel Yade.

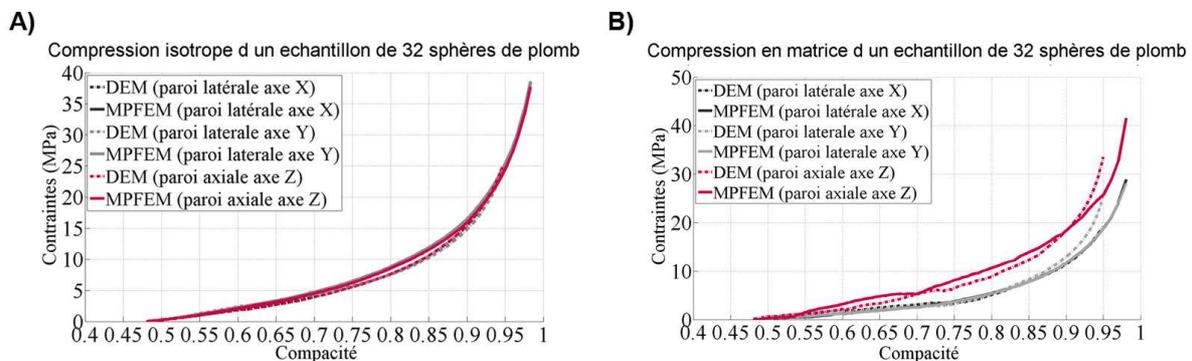


FIG. 3.15 – Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression de 32 sphères de plomb réalisées par la MED et la MEFMP. A) Cas d'un chargement isostatique. B) Cas d'un chargement en matrice.

d'une compression isostatique de l'empilement de 32 sphères de plomb réalisée dans le cadre de la comparaison des deux méthodes numériques. On voit clairement que la pression appliquée sur les parois est la même pour les deux méthodes numériques (MED et MEFMP).

Concernant l'essai en matrice, les courbes représentées à la figure 3.15-B montrent que les réponses entre les deux méthodes numériques ne sont pas superposées. En effet, une légère divergence des valeurs de pressions appliquées sur les parois se produit à une compacité supérieure à 0,9. L'hypothèse formulée est que cette divergence est due à la composante de densité locale de la loi de contact normal qui régit la valeur des forces dans cette zone. Pour ces valeurs élevées de la compacité, il a été montré dans la section 1.8 que la partie de la loi de contact normal qui intègre le terme de densité locale a une forte influence. Pour vérifier cette hypothèse émise et trouver la véritable source de cette divergence, la même simulation de compression en matrice est réalisée à partir de différents empilements monodisperses qui comptent toujours 32 sphères.

Mais avant de procéder à ce nouveau cas d'étude, nous voulons juste faire observer que les courbes réponses associées à la MED (avant d'être proches de la réponse MPFEM) ont un vrai sens physique. Dans le cas isostatique, la pression appliquée sur les six parois est la même. Pour la com-

pression en matrice, les pressions sur les parois latérales (i.e., la direction d'axe X et Y) sont égales et restent bien inférieures à la pression appliquée sur les parois axiales (i.e., la direction d'axe Z). Ce type de critère est capital pour la validité du modèle de contact.

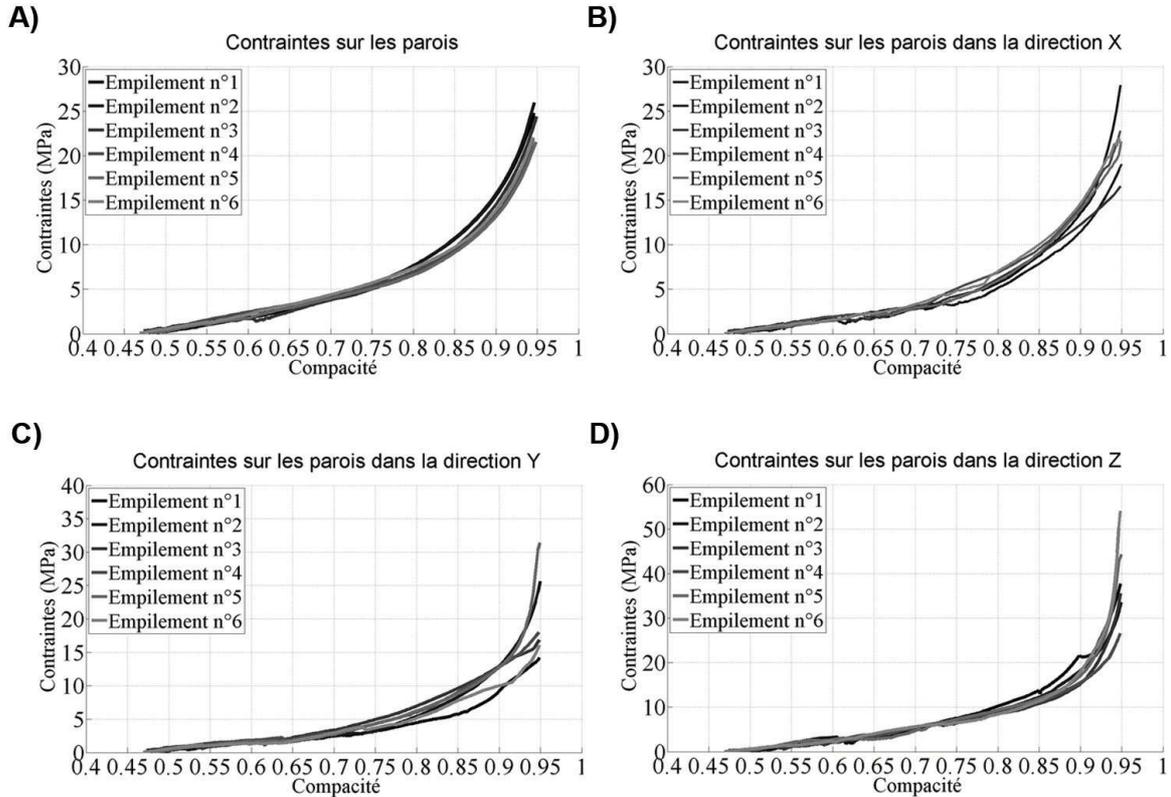


FIG. 3.16 – Courbes réponses en contrainte-compacité pour des simulations de compression réalisées par la MED à partir de six empilements différents comptant chacun 32 sphères en plomb. A) Courbes pour un chargement isostatique. B) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction X pour un chargement en matrice. C) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction Y pour un chargement en matrice. D) Courbes de pression appliquée sur les parois dans la direction Z pour un chargement en matrice.

Concernant la variabilité des réponses pour des échantillons à faible nombre de sphères rigides, des simulations de compression en matrice et isostatique sont menées sur six empilements de 32 sphères avec des configurations spatiales différentes. Les résultats issus de ces six simulations montrent qu'il existe une certaine variabilité de la réponse avec la méthode des éléments discrets d'un échantillon à un autre. Par contre, ces écarts de réponse sont quasi inexistantes pour les résultats de simulation MEFMP associés à ces mêmes configurations.

L'existence d'une divergence au niveau de la réponse macroscopique (i.e., la contrainte appliquée sur les parois) dans le cas de la MED repose sur deux hypothèses qui mettent en jeu l'influence des cellules de Voronoï par le modèle de contact et le nombre réduit de particules dans l'empilement. Pour des empilements avec une taille aussi petite, on s'aperçoit que la cellule de Voronoï initiale est trop volumineuse (i.e., elle est de forme cubique au lieu d'avoir une forme proche de celle de la sphère) (voir FIG. 3.13-D). Le volume important de la cellule fait varier le troisième terme de la loi de contact normal qui est fonction du volume de la cellule de Voronoï. Donc en fonction du placement des 32 sphères l'une par rapport à l'autre et surtout par rapport aux parois, certaines cellules de Voronoï peuvent être initialement très volumineuses et influencer sur la réponse macroscopique. Une hypothèse

qui se confirme en se reportant aux figures 3.16B-D, où les courbes réponses issues de la compression des six empilements diffèrent pour les valeurs élevées de compacité (compacité supérieure à 0,75); des valeurs qui représentent la zone où le dernier terme de la loi de contact qui est fonction du volume des cellules de Voronoï. Ainsi ce terme a une influence majeure. L'autre phénomène qui peut engendrer une variation de la réponse d'un empilement à l'autre est le mouvement des corps rigides au sein d'un empilement relativement petit. Les 32 sphères rendent la réponse (contrainte-compacité) dépendante des différents bruits parasites (i.e., les différents déplacements, les petites vibrations des sphères,...) générés par les 32 corps rigides.

Pour autant, la variation de la réponse présente à chaque graphe de la figure 3.16 semble raisonnable, surtout si on relativise cet écart par rapport aux variations obtenues expérimentalement. Ces fluctuations peuvent être dues aux différents jeux mécaniques présents dans la presse mécanique et à l'erreur admise des capteurs [Frachon (2002)].

Dans la suite de la démarche de validation du modèle de contact entreprise depuis le début de ce chapitre, on procède aux mêmes simulations conduites précédemment sur l'empilement de 32 sphères avec cette fois-ci une variation des caractéristiques matériaux. En plus des paramètres matériaux (k et n) qui vont changer à chaque simulation, un coefficient de frottement constant d'une valeur de 0,1 est intégré entre les sphères et entre les sphères et les parois pour chacune des simulations à venir. De l'étude comparative de ces nouveaux cas, nous attendons à ce que la validation du modèle de contact pour lequel nous avons opté au chapitre 2 (voir Sec. 2.3.1) soit validée. Le fait d'intégrer du frottement dans les simulations va obligatoirement donner une influence sur le résultat des simulations à la raideur tangentielle du modèle de contact. Ainsi en procédant à des simulations de compression isostatique et en matrice avec frottement pour différents matériaux, on est assuré qu'au cours des simulations toutes les composantes du modèle de contact (i.e., loi de contact pour la charge, pour la décharge et pour le déplacement relatif tangentiel) influenceront le résultat de la simulation. Si ce résultat est en accord avec celui généré par la simulation faite sous le logiciel ABAQUS, le modèle de contact sera validé pour les compressions jusqu'à des valeurs élevées de la compacité.

Dans le cadre de cette nouvelle configuration, des simulations de compression en matrice sur quatre matériaux différents sont réalisées. L'objectif est de montrer que le modèle de contact implanté dans le code Yade reproduit à moindre coût le même comportement que celui observé dans les simulations éléments finis pour des paramètres autres que ceux du plomb sans frottement. Les résultats des quatre simulations réalisées par les deux méthodes numériques sont récapitulés à la figure 3.17, où chaque graphe représente un matériau différent. Dans chaque graphe, l'évolution de la pression dans les trois directions principales en fonction de la compacité est tracée. Les simulations de compression sont toutes menées à une compacité finale d'une valeur égale à 0,95, cette valeur a été choisie en sachant que les presses qui peuvent atteindre des valeurs plus élevées sont peu courantes dans l'industrie.

Concernant les résultats, les simulations reproduisent parfaitement les courbes réalisées par la méthode de référence MEFMP. Un léger décrochement de la valeur de la pression dans la direction axiale sur chaque graphe pour une compacité égale à 0,7 est observé. Ce phénomène de décrochement est présent pour une même valeur de compacité sur les quatre graphes, or leur seul point commun est l'empilement initial. On peut donc supposer que ce léger défaut est induit par la configuration initiale du milieu granulaire. Pour enlever cet artefact, il faudrait passer à un empilement de sphères plus important ce qui augmenterait de façon exponentielle le temps de calcul pour la MEFMP. L'autre

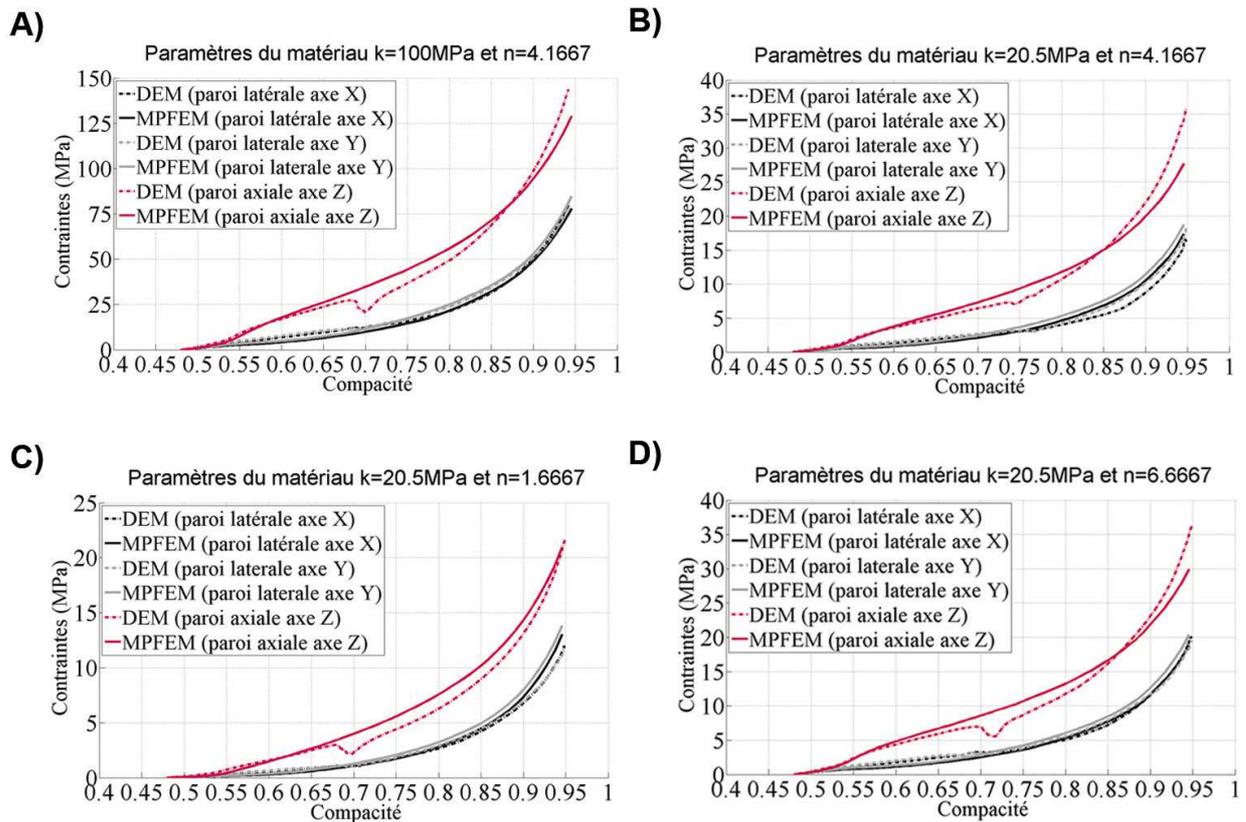


FIG. 3.17 – L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression en matrice. Cette modélisation est effectuée avec les deux méthodes numériques sur un empilement de 32 sphères qui a des propriétés matériaux qui vont changer pour les quatre essais.

possibilité est de prendre un empilement initial de 32 sphères de plomb différent uniquement pour les simulations avec la MED.

A la figure 3.18, on représente les essais de compression en matrice réalisés sur les quatre matériaux à partir d'un autre empilement de 32 sphères. La comparaison avec la MEFMP ne peut plus avoir le même intérêt dès lors que l'on procède à un changement d'empilement uniquement pour une des deux méthodes de calcul. Mais ce changement a pour unique objectif de montrer l'influence de l'empilement initial dans le cas de la MED pour un petit nombre de sphères. Donc, si on compare les résultats issus de la MED dans les graphes sur les deux figures 3.17 et 3.18, on s'aperçoit que le changement d'empilement a créé une différence au niveau des courbes puisque les quatre courbes issues de la MED à la figure 3.18 ne comportent pas de décrochement. Ce résultat montre encore une fois la sensibilité des calculs éléments discrets à la configuration initiale de l'empilement, lorsque celui-ci ne contient qu'un nombre de sphères trop peu représentatif d'un milieu granulaire.

Pour ce qui est du calcul de compression isotrope, il est fait uniquement sur deux matériaux. Lors des calculs précédents, on s'est aperçu que pour ce type de chargement, le modèle de contact utilisé présente une grande stabilité et efficacité. Cette hypothèse est confirmée avec les deux graphes (A et B) présents à la figure 3.19, où la réponse générée par les simulations aux éléments discrets est effectivement identique à la réponse des simulations éléments finis MEFMP.

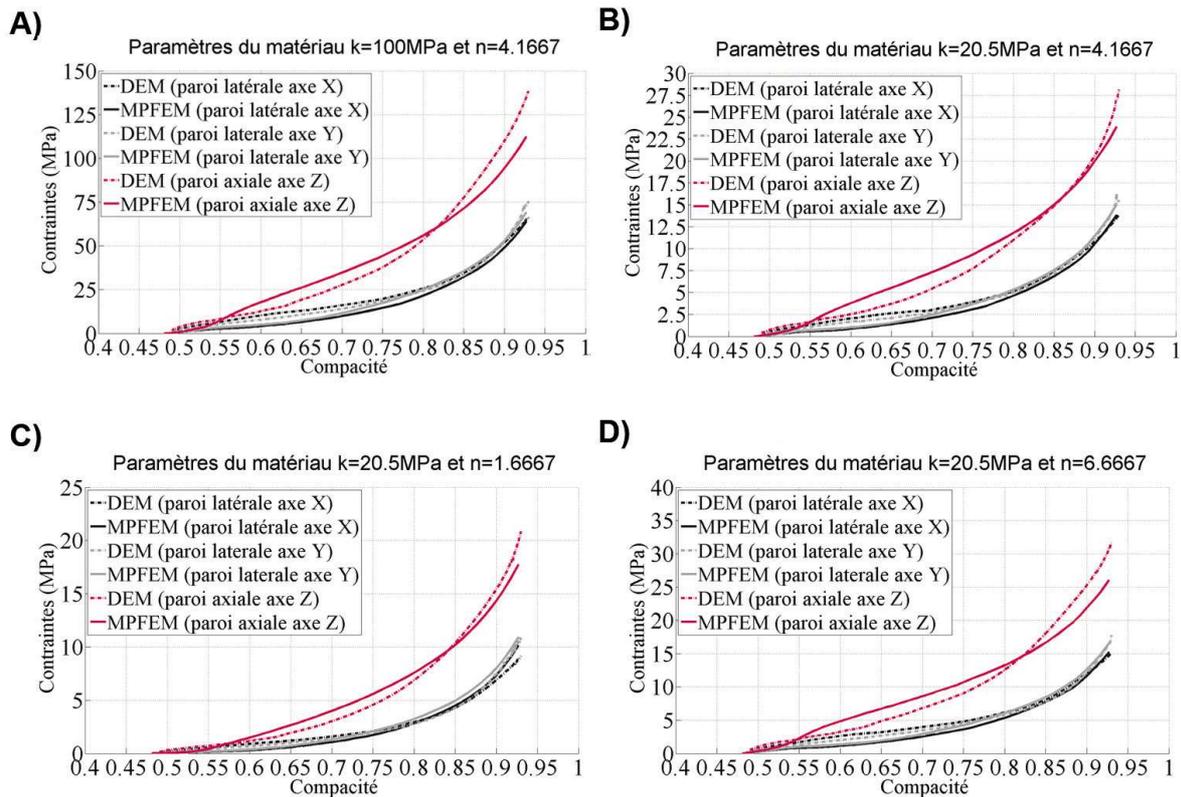


FIG. 3.18 – L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression en matrice. Cette modélisation est effectuée sur un empilement de 32 sphères différent pour les deux méthodes numériques.

Dans cette section relative à la validation du modèle de contact employé dans les simulations aux éléments discrets, la conclusion est que ce modèle est adapté pour réaliser les simulations de compression de poudres jusqu'à des valeurs élevées de compacité. En fonction des comparaisons réalisées avec succès entre les résultats issus de la MED et ceux issus de la MEFMP, on ne peut qu'approuver ce modèle qui produit une réponse similaire à celle donnée par la méthode éléments finis multi-particules avec un gain en temps de calcul qui comble toutes nos attentes. Peut être que le seul bémol à porter à l'encontre du modèle développé est que pour le moment il n'a pas été validé pour d'autres chemins de chargement autres que la compression isotrope et en matrice. Mais ceci n'empêchera pas de passer à une confrontation avec les résultats expérimentaux; c'est là une étape importante dans la détermination du degré de robustesse des simulations. En augmentant le nombre de sphères dans l'empilement et en comparant les résultats obtenus à des résultats expérimentaux identifiés dans la littérature, on sera fixé sur le potentiel de la méthode des éléments discrets avec ce nouveau modèle de contact à reproduire le comportement réel de la poudre au cours de la phase de compression. Mais avant ce nouveau type de comparaison, on étudiera l'influence de la raideur tangentielle intégrée dans le modèle de contact sur les résultats de simulation.

3.3.3 Sensibilité à la valeur de la raideur tangentielle

Toujours dans le but de valider le modèle de contact utilisé, une étude de l'influence de la raideur tangentielle (kt) sur la réponse d'un empilement au cours de la compression est réalisée. Dans

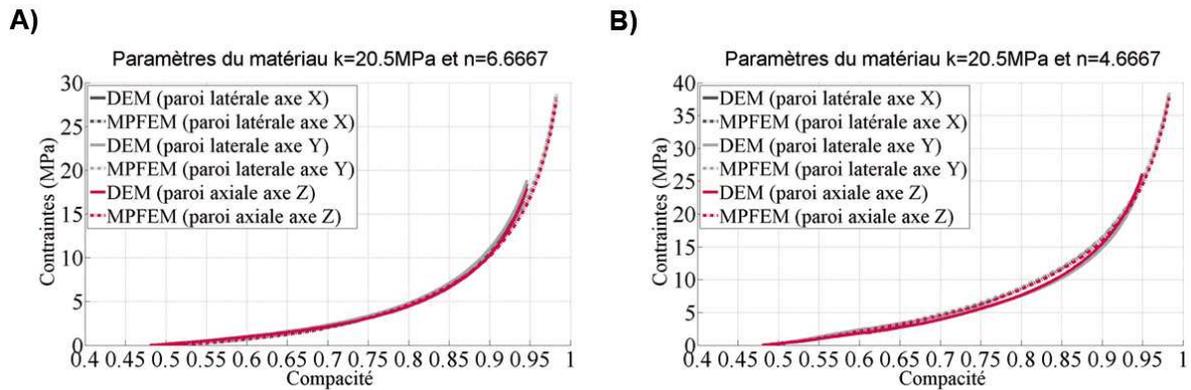


FIG. 3.19 – L'évolution de la pression appliquée sur les parois dans les trois directions en fonction de la compacité, dans le cadre d'une simulation de compression isostatique. Cette modélisation est effectuée avec les deux méthodes numériques sur un empilement de 32 sphères qui a des propriétés matériaux qui vont changer pour les deux essais.

les calculs précédents, la valeur de kt a été prise égale à 0,5 fois la raideur normale (kn) (voir Sec. 2.3). Le choix de prendre cette valeur a été fait au cours de la thèse en accord avec les simulations éléments finis, en sachant que généralement la valeur de kt est comprise entre 0 et 1 fois kn [Hentz (2003)]. La valeur de la raideur tangentielle influence la réponse globale de l'empilement de sphères lors de la compression. Pour le démontrer, des simulations de compression en matrice avec frottement (angle de frottement égale à 25°) pour un assemblage de 400 sphères de plomb sont effectuées avec des valeurs de la raideur tangentielle qui sont constantes (0 , kn_{max}) ou qui varient ($0,05 \times kn$, $0,2 \times kn$, $0,8 \times kn$) au cours de la densification (voir FIG. 3.20). Pour les valeurs constantes de kt , on a choisi une valeur nulle et la valeur de rigidité maximale du matériau (voir Sec. 2.3.1) afin d'avoir la limite basse et haute des valeurs possibles que la variable kt peut prendre.

Outre l'évolution de la contrainte dans les trois directions, les différentes réponses issues des cinq simulations sont tracées dans le plan p-q, afin de mieux visualiser la divergence des réponses qui s'accroît tout au long de la simulation.

Sur le graphe 3.20-D, on peut observer la plage importante de réponses possibles en fonction de la valeur de kt . La limite haute et basse de cet intervalle est donnée respectivement pour une valeur de kt égale à kn_{max} (voir Sec. 2.3) et 0. Ainsi la valeur de la raideur tangentielle a un rôle prédominant sur la réponse globale, dès lors que l'essai n'est pas isotrope et qu'il y a du frottement entre les particules et entre les particules et les parois. Le fait que notre modèle de contact donne des réponses équivalentes aux simulations éléments finis montre que la valeur de la raideur tangentielle est bien calibrée au sein du modèle.

Toujours dans l'optique de convaincre de la validité du modèle de contact, on le confrontera à des données expérimentales obtenues à partir de poudres réelles dès la prochaine section.

3.3.4 Comparaison entre la DEM et des résultats expérimentaux

Au sein de la littérature, il existe un certain nombre d'articles qui relatent de nombreux résultats expérimentaux réalisés sur des poudres réelles à partir d'une cellule triaxiale. Mais plus rares sont ceux qui associent aux résultats expérimentaux des données sur les paramètres matériaux. Eu égard

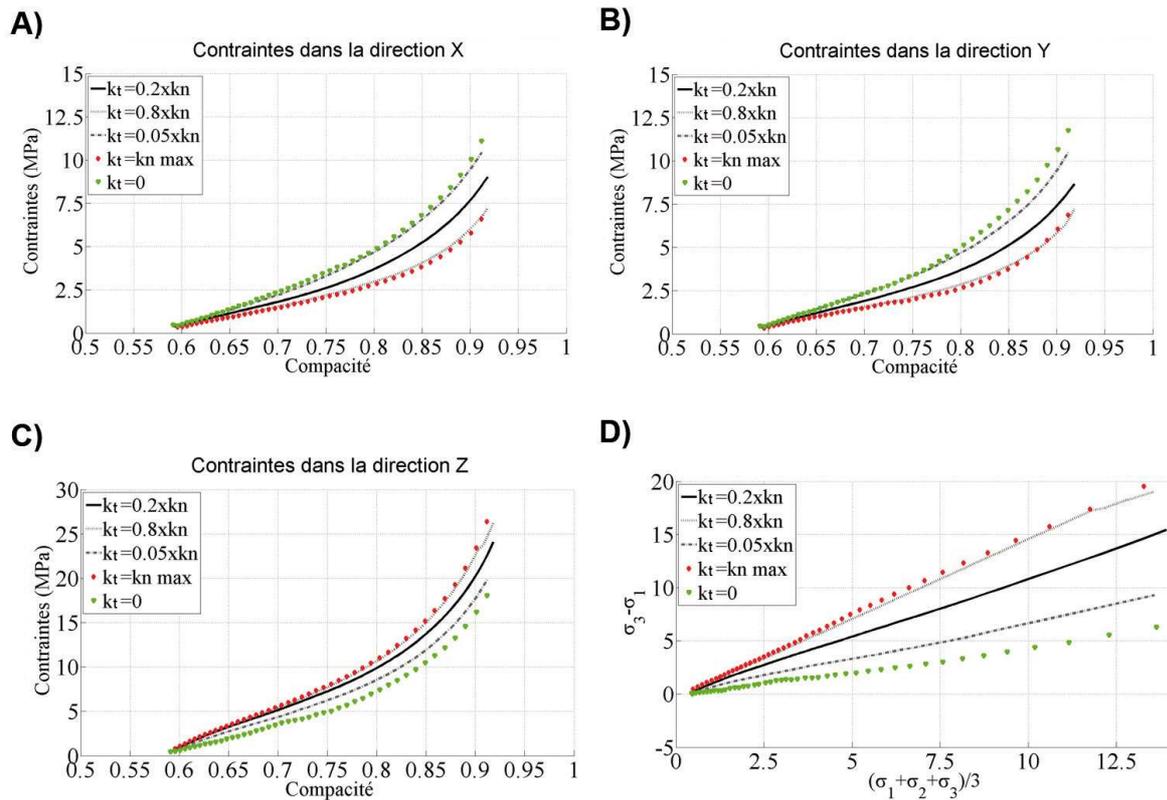


FIG. 3.20 – Réponses en fonction des différentes valeurs de la raideur tangentielle à la compression en matrice d'un assemblage de 400 sphères de plomb avec un angle de frottement entre les particules et entre les particules et les parois égale à 25° . A) Evolution de la contrainte dans la direction X en fonction de la compacité. B) Evolution de la contrainte dans la direction Y en fonction de la compacité. C) Evolution de la contrainte dans la direction Z en fonction de la compacité. D) Représentation des différentes réponses dans le plan p-q.

aux contraintes temporelles inhérentes à la durée de nos travaux, il n'était pas envisageable de caractériser les paramètres matériaux de différentes poudres, puis de réaliser des essais expérimentaux de compression sur ces mêmes poudres. Nous avons alors persévéré dans les recherches bibliographiques pour trouver quelques articles et des thèses qui nous apportent les informations sur les résultats des essais et sur le matériau (k , n , coefficient de frottement, forme des grains, ...) pour calibrer le modèle de contact. Les poudres documentées sont des poudres d'aluminium pur, de cuivre pur et de fer (Distaloy AE). Dans le cas des deux premières poudres, le mélange de particules de forme sphérique est uniquement composé de matériau pur (voir Fig. 3.21-A et Fig. 3.21-C). Ces poudres de cuivre et d'aluminium ne ressemblent en rien à la poudre de fer, la poudre de fer étant composée de particules de forme dendritique et d'additifs (voir Fig. 3.21-B).

Les courbes sélectionnées dans la littérature concernent l'évolution de la pression appliquée sur les parois latérales et axiales de la cellule triaxiale de révolution en fonction de la compacité pour des cas de compression isotrope et en matrice. L'idée est de comparer la réponse numérique donnée par la méthode des éléments discrets avec les courbes issues de l'expérience. Toutes les données nécessaires à la comparaison et à la calibration du modèle de contact ont été trouvées dans les travaux de Sridhar et al. [Sridhar et Fleck (2000)], Martin et al., [Martin *et al.* (2003)], Akisanya et al., [Akisanya *et al.* (1997)], Ludwig [Schneider (2003)] et Chen [Chen (2008)].

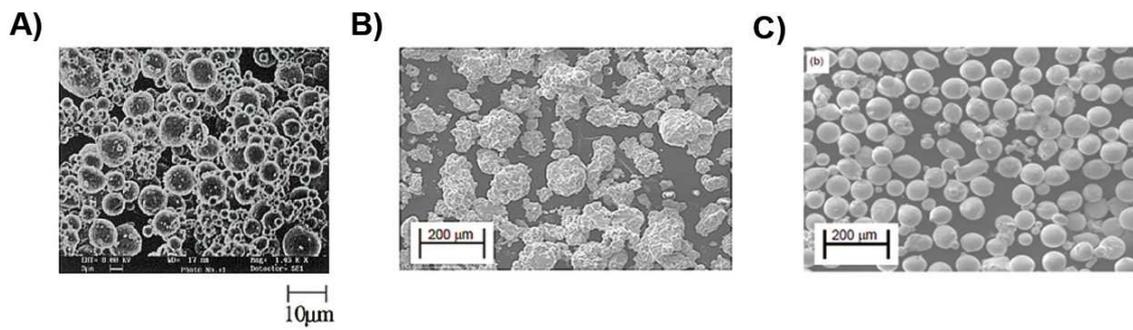


FIG. 3.21 – Images des particules de poudres. A) l'aluminium. B) la distaloy AE. C) le cuivre.

Pour une meilleure lisibilité de toutes ces données sur les matériaux, elles sont récapitulées dans le tableau 3.5:

TAB. 3.5 – Propriétés matériaux des différentes poudres.

Poudres \ Propriétés	Distaloy AE	Cuivre	Aluminium
k (MPa)	500	500	146
n	2,94	2,8	4,2
Angle de frottement (Φ_c)	28	32	21
Module d'Young (GPa)	200	130	70
Coefficient de Poisson (ν)	0,3	0,34	0,35
Densité (g/cm^3)	7,33	8,9	2,3
Taille des particules (μm)	25-75	4,5-7	105-125

Le montage expérimental élaboré pour procéder à la compression isostatique et en matrice des poudres n'est pas détaillé dans ce manuscrit. Le détail de ce dispositif est présent dans chaque référence bibliographique [Sridhar et Fleck (2000), Martin *et al.* (2003), Akisanya *et al.* (1997), Schneider (2003) et Chen (2008)], où les paramètres matériaux et les courbes réponses ont été collectés. Concernant les simulations, les différents aspects numériques mis en place pour les réaliser seront explicités. Il est évident que la simulation numérique et l'expérience ne peuvent pas être similaires du point de vue du nombre de particules présents dans l'échantillon. Pour des raisons de temps de calculs, le nombre de particules est limité tout en s'assurant que l'échantillon soit assez représentatif du milieu granulaire. Pour respecter ce critère, chaque simulation va être réalisée à partir d'empilements différents (100 sphères, 400 sphères, 800 sphères, 1.000 sphères) (voir FIG. 3.23). Ces tailles différentes d'empilements permettront de voir la variation de la réponse d'un assemblage à un autre et d'évaluer si nos simulations ont un comportement représentatif (voir le chapitre 2). Les différents empilements numériques sont composés de sphères de taille unique dans un cube de $1 \times 1 \times 1$. Ils sont obtenus à l'aide d'un algorithme génération par grossissement intégré dans le logiciel Yade. Le choix d'empilements monodisperses est justifié par la faible distribution de taille des particules dans la plupart des échantillons expérimentaux.

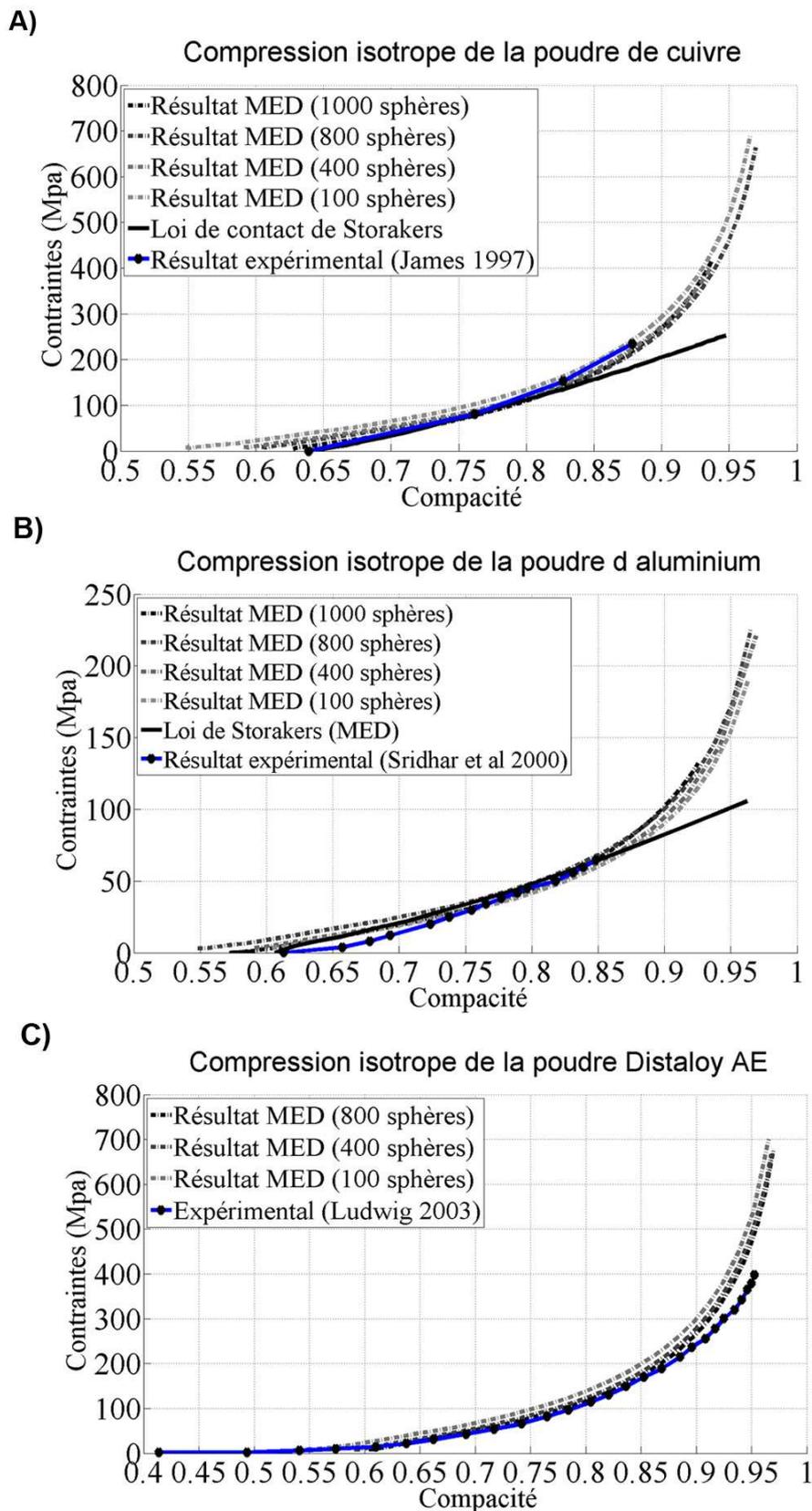


FIG. 3.22 – Courbes de compression isotrope sur des poudres réelles, des résultats issus de l'expérience ou de la simulation sur différents empilements de sphères.

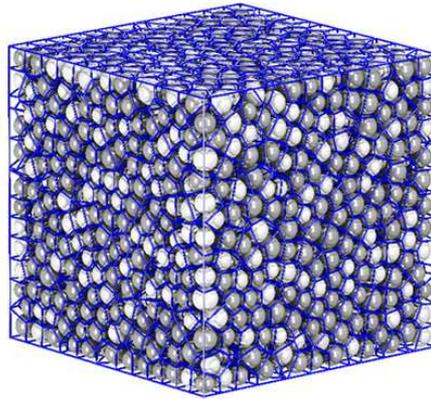


FIG. 3.23 – Empilement de 1.000 sphères de même taille avec les cellules de Voronoï associées. Cet empilement est utilisé dans les simulations aux éléments discrets.

Les premières simulations concernent respectivement la compression isostatique sur la poudre de cuivre, puis d'aluminium et de fer pour finir. A ce jour, seul le modèle développé par Fleck a été confronté à des résultats expérimentaux sur autant de poudres différentes et pour différents types de sollicitation. La part de risque est importante, car les forces de cohésion, de Van der Waals et la forme géométrique des particules peuvent influencer très fortement le comportement des particules de poudre (voir FIG. 3.21) lors de la densification. Un facteur d'influence trop important peut mettre en défaut la simulation numérique pour les trois matériaux.

Concernant les poudres à particules sphériques comme la poudre de cuivre et d'aluminium, on peut voir sur les graphes 3.22A-B que les courbes réponses générées par la simulation pour différents empilements prédisent parfaitement le comportement de la poudre observé expérimentalement. On note toutefois une légère divergence entre les quatre empilements de sphères, mais dans l'ensemble cette différence est si faible que l'on peut parfaitement représenter le comportement de la poudre en compression isostatique à partir d'un empilement de 400 sphères.

La même simulation de compression isostatique sur la poudre d'aluminium et de cuivre est réalisée à partir de la loi de contact de Storåkers. La courbe réponse obtenue pour les deux poudres est tracée en trait continu noir sur chacun des deux graphes 3.22A-B. De la comparaison avec le modèle de Storåkers, on constate clairement que la courbe de réponse issue de la loi de contact de Storåkers diverge des autres courbes à partir des valeurs élevées de compacité (compacité supérieure à 0,85). Prenant l'allure d'une droite, la réponse du modèle de Storåkers surestime la valeur de la contrainte dès le début de la simulation. Puis au cours de la compression, cette droite recoupe les autres courbes à une compacité égale à 0,85 (voir en détail la figure 3.22-B) pour finalement sous-estimer la valeur des contraintes à haute compacité.

Donc à partir des simulations réalisées, on constate que le nouveau modèle de contact est adapté pour reproduire le comportement des poudres de formes sphérique à des valeurs élevées de compacité. De plus, on s'aperçoit que le modèle utilisé est capable de reproduire plus fidèlement la réponse expérimentale que le modèle développé par Storåkers pour des valeurs de compacité égales à 0,85.

Par la suite une simulation de compression isotrope d'une poudre de fer avec additifs (Distaloy

AE) est réalisée. La courbe réponse expérimentale référencée dans la thèse de Ludwig [Schneider (2003)], nous intéresse d'autant plus que l'expérience a été menée jusqu'à une compacité finale égale à 0,95. On peut ainsi clairement observer la partie où les niveaux de contraintes évoluent de manière exponentielle à cause de l'incompressibilité des particules de poudre. Les différents paramètres matériaux nécessaires à calibrer notre modèle de contact sont tirés de la thèse de Chen qui a obtenu ces valeurs par la rhéologie inverse [Chen (2008)].

Une fois les différents paramètres matériaux intégrés dans le code de calcul Yade, on procède à la simulation de compression isotrope sur trois empilements monodisperses de fer (100 sphères, 400 sphères, 800 sphères) jusqu'à une compacité finale égale à 0,97. Sur le graphe 3.22-C, on observe que les différents résultats numériques obtenus se superposent à la réponse expérimentale. On voit aussi très nettement que les résultats numériques suivent parfaitement la courbure de la réponse expérimentale tout au long de l'essai.

Un phénomène tout aussi intéressant est à souligner dans ce dernier cas d'étude: c'est la modélisation des particules de forme dendritique avec des particules sphériques dans le cas d'une compression isostatique. Les réponses quasi-similaires entre l'expérience et le numérique peuvent sembler étonnantes. L'explication tient tout simplement dans le type d'essai auquel on a procédé. En effet, dans le cas d'un chargement isotrope la forme des particules n'a quasiment aucune influence sur la réponse macroscopique, car le déplacement relatif tangentiel entre les particules est inexistant. Les particules se compriment par indentation dans la direction normale du contact sans aucun effort de cisaillement. Ce phénomène explique pourquoi la représentation d'un empilement de poudre de fer par un assemblage de sphères en contact est possible dans le cas d'un chargement parfaitement isostatique.

Pour savoir si ce raisonnement a un véritable fondement, les simulations de compression en matrice sont réalisées sur des poudres d'aluminium et de fer. Il s'agit en l'occurrence de poudres qui ont des caractéristiques mécaniques et de formes tout à fait différentes.

Les graphes 3.24A-B représentent respectivement les résultats expérimentaux et de simulation avec quatre empilements différents de sphères pour la poudre d'aluminium. La contrainte appliquée sur les parois axiales (voir Fig. 3.24-A) et latérales (voir Fig. 3.24-B) est représentée sur deux graphiques pour une meilleure lecture des courbes. On peut regretter que ces courbes tirées des travaux de Sridhar et al., [Sridhar et Fleck (2000)] n'atteignent pas des valeurs de compacité supérieures à 0,8. Par comparaison entre l'expérience et les résultats de la simulation, on conclut que le comportement de la poudre d'aluminium pour un chargement en matrice est correctement modélisé par notre modèle.

Cette conclusion ne s'applique pas à la poudre Distaloy AE comprimée en matrice. En effet, le graphe représenté à la figure 3.24-C montre clairement que le modèle ne peut reproduire le comportement d'une poudre composée de grains non sphériques. La réponse obtenue de la simulation avec 400 sphères sous-estime très nettement la valeur de la contrainte appliquée sur les parois axiales et latérales. Ce résultat renforce notre opinion concernant la fiabilité et la robustesse du modèle de contact et le caractère prédictif des simulations réalisées dans le cadre de ce travail. En effet pour un tel chargement, l'influence de la forme des particules est prédominante sur le résultat. La forme dendritique des particules bloque en rotation les particules et empêche tout réarrangement des grains ce qui tend à augmenter la valeur de la contrainte appliquée sur les parois. Ce phénomène physique ne peut être reproduit avec le modèle utilisé.

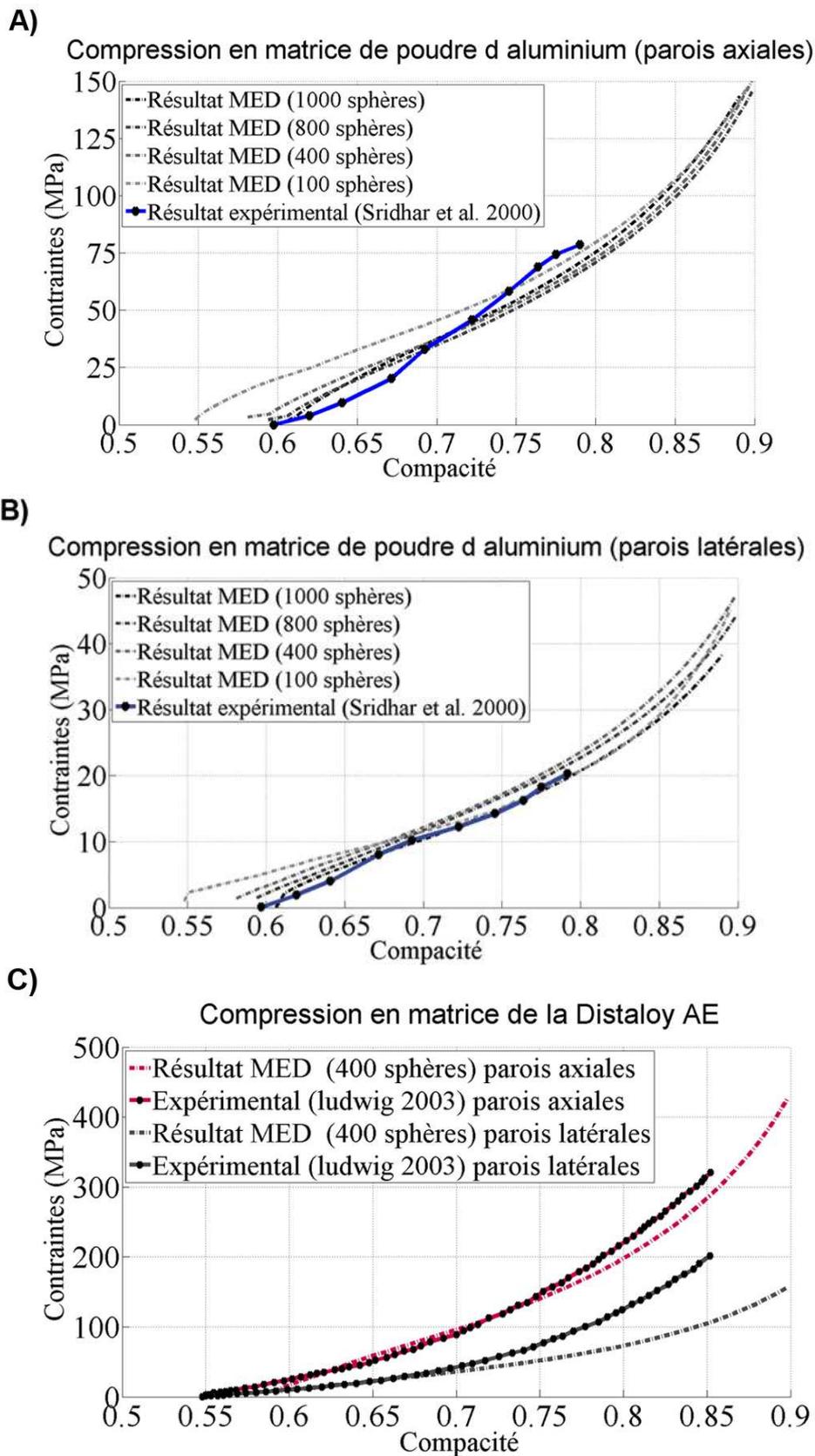


FIG. 3.24 – Courbes de compression en matrice sur des poudres réelles, des résultats issus de l'expérience ou de la simulation sur différents empilements de sphères.

A titre informatif, on peut toutefois indiquer que la modélisation du comportement des poudres comme la poudre de fer par un empilement de sphères n'est pas systématiquement vouée à l'échec. L'influence de la forme des particules peut être reproduite en imposant une valeur de frottement plus élevée entre les sphères et en intégrant un couple résistant à chaque particule [Plassiard (2007)]. Un tel travail est possible avec la méthode des éléments discrets, mais il demande une base de données de résultats expérimentaux importante sur un type de poudre, afin de calibrer et de valider les nouvelles variables qui vont être intégrées dans le modèle de contact.

Pour clore cette partie, on peut affirmer que le modèle de contact proposé pour les simulations discrètes de compression de poudre est valide et qu'il a montré sa robustesse; ceci à travers les diverses comparaisons avec des résultats issus de l'expérience et de la méthode des éléments finis multi-particules. Ce premier élément revêt une importance capitale pour la suite de nos travaux. En l'état, le potentiel de ce modèle est indéniable et permet de faire passer les simulations à une étape supérieure qui est l'étude et la prédiction du comportement de la poudre sous fortes sollicitations mécaniques. A partir de là, le nouvel objectif est d'observer l'évolution d'une microstructure de poudre lors de la densification par de fortes valeurs de pression. Tout comme les autres chercheurs qui utilisent l'outil numérique pour l'étude des différentes phases de la métallurgie des poudres (voir Sec. 1.7.2), on procédera dès la prochaine section par le modèle validé à une étude de la compression en matrice de la poudre d'aluminium.

3.4 Compression en matrice d'un empilement avec une distribution de la compacité non homogène

L'intérêt d'avoir un modèle de contact valide pour les simulations de compression jusqu'à des valeurs élevées de compacité est de pouvoir procéder, par le seul biais de la simulation numérique, à certaines études qui sont plus difficiles et plus coûteuses à réaliser expérimentalement et voire même inaccessibles. Dans cette section, l'évolution et le comportement d'un tas de poudre d'aluminium avec une distribution de la compacité vont être étudiés. Les simulations aux éléments discrets menées sur des configurations initiales réalistes ont été faites uniquement pour la phase de remplissage et de transfert (voir Sec. 1.4). L'objectif de cette dernière section est de s'inspirer de cette démarche pour réaliser en 3D la description de la phase de compression en matrice de poudre par l'outil numérique. Pour cela dans un premier temps est créé un empilement de sphères avec un gradient de compacité équivalent à celui rencontré au sein de la matrice avant la phase de compression (voir Sec. 1.4). Cet empilement de sphères avec des propriétés similaires à celles de la poudre réelle est généré par l'algorithme géométrique avec un ratio de taille égal à 2. Le gradient de compacité inséré dans l'empilement est dans la direction de l'axe X et il varie de 0,45 à 0,6 (voir Fig. 3.25). Une fois l'empilement disponible, un chargement en matrice est appliqué sur celui-ci jusqu'à une compacité de 0,93, afin de savoir comment évolue le gradient de densité au cours de la compression. On note que le chargement est réalisé par le déplacement imposé des deux parois qui sont perpendiculaires à l'axe Z (voir Fig. 3.25) et que les paramètres matériaux intégrés dans le modèle de contact sont ceux utilisés dans la section précédente pour modéliser le comportement de la poudre d'aluminium.

A la figure 3.25-A, l'empilement initial est représenté avec un gradient de compacité unidirectionnel. Pour bien visualiser ce gradient, la densité locale (ρ_{local}) (voir Eq. 3.1) de chaque sphère, calculée à partir des cellules de Voronoï, est représentée par un code de couleur dans une vue en coupe de l'empilement (voir Fig. 3.25-B). Le plan de coupe est défini comme un plan parallèle à l'axe X qui est positionné dans l'empilement sur l'axe Y. Cette vue en coupe est nécessaire pour voir le

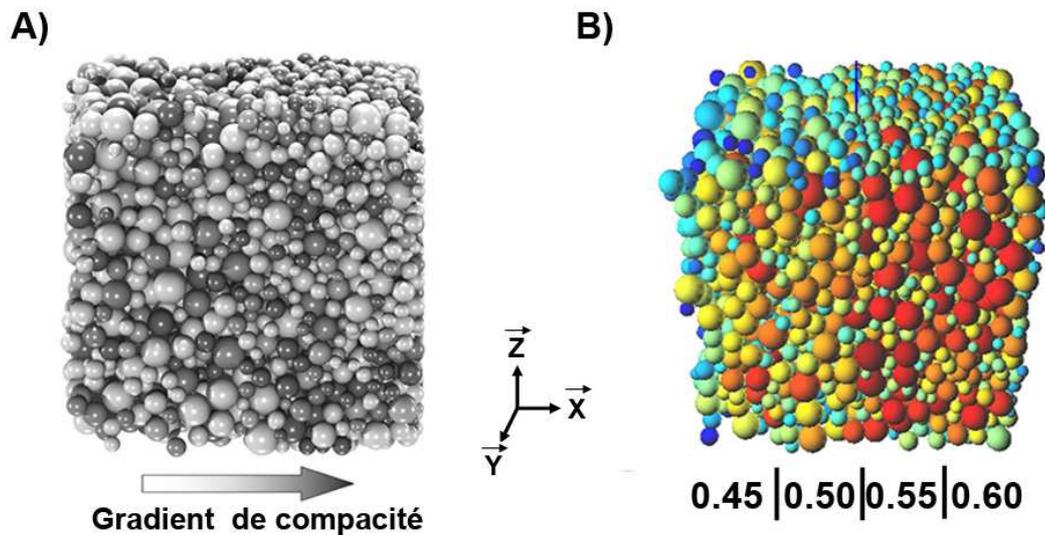


FIG. 3.25 – Empilement initial avec un gradient de compacité généré dans un cube ($1 \times 1 \times 1$). A) L'empilement initial composé de 5000 sphères (ratio de taille égal à 2). B) Coupe de l'empilement initial où le code de couleur représente la densité locale des sphères (la section est réalisée à partir du logiciel Mgpost développée par Richefeu).

gradient de compacité, puisque les sphères positionnées proches des parois, ayant une densité locale plus faible, car les cellules de Voronoï associées sont plus volumineuses que celles présentes au centre de l'empilement. Sur la figure 3.25-B, les sphères de couleur rouge, très majoritairement positionnées du côté droit de l'empilement, représentent la partie de l'empilement où la valeur de la compacité est la plus élevée.

$$\text{densité locale} = \frac{V_{\text{sphère}}}{V_{\text{cellule}}} \quad (3.1)$$

En ce qui concerne la réalisation du gradient, quatre zones sont définies au sein de l'empilement et l'algorithme géométrique est programmé pour les remplir avec une valeur de compacité fixée. Ainsi ces quatre zones auront des valeurs de compacité qui vont s'échelonner de 0,45 à 0,6 (voir FIG. 3.25-B). Les valeurs limites de compacité ont été fixées en fonction des valeurs de compacité rencontrées dans les poudres les plus lâches et en fonction de la compacité du random close packing (voir Sec. 2.5). L'algorithme géométrique peut générer des empilements avec des valeurs de compacité encore plus extrêmes, mais ce cas n'a pas été envisagé afin de garder un certain réalisme.

L'intérêt de visualiser l'évolution de la densité locale au cours de la simulation est de savoir si la compression à de fortes pressions tend à annihiler le gradient initial de compacité. L'autre intérêt de cette simulation est de savoir également si il existe en fin de compression, un grand écart entre les valeurs extrêmes de la densité locale. Si on examine la figure 3.26-B qui représente la densité locale de chaque sphère à la fin de la compression (compacité égale à 0,93), on s'aperçoit visuellement que le gradient de compacité est nettement moins marqué. En effet, si on calcule la valeur finale de la compacité dans chaque zone avec la sphère de mesure, on constate une harmonisation de la compacité. Les valeurs de la compacité des quatre zones sont donc du même ordre de grandeur en fin de compression, mais on peut aussi voir qu'un léger gradient de compacité subsiste. Initialement le gradient de compacité est créé avec un écart ΔC égale à 0,153; à la fin de la compression cet écart se

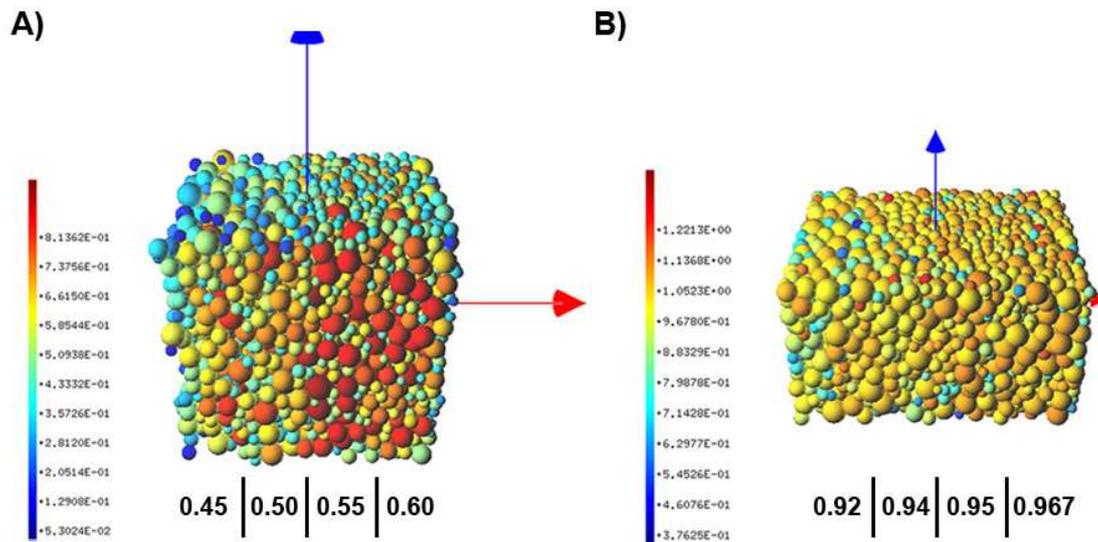


FIG. 3.26 – L'évolution de la densité locale pour chaque sphère dans le cas d'une compression en matrice. A) L'empilement initial. B) L'empilement à une compacité de 0,93.

réduit à 0,0472 (voir FIG. 3.26).

Concernant les valeurs extrêmes de la densité locale, on a une valeur minimale de 0,3 et une valeur maximale de 1,2 en fin de compression, alors qu'initialement ces valeurs sont comprises entre 0,05 et 0,8. On peut voir que l'écart entre les valeurs extrêmes de la densité locale se réduit de façon conséquente, mais grâce à cette visualisation à l'échelle des particules, on s'aperçoit également que les grosses particules ont en moyenne une densité locale plus forte. En effet, ces grosses particules ont une densité locale égale et même supérieure à 1, ce résultat montre bien que ces particules sont beaucoup déformées dans le milieu granulaire polydisperse lors de la compression et peut favoriser l'apparition d'un réseau de contacts forts entre les grosses particules [Martin et Bouvard (2004), Vovret *et al.* (2009)]. Le paramètre de densité locale comme il est exprimé dans cette thèse est similaire à une compacité locale. Le fait que ces grosses particules aient une densité locale supérieure à 1 est possible, car les interpénétrations entre les particules peuvent atteindre des valeurs proches de 0,4 fois le rayon de la particule (voir Sec. 1.8), induisant un volume de cellules de Voronoï beaucoup plus petit que le volume de la sphère. Du point de vue mécanique, une densité locale supérieure à 1 se traduit par une forte déformation de la particule et implique le fait qu'une partie de la matière s'est transportée au voisinage de la sphère. Il est donc légitime de penser que le nombre de coordination en fin de compression est plus élevé que dans un cas monodisperse et que la cohésion est plus importante au sein du corps à vert, car les blocages mécaniques inter-granulaires sont plus nombreux.

Au vu de ce premier résultat, on peut faire l'hypothèse que la compression induit au fur et à mesure une forte atténuation du gradient de compacité dans l'empilement, d'où l'intérêt de comprimer la poudre à des valeurs élevées de compacité. Afin de savoir par le biais de quel mécanisme est réalisée cette atténuation du gradient de la compacité au cours de la densification, on va continuer notre étude en effectuant d'autres types de post-traitements.

Aux figures 3.27A-B, l'empilement de sphères en phase initiale et en fin de compression est représenté avec un code de couleur qui représente l'amplitude du déplacement des sphères unique-

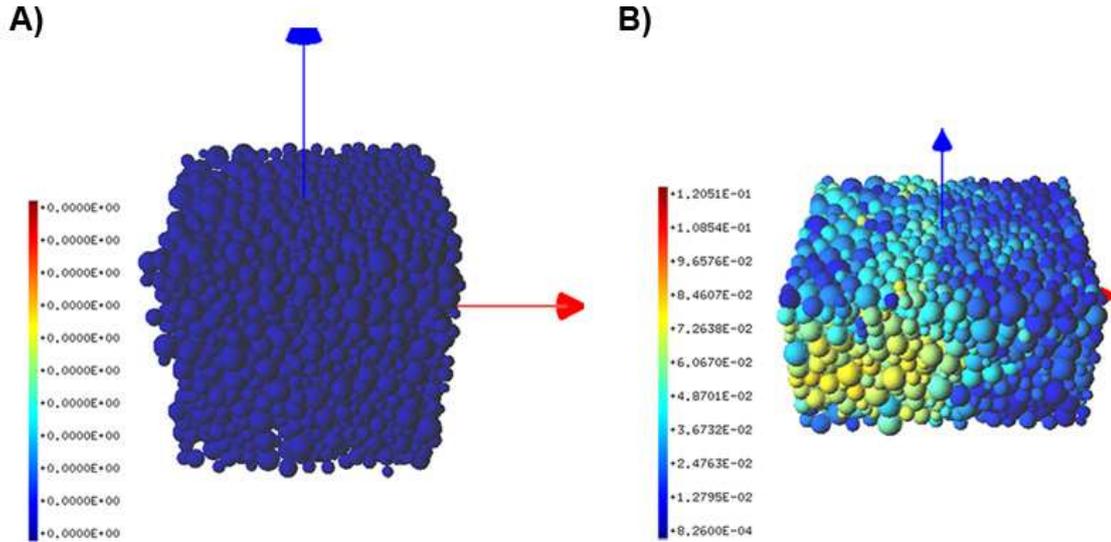


FIG. 3.27 – L'évolution de l'amplitude de déplacement de chaque sphère dans le plan XOY au cours de la compression en matrice. A) L'empilement initial. B) L'empilement à une compacité de 0,93. La valeur de la compacité dans chaque zone est une moyenne de six valeurs.

ment dans le plan XOY. Pour réaliser cette représentation, la distance parcourue par la sphère dans le plan XOY au cours de la compression est calculée et la valeur est affichée par un code de couleur aux figures 3.27A-B. Cette représentation du réarrangement des sphères montre clairement que la partie de l'empilement avec une faible compacité subit un fort réarrangement localisé dans l'empilement. Les amplitudes de déplacement atteignent des valeurs supérieures au dixième d'une arête du cube ($1 \times 1 \times 1$). Tandis que les sphères positionnées dans l'autre partie plus dense de l'empilement ne bougent quasiment pas (déplacement de l'ordre de 10^{-4} fois l'arête du cube). Avec l'analyse des différentes sauvegardes réalisées au cours de la simulation, nous pouvons affirmer que les plus fortes amplitudes de déplacement associées au réarrangement granulaire interviennent très tôt dans la densification. Pour autant, ces valeurs de déplacement continuent à croître faiblement jusqu'à la fin de la simulation. Ce phénomène contribue sans nul doute possible à atténuer le gradient de compacité initialement présent.

La déformation volumique de chaque sphère est un autre paramètre physique qu'il est intéressant d'observer et de représenter. Cette déformation se calcule avec la formule suivante:

$$\epsilon_v = \ln\left(\frac{V_i}{V_{0i}}\right) \quad (3.2)$$

Avec V_i qui représente le volume d'une cellule de Voronoï i pris à la fin de la simulation et V_{0i} qui représente le volume initial d'une cellule de Voronoï i .

A la figure 3.28-C, la déformation volumique finale subie par chaque cellule de Voronoï au cours de la compression est représentée. Initialement la déformation volumique est nulle (voir FIG. 3.28-A), puis au cours de la simulation, elle s'accroît pour les sphères présentes dans la partie lâche de l'empilement (voir FIG. 3.28-B). A la fin de la simulation, la figure 3.28-C représente la déformation volumique des sphères. Visuellement les cellules de Voronoï de la partie moins compacte de l'empilement ont subi les plus fortes déformations volumiques. Pour s'assurer de cela, la figure 3.28-D

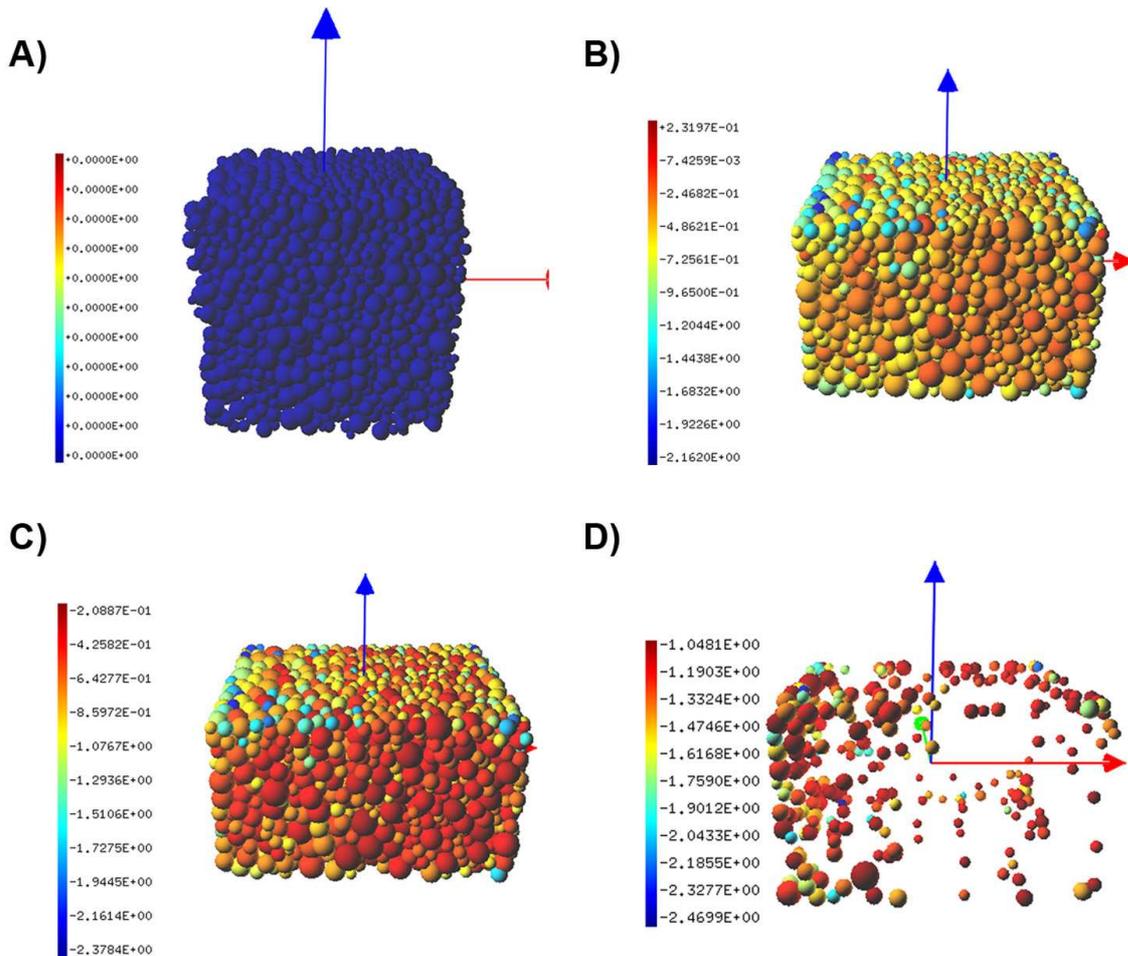


FIG. 3.28 – L'évolution de la déformation volumique de chaque cellule de Voronoï au cours de la simulation. A) L'empilement initial. B) L'empilement à la moitié de la compression. C) L'empilement à une compacité de 0,93. D) Représentation des sphères ayant subi une forte déformation volumique au sein de l'empilement.

représente uniquement les sphères dont les cellules de Voronoï ont les plus fortes valeurs de déformation volumique ($-1,0$ à $-2,4$). Cette dernière figure montre que les cellules de Voronoï associées à des sphères en contact avec les parois, ou placées dans la partie initialement lâche de l'empilement se déforment beaucoup. Cette dernière information, nous permet d'avancer l'hypothèse que le réarrangement n'est pas le seul phénomène au sein du milieu granulaire qui tend à réduire le gradient de compacité. En effet, une densification plus importante intervient dans la partie moins compacte de l'empilement, ce qui entraîne des valeurs de compacité dans cette zone proche de celle présente dans la partie plus dense de l'empilement.

Dans cette étude, on a procédé à la simulation de la compression en matrice d'un empilement de sphères d'aluminium proche d'un tas de poudres. Cette densification jusqu'à une valeur de la compacité égale à 0,93 montre que le gradient de densité initialement présent au sein de l'échantillon tend à disparaître. Ce phénomène s'explique grâce à l'utilisation de différents types de post-traitements réalisés sur la simulation, par le phénomène de réarrangement qui intervient de façon très marquée en début de compression et qui se poursuit à de très faibles amplitudes jusqu'à la fin de la simulation. L'autre phénomène qui favorise la disparition du gradient de compacité est la déformation volumique

qui intervient dans les zones les plus poreuses de l'empilement. Un tel phénomène semble assez inattendu dans la mesure où la compression est homogène. Mais si on se réfère à la simulation, les sphères présentes dans la partie lâche de l'empilement se déforiment. Cette hypothèse de déformation repose sur le fait que les sphères sont en contact initialement. On peut ainsi penser que plus la compression atteint des valeurs élevées de compacité et plus on va tendre vers une valeur unique de la compacité dans le milieu granulaire.

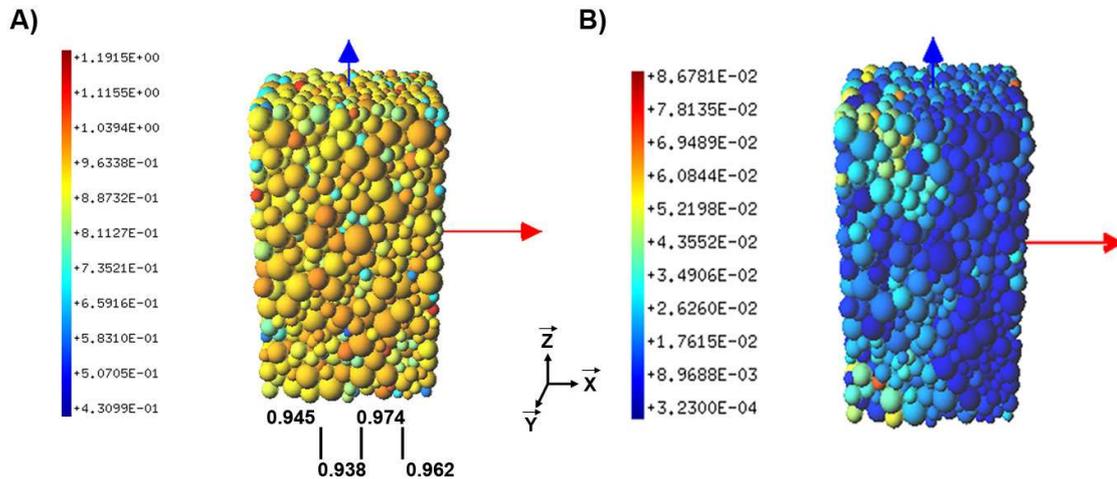


FIG. 3.29 – La compression en suivant l'axe X d'un empilement avec un gradient de compacité unidirectionnel qui évolue dans la direction X. A) La densité locale des sphères à la fin de la compression 0,93. B) Les déplacements des sphères dans le plan YOZ à la fin de la compression.

Ayant la possibilité d'effectuer très facilement un nouveau test à partir du même échantillon, nous poursuivons l'étude en comprimant l'échantillon cette fois-ci dans la direction de l'axe X. Cet essai consiste donc à comprimer l'échantillon à une valeur de compacité égale à 0,95 dans la même direction où évolue le gradient de compacité. La compression se fait toujours avec la même démarche en rapprochant les deux parois dans la direction X vers le centre de l'empilement. Pour information, le déplacement d'une paroi pour atteindre cette compacité est égale au quart de l'arrête du cube. Avant de passer à l'étude des résultats fournis par les post-traitements, on peut logiquement supposer qu'à la fin de cet essai, le gradient de compacité va disparaître au sein de l'empilement. Généralement, dans ce type de cas, la partie dense de l'empilement ne va se densifier qu'une fois que la partie lâche est à la même valeur de compacité.

Les figures 3.29A-B représentent successivement la répartition de la densité locale et l'amplitude des déplacements effectués par les particules dans le plan YOZ. On constate avec la figure 3.29-A que le gradient de compacité est toujours présent (variation de la compacité entre 0,938 à 0,974). On notera que les valeurs de chaque zone correspondent à une moyenne de six valeurs prises avec la sonde sphérique de mesures (voir Sec. 2.8.1). A la figure 3.29-B, les valeurs extrêmes des déplacements dans le plan YOZ indiquent que le réarrangement s'est fait uniquement dans la partie lâche de l'empilement, mais celui-ci s'est opéré sur une zone moins importante qu'à la figure 3.27-B.

Pour exploiter toutes les capacités de l'algorithme géométrique à générer des microstructures variées, on procède à la compression en matrice d'un empilement avec un gradient radial de compacité (voir Fig. 3.30-A). Outre le fait que cette configuration d'empilement peut tout à fait être trouvée au sein d'une matrice avant compression, on veut surtout insister sur l'axe de recherche et de déve-

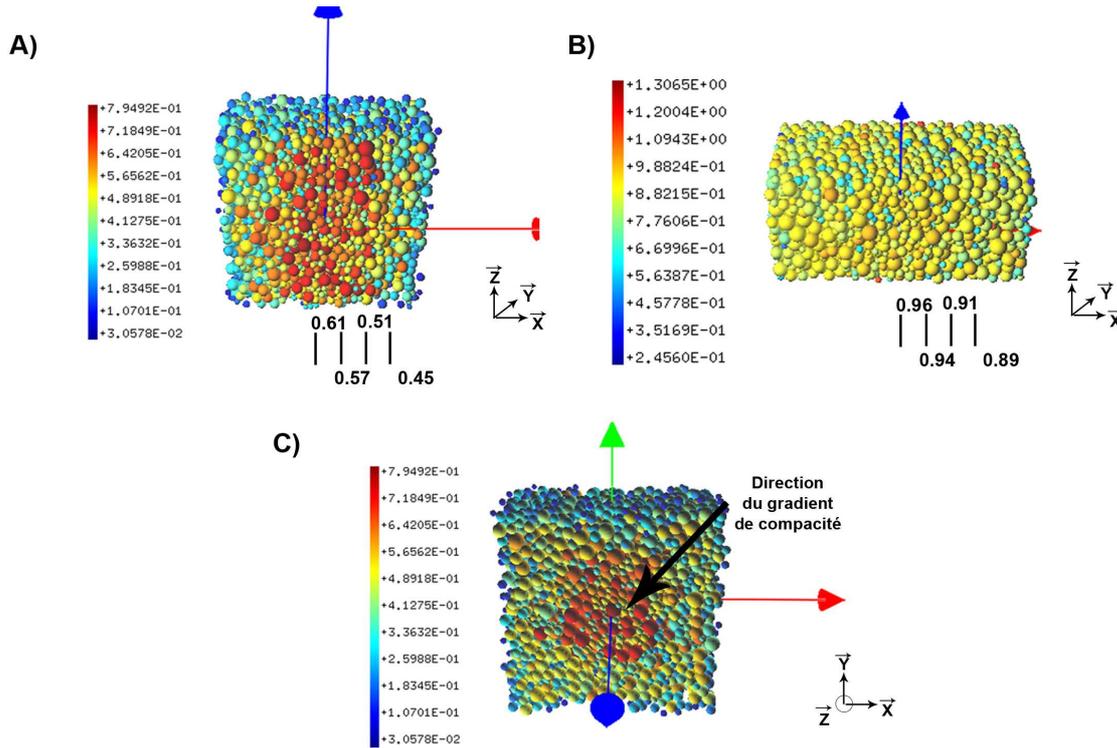


FIG. 3.30 – Empilement cubique de 6.953 sphères avec un gradient de compacité cylindrique, l'empilement dont la valeur de densité locale des sphères est représentée se densifie des bords vers le centre. A) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOZ de l'empilement avant compression. B) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOZ de l'empilement en fin de compression. C) Vue du centre de l'empilement dans le plan XOY de l'empilement avant compression.

l'empilement qui peut être entrepris avec les différents développements effectués au sein de cette thèse.

Une microstructure de 6.953 sphères a un gradient radial (l'axe Z est l'axe de symétrie) de compacité généré avec une faible compacité aux bords (compacité égale à 0,45) qui se densifie au fur et à mesure que l'on se rapproche du centre pour atteindre une valeur égale à 0,61. Ce type d'empilement est créé simplement en indiquant à l'algorithme de densifier une zone de forme définie jusqu'à une compacité fixée (voir annexe F). Au départ, la zone définie est le cube en entier (zone de $1 \times 1 \times 1$) qui est densifié à une compacité de 0,45, puis on définit une deuxième zone à une compacité de 0,51 qui est de forme cylindrique (centre (0,5, 0,5, z), rayon égal à 0,875). On continue cette procédure itérative en réduisant le rayon de la zone cylindre de 0,125 et en affectant une nouvelle valeur de compacité, jusqu'à avoir une dernière zone à une compacité de 0,61 qui est un cylindre de rayon égal à 0,125. Pour mémoire, on rappelle que la compacité est calculée par des sphères de mesure que l'on place à plusieurs endroits au sein de l'empilement pour s'assurer de l'homogénéité de la compacité.

Cette procédure de génération aboutit à la création d'un empilement cubique de 6.953 sphères (ratio de taille égal à 2) avec un gradient de compacité qui évolue de façon radiale (voir Fig. 3.30-C). La figure 3.30-B représente la valeur de la densité locale pour chaque sphère en fin de compression en matrice. Initialement le gradient de compacité a un écart ΔC qui est égal à 0,14 et après compression jusqu'à une compacité de 0,93, ce gradient ΔC est égal à 0,08. Dans ce cas du gradient radial, la

compression se fait perpendiculairement à la direction d'évolution du gradient. En fonction des résultats issus des deux tests de compression précédents, il n'est pas surprenant de voir que le gradient de compacité soit présent avec une telle valeur de ΔC . Des résultats plus surprenants sont montrés en utilisant les autres types de post-traitements (déformation volumique locale et déplacement des sphères).

La figure 3.31-A qui est une vue en coupe au centre de l'empilement montre que la déformation volumique des cellules de Voronoï en fin de compression intervient plus fortement pour celles qui sont situées dans les parties moins compactes et sur les bords. Donc là encore, on voit que les cellules de Voronoï dans la partie dense de l'empilement ne se déforment pas autant que les autres dans le cas d'une compression uniforme. Si on se reporte aux déplacements des sphères réalisés dans le plan XOY (voir Fig. 3.31-B), on peut voir que les sphères au centre de l'empilement ne bougent quasiment pas par rapport aux sphères présentes dans des parties moins denses de l'empilement. Ce résultat surprend, puisqu'il était attendu que la partie dense au centre de l'empilement se dilate fortement lors de la compression pour densifier radialement les autres couches moins denses.

Un tel résultat permet de conclure qu'une partie dense d'un empilement initial restera dans tous les cas au cours de la compression, très dense. Dans le cas d'une pièce mécanique avec des parties à renforcer, cette hypothèse est intéressante. Si on trouve le procédé de remplissage qui permet d'avoir une poudre plus compacte au niveau des zones à renforcer, après compression cette partie de la pièce sera la plus dense et la plus résistante mécaniquement. On rappelle que l'on est dans le cas d'une poudre d'aluminium avec un coefficient de frottement dont la valeur reste dans la moyenne basse de coefficient frottement des poudres usuelles.

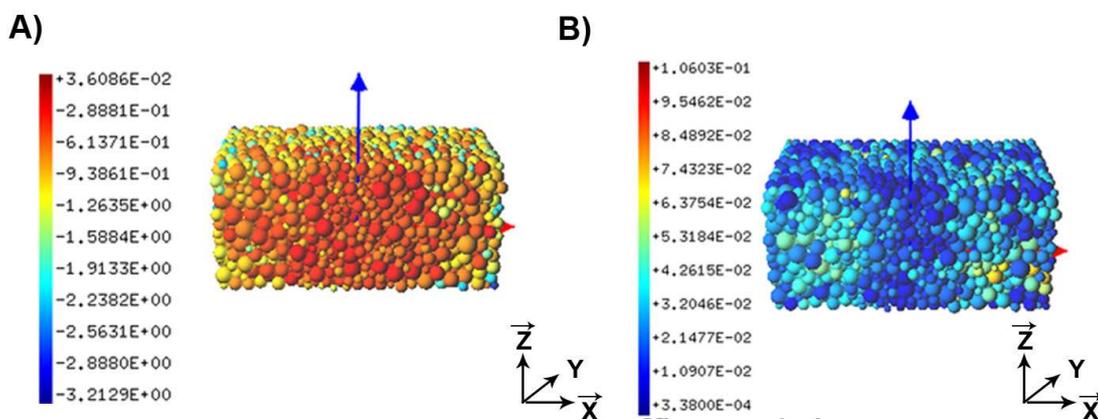


FIG. 3.31 – Représentation de l'empilement avec un gradient de compacité cylindrique en fin de compression pour différents types de post-traitements. A) Représentation de la déformation volumique subie par chaque sphère en vue de coupe dans le plan XOZ. B) Représentation du déplacement en XOY de chaque sphère en vue de coupe dans le plan XOZ.

En ce qui concerne les courbes réponses en contrainte-compacité pour ces trois simulations de compression sur des textures avec un gradient de compacité, la figure 3.32 montre que les réponses sont très proches. En effet, la différence de texture granulaire semble avoir une faible influence sur les courbes réponses. On peut rappeler que chaque empilement a un ratio de taille égal à 2. Par rapport aux courbes réponses de la compression en matrice pour la poudre d'aluminium, représentées aux figures 3.24A-B (voir section précédente), on s'aperçoit que les courbes de contraintes à la figure 3.32 sont

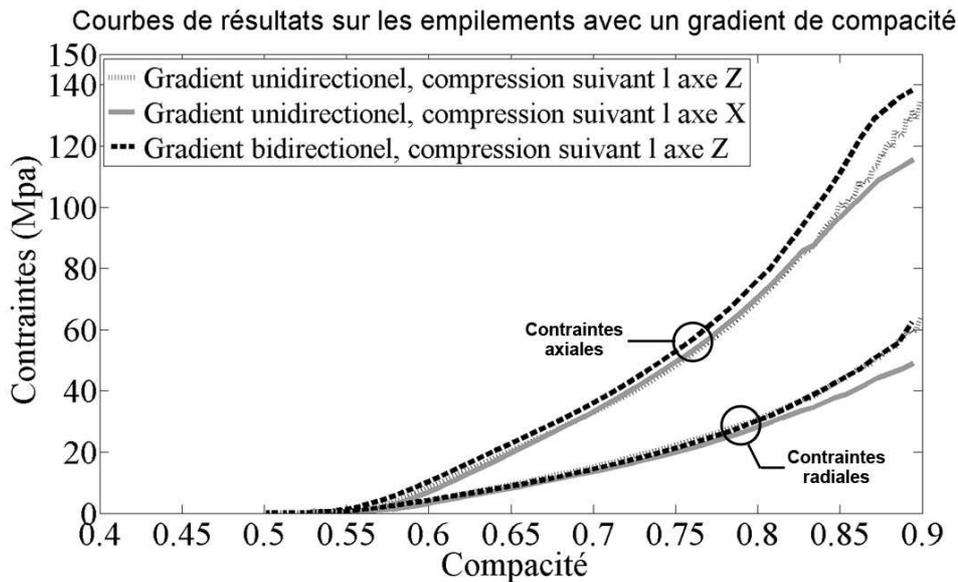


FIG. 3.32 – Courbes des contraintes appliquées sur les parois axiales et latérales pour la compression d'empilements avec un gradient de compacité.

très proches d'elles. La seule différence se fait au début de la compression des empilements avec un gradient de compacité, la valeur des contraintes reste nulle à cause de la phase de réarrangement.

3.5 Conclusion

En conclusion de ce dernier chapitre, une synthèse des différents résultats obtenus par la mise en œuvre séparée de chaque développement réalisé dans cette thèse et par l'utilisation associée de ces différents outils et modèles peut être faite.

Au début de ce chapitre de validations et de résultats, la caractérisation des empilements obtenus par l'algorithme géométrique est réalisée à partir de divers post-traitements. On a pu voir notamment que cet algorithme développé initialement en Matlab (langage interprété) pour l'instant, présente pour l'instant un temps de génération supérieur à une méthode dynamique écrite en langage compilé. L'avantage de ce nouvel outil ne se limite pas seulement à ce paramètre. Toutes les sphères placées dans les empilements ont au moins un contact, le nombre de coordination est élevé et la plage des valeurs de compacité qu'il est possible d'atteindre est très importante pour une valeur de ratio fixée. De plus, les échantillons réalisés à partir de cette nouvelle approche de génération sont tous organisés de façon aléatoire avec aucune notion d'ordre et d'orientation géométrique des contacts privilégiés dans une quelconque direction. Le seul défaut effectif de l'algorithme est que celui-ci ne peut respecter une distribution de taille des particules préalablement imposée par l'utilisateur. Si cette contrainte gérée par la plupart des autres algorithmes n'est pas prise en compte par notre outil, en contrepoint, il est appréciable de savoir que des options comme le contrôle de la valeur minimale, maximale des rayons et de la valeur de l'interpénétration maximale sont disponibles.

Tout comme le choix pour l'utilisateur d'imposer un nombre final de sphères ou une valeur de la compacité finale, la richesse des options à disposition ne s'arrête pas là. Elles se déclinent avec

la possibilité de créer une distribution de la compacité dans l'empilement ainsi que des formes géométriques illimitées du domaine d'étude pré-maillé. Toutes ces possibilités, qui sont d'un très grand intérêt dans l'étude de la compression des poudres, ont été employées en toute fin de chapitre après la validation du modèle de contact développé.

Concernant cette validation du modèle, elle s'est d'abord faite sur la base de différentes comparaisons avec la méthode numérique de référence qu'est la MEFMP. L'intérêt était de s'assurer que les diverses réponses inter-granulaires générées par la méthode des éléments discrets soient équivalentes à celles de la méthode des éléments finis multi-particules. D'autant plus que le temps de calcul avec la MED est nettement inférieur à celui de la MEFMP à simulation équivalente. Une fois que la validation du modèle de contact a été effectuée pour plusieurs types de sollicitations, on a testé la robustesse des simulations en comparant les résultats numériques à des résultats expérimentaux tirés de la littérature. Suite à cette dernière étape de comparaison réalisée avec succès sur les poudres telles que l'aluminium et le cuivre, on a estimé que le modèle de contact utilisé est assez robuste pour des simulations prédictives avec un chemin de chargement isotrope et en matrice.

Puis dans l'optique d'observer le comportement de différentes microstructures sous sollicitations mécaniques, des empilements avec différents gradients de compacité sont générés par l'algorithme géométrique et ces différentes textures sont par la suite comprimées en matrice. Ce type de chargement qui est le plus souvent réalisé en industrie a été privilégié dans les simulations. Le résultat d'une telle étude sur l'influence de la texture granulaire a révélé que la partie dense du gradient de compacité au sein de l'empilement de sphères a tendance à très peu se réarranger par rapport aux autres parties. On s'est également aperçu que les cellules de Voronoï de cette zone dense subissaient une très faible déformation. Ainsi, on trouve logiquement que les parties les plus lâches d'un empilement se réarrangent plus, mais on n'imagine pas que le gradient de compacité tende à se résorber sans que la partie dense de l'empilement se réarrange avec d'autres zones présentes au sein de celui-ci.

Grâce à la mise en commun de tous les développements réalisés au sein de cette thèse, nous avons montré à travers ce chapitre que les outils numériques pour modéliser la compression des poudres pour de fortes valeurs de compacité et pour faire de la recherche et du développement sur cette phase de la métallurgie des poudres sont accessibles.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Ce travail de thèse a consisté en l'étude du comportement mécanique des poudres métalliques lors de la phase de compression à froid pour des valeurs élevées de compacité. Les travaux menés ont principalement conduit à l'élaboration de nombreux modèles numériques.

Dans le chapitre 1, nous avons donc présenté le comportement mécanique des poudres sous sollicitations mécaniques et décrit la configuration spatiale de la masse de poudre avant compression. Ces différentes données sont tirées de résultats expérimentaux et numériques obtenus avec la méthode des éléments discrets (MED). Cette méthode numérique a en effet démontré tout son potentiel pour la modélisation de toutes les phases que compte la Métallurgie des Poudres.

Par comparaison aux deux autres méthodes numériques que sont les éléments finis dédiés à l'approche macroscopique du massif de poudre et les éléments finis multi-particules (MEFMP), et la prise en compte de critères relatifs aux temps de calcul et à la "qualité" des résultats, il s'avère que la MED représente le meilleur choix en terme de méthode pour atteindre l'objectif fixé dans notre travail de recherche. La méthode des éléments discrets est capable de reproduire à moindre coût certains phénomènes physiques comme le réarrangement, la fissuration, l'influence des chargements précédents. Mais cette méthode ne peut reproduire la déformation des particules comme le fait la MEFMP, ainsi elle connaît à ce jour une certaine limitation pour reproduire le comportement mécanique intergranulaire pour des valeurs élevées de compacité.

Pour dépasser cette limitation induite par l'utilisation de corps rigides au sein de la MED, un modèle basé sur une nouvelle loi de contact normal est présentée au chapitre 2. Grâce à cette loi de contact normal inédite intégrant en plus de l'interpénétration (h) un nouveau paramètre local relatif à la densité, les différents phénomènes physiques (i.e., incompressibilité plastique des particules, dépendances des contacts) activés aux valeurs élevées de compacité peuvent être reproduits. A cette loi de contact normal, il a été associé une loi de contact tangentiel et de décharge de sorte à disposer d'un modèle de comportement inter-particulaire complet nécessaire à la simulation MED du comportement des poudres lors de la phase de compression.

Avant de mener les simulations proprement dites, le chapitre 2 a également abordé le thème de la génération d'empilements de sphères au travers de la présentation des principes de fonctionnement d'un nouvel algorithme de type géométrique. L'objectif poursuivi consistait à pouvoir reproduire en phase initiale aux calculs éléments discrets des assemblages de sphères ayant des caractéristiques géométriques similaires au volume de poudre après remplissage ou transfert. De sorte à calquer ces caractéristiques au sein des échantillons numériques, ce nouvel algorithme géométrique de génération a été développé sur un principe de propagation de sphères en contact dans des mailles tétraédriques.

Le chapitre 3, dernier chapitre de ce manuscrit, a rassemblé tous les résultats de simulation obtenus à partir de la mise en œuvre des nouveaux apports principalement développés au chapitre 2. La première partie du chapitre 3 est consacrée à la caractérisation fine des empilements de sphères générés par l'algorithme géométrique. Cette caractérisation réalisée à partir de divers post-traitements couramment utilisés pour la méthode des éléments discrets, révèle que l'algorithme géométrique proposé présente de nombreux avantages. Ainsi pour les utilisateurs de la MED, cet algorithme donne la possibilité de générer des empilements avec un temps de calcul très compétitif par rapport aux autres algorithmes existants. Par ailleurs le nombre de coordination induit par la méthode adoptée pour le placement des sphères est élevé et le contrôle de la compacité finale ou du nombre de sphères dans l'empilement est possible. Un autre aspect novateur de cet algorithme est la création d'empilements de sphères de formes géométriques très complexes, le contrôle de cette caractéristique se faisant en amont de la génération proprement dite et au travers de la géométrie du maillage tétraédrique. En termes d'apports à l'étude de la compression des poudres métalliques, ce nouvel outil de génération permet de reproduire aisément des gradients spatiaux de compacité au sein de l'empilement initial.

Une fois la phase initiale de la simulation bien appréhendée à l'aide de l'algorithme géométrique, nous nous sommes intéressés à la propension du modèle de contact à pouvoir reproduire le comportement inter-granulaire des poudres. A partir de résultats expérimentaux et numériques (MEFMP) édités dans le cadre de compressions isostatiques et en matrice de poudres jusqu'à des valeurs élevées de compacité, l'étape de validation du modèle de contact par simulations éléments discrets a été réalisée. Les résultats obtenus par les simulations aux éléments discrets avec et sans frottement pour deux types de chemins de chargement (isostatique et en matrice) ont été comparés aux résultats expérimentaux et numériques répertoriés. Ces comparaisons multiples conduisent à valider le modèle de contact utilisé et à démontrer la robustesse des simulations aux éléments discrets pour reproduire avec fiabilité deux types de chargement à des valeurs élevées de compacité. Cette validation a été probante notamment par comparaison aux réponses mécaniques de référence issues de la MPFEM et de l'expérience dans le cas de grains de poudres sphériques.

Sur la base de résultats aussi encourageants, l'association de l'algorithme géométrique et du modèle de contact est réalisée afin d'étudier le comportement d'un volume de poudre caractérisé par de forts gradients de compacité initiale à la phase de compression en matrice. Par la création d'empilements à gradients de compacité unidirectionnels ou radiaux, on a voulu générer des textures granulaires semblables à celles qui existent dans la matrice ou du moins différentes des textures rencontrées au sein de la littérature ont été générées. Sur ces mêmes textures après compression, les mêmes post-traitements ont été appliqués afin d'observer le réarrangement des grains et la déformation volumique locale couplée à l'évolution de la densité locale (ou compacité locale). Grâce à ces analyses, il ressort des valeurs élevées de compacité ($C \geq 0.90$) présentant des gradients de compacité fortement réduit sans être toutefois complètement résorbés. Le réarrangement granulaire intervient très peu dans la zone la plus dense de l'empilement, même si la zone voisine est plus lâche. Finalement, il s'avère

que les parties lâches se densifient grâce aux réarrangements internes à la zone et à des déformations volumiques plus fortes sur chaque grain appartenant à cette zone. En dernier lieu, nous constatons également pour un empilement polydisperse que les particules de plus grandes tailles ont une densité locale plus forte au cours de la densification. Ce résultat traduit une grande déformation (i.e., un écoulement important de la matière) de ces particules dans l'empilement. Nous pouvons conclure que ce type d'écoulement est positif pour la bonne tenue mécanique de la pièce à vert, puisque il y aura plus d'enchevêtrements de particules et un réseau de contact plus important.

Perspectives

Le travail à effectuer dans la perspective d'une suite est conséquent, même si nous partons d'une base solide et très intéressante, construite grâce aux différents développements et tests de validation effectués dans cette thèse. L'objectif final reste dans cette thématique d'établir à partir de simulations aux éléments discrets une loi de comportement macroscopique anisotrope dans le plan des contraintes principales et de décrire son évolution au cours de sollicitations diverses. Pour réussir à atteindre cet objectif, le modèle de contact doit être enrichi par de la cohésion dans la direction normale et tangentielle ainsi que d'une loi de moment résistant à la rotation. Pour comprendre la nécessité d'un tel travail, on peut se reporter à la figure 3.33 qui représente une surface de charge d'une poudre d'aluminium dans le plan p-q. Cette surface de charge de forme très classique est issue des travaux de Sridhar et al. [Sridhar et Fleck (2000)], elle est réalisée à partir d'une première charge en matrice jusqu'à une compacité égale à 0.82, suivie d'une décharge et de différentes recharges en suivant d'autres chemins de chargement jusqu'à ce qu'une compacité égale à 0.82 soit atteinte ou jusqu'à ce qu'un contact entre deux particules plastifie de nouveau. La surface de charge à la figure 3.33 est décrite par la loi de comportement macroscopique établie par Fleck [Fleck (1995)] à partir d'études micromécaniques et par quelques points expérimentaux. Si on observe ces deux types de résultats, on voit que le modèle de Fleck extrapole la forme de la surface de charge et que les points expérimentaux peu nombreux dénotent toute la difficulté technique et le coût pour réaliser une telle campagne d'essais. De plus, pour mesurer les capacités du modèle de contact à reproduire le comportement anisotrope de la poudre après une première charge, nous avons entrepris de tracer cette surface de charge à partir de simulations aux éléments discrets en suivant la cinématique de charge, décharge et recharge décrite en amont.

La figure 3.33 contient également les différents résultats obtenus par la MED, nous nous apercevons que le modèle de contact génère des résultats (les points MED) qui sont proches de l'expérience et de la courbe obtenue avec l'équation de Fleck. Cette figure montre également l'incapacité du modèle de contact à produire des points dans la partie déviatoire du plan p-q. Cette incapacité est due à l'absence de cohésion et d'une loi de moment en rotation au sein de celui-ci. L'intégration dans le modèle de contact des différents paramètres qui contrôlent la cohésion et le couple résistant est indispensable, mais leur intégration nécessite le développement d'une démarche afin de calibrer et de valider ces nouveaux paramètres. De plus, il faudra établir un critère de plasticité pour les chargements déviatoires, afin de connaître la limite de la surface de charge. Pour réaliser ces différents travaux, il faut obligatoirement disposer d'une base de données de résultats expérimentaux pour :

- Différents chemins de chargement directs autres que les compressions en matrice et isotrope qui sont deux types de chargement déjà validés dans ce manuscrit.
- Différents types de surface de charges (i.e., une première charge en matrice ou isotrope).

Cette base de données est nécessaire dans l'objectif de compléter et de valider le modèle de

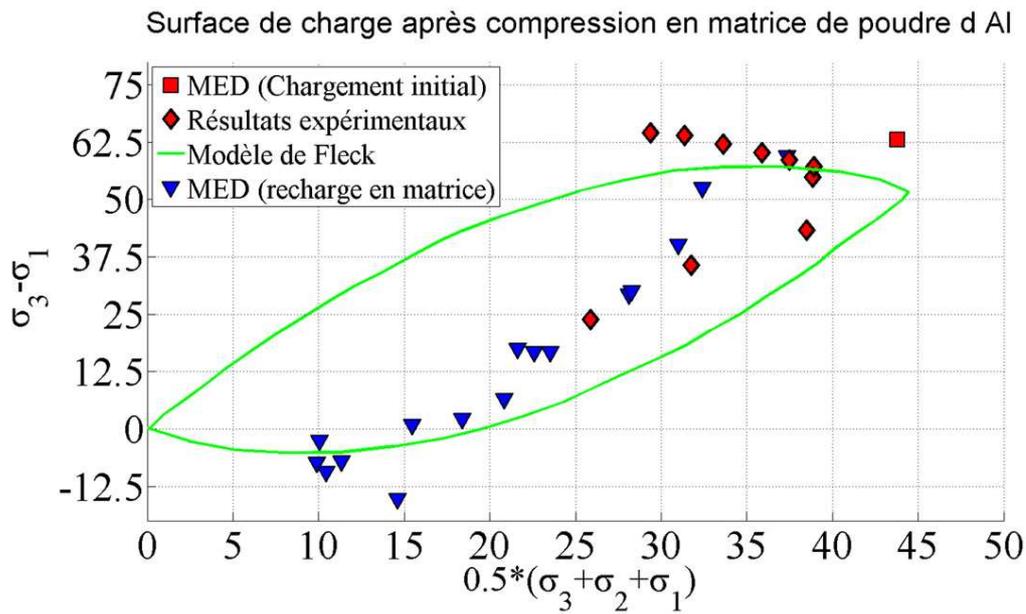


FIG. 3.33 – Surface de charge de la poudre d'aluminium pour une compacité égale à 0.82. Sur cette surface de charge issue des travaux de Sridhar et al. [Sridhar et Fleck (2000)], nous avons rajouté des points obtenus avec le modèle de contact développé dans la thèse

contact établi. Le point positif est que le laboratoire 3S-R est l'une des structures en France à avoir le savoir-faire et les dispositifs expérimentaux pour atteindre cet objectif.

En ce qui concerne l'algorithme géométrique, son développement devrait continuer sur le long terme avec une intégration dans les projets menés en collaboration entre EDF et le laboratoire 3S-R depuis déjà un an et par son implantation dans le code Yade. Deux objectifs primordiaux restent à atteindre pour achever le développement de cet outil de génération d'empilements. Il s'agit d'une part d'assurer le contrôle de la distribution de taille des particules par l'utilisateur, d'autre part de pouvoir remplacer la délimitation des frontières du volume de poudre généré par des sphères virtuelles. La réalisation de chacun de ces objectifs donnera à l'algorithme géométrique un écho favorable encore plus important dans le domaine de la méthode des éléments discrets.

Le comportement élastoplastique de matériaux denses ou particuliers

Dans cette section, nous nous attacherons à dégager les fondements mécaniques qui régissent ces phénomènes et par voie de conséquence les modèles phénoménologiques numériques qui en résultent (voir Sec. 1.6). Ici, seront donc exposés en substance les aspects fondamentaux des mécanismes de déformations élastiques et plastiques. Pour rappel, dans le chapitre 1 (voir Sec. 1.5), il a été évoqué à maintes reprises qu'au cours du procédé de compaction, la poudre est chargée principalement en compression avec l'obtention de grandes déformations du comprimé. Mais pour plus de simplicité dans le développement des expressions qui décrivent le comportement mécanique du matériau et pour décomposer la déformation totale en une composante élastique et plastique, les équations présentées dans cette partie seront définies sur la théorie des petites déformations élastiques [Trasorras *et al.* (1998)].

Pour cette approche, commençons par décrire le simple cas d'une compression uni-axiale sur un échantillon cylindrique métallique non poreux, afin d'identifier une réponse classique d'un tel matériau sollicité en compression. Nous verrons par la suite comment généraliser les conclusions faites sur cette courbe réponse pour décrire la réponse du comprimé de poudre sujet à un chargement multi-axial (i.e, dans plusieurs directions).

A.1 La compression uni-axiale

On considère initialement, la situation où un échantillon est sujet à une contrainte uni-axiale (σ) qui produit une déformation (ϵ) d'un solide sollicité. La figure A.1 montre la réponse typique d'un matériau métallique soumis à ce type de sollicitations. On s'aperçoit que pour des faibles valeurs de contraintes, la réponse est élastique et qu'elle suit la relation linéaire suivante:

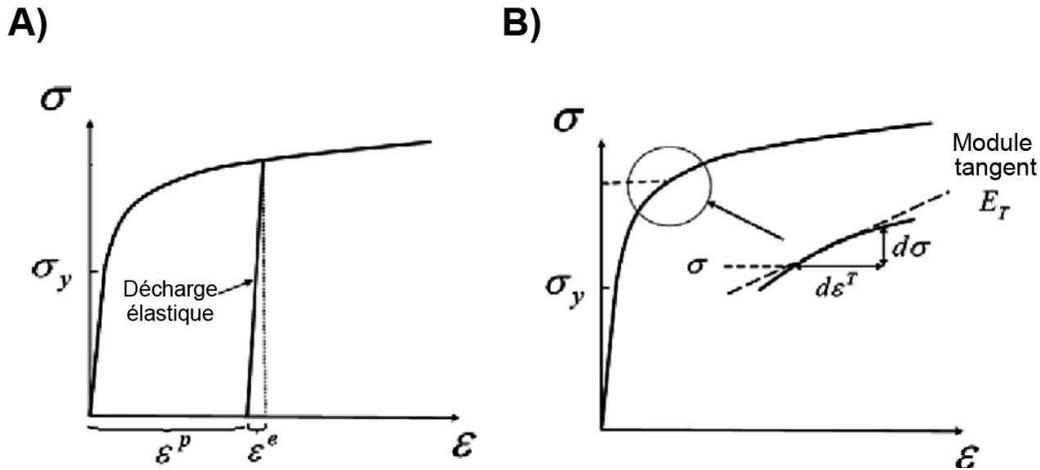


FIG. A.1 – Courbes contrainte-déformation avec un comportement élastoplastique écrouissable. Ces courbes montrent la décomposition de la déformation en une composante élastique et plastique.

$$\sigma = E\epsilon \quad (\text{A.1})$$

Où E est le module de Young du matériau.

Pour une certaine valeur de la contrainte ($\sigma = \sigma_y$), l'échantillon subit une plastification. Au delà de cette contrainte (σ_y) les déformations plastiques s'accumulent, et la déformation totale de l'échantillon est égale à :

$$\epsilon^{total} = \epsilon^{elast} + \epsilon^{plast} = \frac{\sigma}{E} + \epsilon^{plast} \quad (\text{A.2})$$

Si après plastification de l'échantillon la contrainte est réduite à zéro, la décharge se fera élastiquement et la déformation résiduelle sera égale à la déformation plastique ($\epsilon^{total} = \epsilon^{plast}$). Si la mesure de la réponse à la compression reste dans le domaine élastique, la déformation totale après décharge élastique sera nulle ($\epsilon^{total} = 0$).

Outre les déformations résiduelles, la plastification du matériau ($\sigma > \sigma_y$) peut également provoquer l'augmentation de la valeur de σ_y . Ce phénomène est connu sous le nom d'écrouissage et il est provoqué par le changement de la microstructure du matériau lors de la plastification. Une fois le matériau écrouit, on a $\sigma_y = \sigma$ ce qui induit que σ_y est une fonction de ϵ^{plast} ($\sigma_y = \sigma_y(\epsilon^{plast})$). On peut également exprimer l'évolution de la réponse sous une forme plus pratique pour les mécaniciens :

$$f = \sigma - \sigma_y \leq 0 \quad (\text{A.3})$$

En pratique, le cas où $\sigma - \sigma_y > 0$ n'existe pas, car lorsque $\sigma - \sigma_y < 0$ le matériau a un comportement élastique et quand $\sigma - \sigma_y = 0$ son comportement est celui d'un matériau plastique écrouissable avec augmentation de la valeur σ_y .

Dans cette première partie, nous nous sommes intéressés à la réponse d'un matériau métallique dense pour un chargement dans une seule direction. S'agissant de matériau encore poreux comme le comprimé de poudre, on ne peut considérer le module de Young constant mais plutôt comme une fonction de ϵ^{plast} (voir Eq. A.4), ce qui revient à dire que E est une fonction de la densité en première approche:

$$E = E(\sigma_y) = E(\epsilon^{plast}) \quad (\text{A.4})$$

Pour l'objet de notre étude, nous avons retenu comme élément significatif l'historique complexe des contraintes qui caractérisent le comportement du matériau. L'équation A.4 qui dépend de $\sigma_y(\epsilon^{plast})$ peut être déterminée à partir d'un essai en compression uni-axiale sur le comprimé, dans lequel la contrainte sera augmentée linéairement jusqu'à ce que l'équation $\sigma - \sigma_y = 0$ soit satisfaite. Une fois la plasticité atteinte, la contrainte pourra être diminuée afin de déterminer le module d'Young pour une porosité donnée grâce à la pente de la droite de décharge.

Dans le cadre de la densification de la poudre, plusieurs états de contraintes apparaissent au cours de la fabrication du comprimé (i.e., plusieurs charges et décharges peuvent survenir), et il devient alors plus commode d'exprimer la réponse du matériau sous la forme incrémentale. Pour cela, on considère la situation où à un instant donné, la relation $\sigma - \sigma_y = 0$ est satisfaite (i.e., on considère que le matériau plastifie), puis en augmentant la contrainte d'un incrément $d\sigma$ comme on le voit à la figure A.1B. Il en résulte alors un incrément de déformation $d\epsilon^{total}$ qui est donné par la relation suivante:

$$d\epsilon^{total} = d\epsilon^{elast} + d\epsilon^{plast} = \frac{d\sigma}{E} - \frac{\sigma}{E^2} \frac{dE}{d\sigma_y} d\sigma + d\epsilon^{plas} = \left[\frac{1}{E} \left(1 - \left(\frac{\sigma}{E} \frac{dE}{d\sigma_y} \right) \right) - \frac{1}{h(\sigma_y)} \right] d\sigma = \frac{d\sigma}{E_T} \quad (\text{A.5})$$

Où $h(\sigma_y) = \frac{d\sigma_y}{\epsilon^{plas}}$ est la fonction d'écrouissage qui représente l'augmentation de la limite élastique (σ_y) pour un incrément de déformation et le terme dans les crochets est l'inverse du module tangent (E_T) à la courbe (σ, ϵ) (voir Fig. A.1B).

L'équation A.5 représente la version incrémentale de l'équation A.1 pour la courbe réponse élasto-plastique non-linéaire du matériau à la figure A.1. Cette forme incrémentale est le support de la plupart des modèles de comportement utilisés dans la métallurgie des poudres.

A.2 La déformation sous un état de contraintes multi-axial

Nous étendons la description de la réponse d'un matériau avec un comportement isotrope à des chargements multi-axiaux (voir Fig. A.2A). Par ce type de chargement, l'échantillon est sollicité par 6 composantes de contraintes (3 composantes normales, 3 composantes tangentielles) ce qui induit 6 composantes de déformations (3 composantes normales, 3 composantes tangentielles). Il est alors plus approprié d'exprimer la réponse du matériau en terme d'invariants de contrainte et de déformations. En 3D, il y a trois invariants de contrainte, mais on ne peut en considérer que deux: la pression moyenne ou hydrostatique p et la contrainte équivalente de Von Mises q (voir Sec. 1.5.1.3). Comme

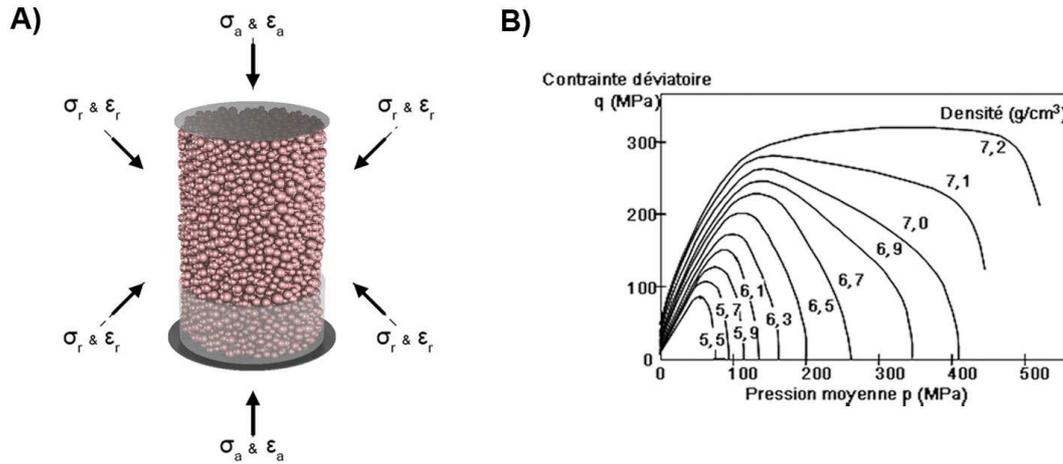


FIG. A.2 – A) Etats de contrainte axisymétriques appliqués à un échantillon cylindrique de poudre. B) Réseau de courbes isodensités d'une poudre de fer déterminé à l'aide d'essais triaxiaux de révolution.

on l'a vu dans les sections précédentes, les études expérimentales sont souvent réalisées sur des comprimés qui sont sujets à des chargements axisymétriques avec des expressions de p et q définies en fonction de ϵ_r et de ϵ_a (voir FIG. A.2A). Les résultats de ces études expérimentales prennent classiquement la forme d'un réseau de courbes "isodensités" tracées dans le plan p - q . Ces courbes, pour une poudre donnée, représentent les valeurs des états de contrainte nécessaires pour atteindre une compacité voulue (voir FIG. A.2B). Pour les mécaniciens la figure A.2B représente la réponse de la poudre fer au cours de la densification pour différents chemins de chargement. Il s'avère primordiale de connaître ce réseau dès lors que l'on étudie une poudre.

Associés à ces deux invariants de contraintes (p, q), on peut également définir deux invariants de déformations: la déformation volumique (ϵ_v) et la déformation équivalente (ϵ_e) qui sont définies par l'équation A.6.

$$\epsilon_v = \epsilon_a + 2\epsilon_r \quad \epsilon_e = \frac{2}{3}|\epsilon_a - \epsilon_r| \quad (\text{A.6})$$

Pour un matériau avec un comportement élastique isotrope, deux paramètres requises pour définir la réponse du matériau (la relation entre contrainte et déformation). L'application d'une pression entraîne une variation du volume de l'échantillon:

$$\epsilon_v = \frac{\text{Pression}}{K} \quad (\text{A.7})$$

Et la contrainte effective (σ_e) conduit à un changement de forme de l'échantillon:

$$\epsilon_e = \frac{\sigma_e}{3G} \quad (\text{A.8})$$

Où K est le module de compressibilité et G est le module de cisaillement. La réponse élastique peut alternativement être décrite en fonction du module de Young défini à l'équation A.1 et le

coefficient de poisson ν qui permettent de calculer K et G:

$$K = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad G = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \quad (\text{A.9})$$

Quand le matériau arrive à la plasticité sous chargement multi-axial, nous avons besoin d'introduire un nombre de concepts additionnels. Dans le cas d'une compression uni-axiale, σ_y a été définie comme la valeur limite entre le comportement élastique et plastique du matériau. Sous chargement multi-axial, on identifie non pas une limite élastique, mais une surface de plasticité qui est une zone convexe dans l'espace des contraintes. Des exemples de cette surface seront présentés dans la section suivante. Lors de la compression du comprimé en plusieurs directions, la déformation plastique de celui-ci peut uniquement être atteinte si l'état de contrainte est sur la surface de plasticité. Cette surface de plasticité est exprimée mathématiquement comme:

$$f=f(q,p,\text{état du matériau}) = 0 \quad (\text{A.10})$$

Où f est une fonction de deux scalaires p et q et l'état courant du matériau (qui est défini en fonction de σ_y ou en terme de déformation plastique accumulée sous chargement uni-axial). Comme dans le cas du chargement uni-axial, la réponse est élastique quand $f < 0$ (i.e., l'état de contrainte est à l'intérieur de l'enveloppe définie par la surface de plasticité ou surface de charges) et une réponse où $f > 0$ est impossible. Lorsque le critère de plasticité est identifié pour un chargement qui peut intervenir dans plusieurs directions, on doit définir l'état du matériau et déterminer son comportement lors de l'écoulement, une fois que la plastification survient. On sait qu'en un point de la surface de charges, la plastification du matériau peut se produire et engendrer une déformation de cette surface, il convient alors d'exprimer cette évolution en terme d'incrément de déformation plastique :

$$d\epsilon_v^p = d\epsilon_a^p + 2d\epsilon_r^p \quad d\bar{\epsilon}^p = \frac{2}{3}|d\epsilon_a^p - d\epsilon_r^p| \quad (\text{A.11})$$

Où $d\bar{\epsilon}^p$ est l'incrément de déformation effective et $d\epsilon_v^p$ est l'incrément de déformation volumique. Ces deux égalités définies dans l'équation A.11 ne sont valables que dans le cas d'un chargement axisymétrique (voir FIG. A.2), où l'indice p se rapporte aux composantes de déformations plastique. Concernant, l'incrément de déformation effective ($d\bar{\epsilon}^p$), il est toujours positif ainsi la déformation effective s'accumulera de façon régulière:

$$\epsilon^p = \int_0^{\bar{\epsilon}^p} d\bar{\epsilon}^p \quad (\text{A.12})$$

L'incrément de déformation volumique peut être relié au changement de volume (dV) et au volume (V) d'un échantillon:

$$d\epsilon_v^p = -\frac{dV}{V} \quad (\text{A.13})$$

Comme dans le cas du chargement uni-axial, on peut décrire l'état du matériau en terme de déformation plastique (ϵ^p) à un instant donné avec ϵ_v^p et $\bar{\epsilon}^p$:

$$f = f(p, q, \epsilon_v^p, \bar{\epsilon}^p) = 0 \quad (\text{A.14})$$

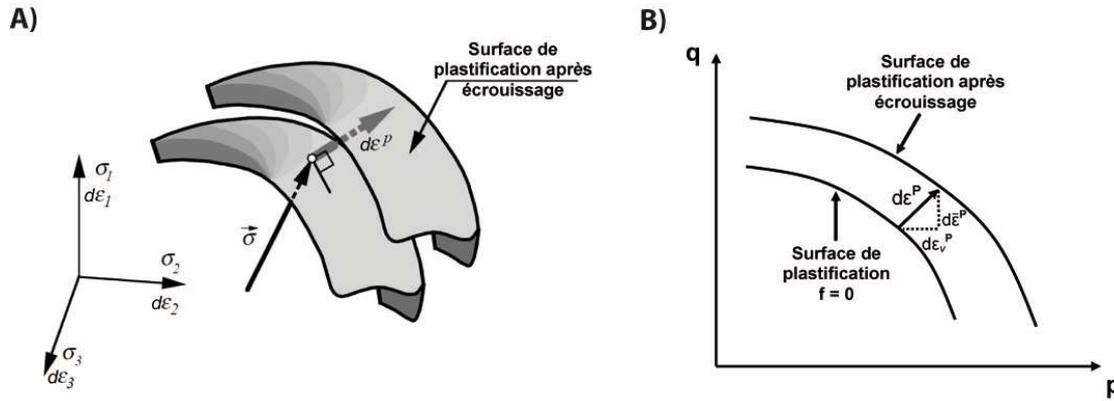


FIG. A.3 – A) Evolution de la surface de plasticité dans l'espace des contraintes principales. On a un incrément de déformation plastique qui est perpendiculaire à la surface de plasticité (i.e., loi d'écoulement associée) B) Evolution de la surface de plasticité dans le plan p - q .

Le comprimé de poudre se déforme plastiquement (i.e., $f = 0$) dans le cas où une courbe de chargement atteint la surface de plasticité dans le plan (p - q), l'intersection de la surface avec cette courbe de chargement est représentée par un point de plasticité sur la surface définie par f (voir FIG. A.3A). Si l'écoulement plastique intervient (i.e., si le chargement continu après plastification), on associe l'augmentation de la surface de plasticité au vecteur direction ($d\epsilon^p$) engendré par l'incrément de déformation volumique ($d\epsilon_v^p$) et l'incrément de déformation effective ($d\bar{\epsilon}^p$) au point de plasticité (voir FIG. A.3A). Avec l'incrément de déformation volumique $d\epsilon_v^p$ qui est parallèle à l'axe q et celui de la déformation effective $d\bar{\epsilon}^p$ qui est parallèle à l'axe p (voir FIG. A.3B). Si le vecteur de déformation plastique ($d\epsilon^p$) engendré par $d\epsilon_v^p$ et $d\bar{\epsilon}^p$ est normale à la surface de plasticité, on dira que la règle d'écoulement du modèle est associée.

Drucker [Drucker (1959)] décrit un postulat de stabilité pour la déformation d'un matériau, lequel principe dit que: "un agent extérieur superposé aux forces qui existent dans l'état d'équilibre actuel doit, pour que l'équilibre soit stable, effectuer un travail non négatif durant son application et aussi dans un cycle complet d'application et d'enlèvement de cet agent."

Pour un matériau non-visqueux le critère de Drucker s'écrit :

$$d\sigma : d\epsilon^p \quad \epsilon^p \neq 0 \quad (\text{A.15})$$

Où $d\epsilon^p$ est le taux de déformation plastique. Drucker précise que l'utilisation de ce postulat impose une relation contrainte-déformation incrémentale linéaire, et une règle d'écoulement associée. Ainsi, si nous connaissons la forme de la surface de plasticité, nous pouvons déterminer l'augmentation relative de celle-ci (i.e., la valeur de l'incrément de déformations) lors de la plastification.

La règle pour la déformation (ou la loi d'écoulement) est associée à la surface de plasticité, son expression mathématique peut s'écrire:

$$d\epsilon_v^p = \lambda \frac{df}{dp} \quad (A), \quad d\bar{\epsilon}^p = \lambda \frac{df}{dq} \quad (B), \quad d\epsilon_i^p = \lambda \frac{df}{d\sigma_i} \quad (C) \quad (A.16)$$

Où λ est un multiplicateur plastique qui représente la norme du vecteur normal à la surface plastique

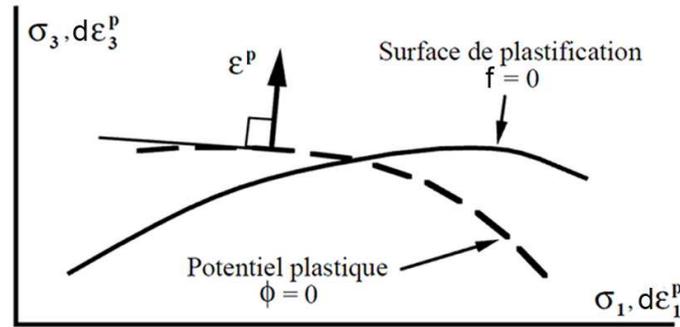


FIG. A.4 – Loi de plastification non associée.

Mais pour les matériaux granulaires, on sait que leur comportement est non associé (i.e., que l'incrément de déformation plastique $d\epsilon^p$ n'est pas perpendiculaire à la surface de plasticité), ce qui induit dans les modèles numériques nombre de difficultés. Pour cette raison mûrement considérée, on utilise souvent des lois d'écoulement non associées à la surface de plasticité mais à une autre surface dénommée potentiel plastique (Φ) sur laquelle l'incrément de déformation plastique est perpendiculaire (voir FIG. A.4). Cette astuce permet de ne pas être en contradiction avec la théorie de la plasticité et d'avoir des modèles qui décrivent correctement le comportement du matériau granulaire.

Les lois élasto-plastiques qui sont les lois de comportement du comprimé ont été appliquées au niveau macroscopique du matériau particulaire. Leur particularité réside dans le fait qu'elles requièrent le développement de modèles de plasticité incrémentaux. Les aspects généraux de la modélisation sont présentés dans la section 1.6. Deux modèles de plasticité incrémentaux utilisés dans la métallurgie des poudres sont à cet effet présentés en détail dans cette section.

Modélisation de la compression de poudre par l'approche continue

Dans la section 1.6 de cette thèse, différents modèles de comportement ont été présentés, l'objectif de cette section est d'examiner les résultats que l'on peut attendre d'une simulation éléments finis de la compression d'une pièce industrielle avec de tels modèles. Pour se faire, différents résultats de modélisation dans ce champ d'application issus de la littérature seront récapitulés. Les différents modèles type Drucker-Prager/Cap ou encore Cam-Clay sont des lois phénoménologiques qui sont intégrées dans des codes de calculs éléments finis pour prédire les distributions de densité et de contraintes pendant la phase de compression et les contraintes résiduelles. Les pièces avec une géométrie compliquée peuvent être modélisées et les différentes propriétés au niveau des outils (i.e., les contraintes appliquées sur les poinçons et la matrice, le rebond élastique des outils) sont observées. L'utilisation de la simulation par éléments finis s'est accrue très rapidement avec le développement de la puissance des ordinateurs. Beaucoup de codes numériques existent comme ABAQUS qui est la référence dans ce domaine, avec ce code industriel il est facile de programmer toute sorte de lois phénoménologiques à travers les routines VUMAT dédiées à cela.

Dans la section suivante, nous présentons les résultats d'une simulation numérique de la compression d'une pièce réalisée par le code ABAQUS à partir du modèle de comportement Drucker-Prager/Cap (voir Sec. 1.6.1.1).

B.1 Modélisation avec le modèle Drucker-Prager/Cap de la compression en matrice d'une pièce industrielle

La compression en matrice de poudre métallique peut être étudiée par la méthode des éléments finis en y intégrant un modèle de comportement représenté par une surface de plasticité. Dans l'étude réalisée par Coube et al., le modèle Drucker-Prager/Cap est modifié dans le but de décrire la formation de fissures au cours de la phase de compression-décharge et de prédire la distribution de la densité au sein de la pièce à vert. Dans la simulation, les propriétés matériaux utilisées seront équivalentes à

celles de la poudre de fer Distaloy AE.

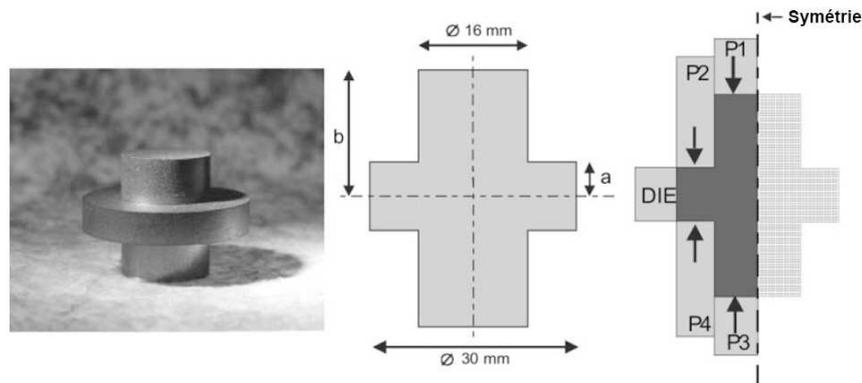


FIG. B.1 – Modélisation éléments finis de la compression d'un pignon de boîte de vitesse en 2D.

Lors de la procédure de fabrication de pièces à forme complexe, on s'aperçoit que la distribution de la densité n'est pas homogène, que l'apparition des fissures peut survenir fréquemment et que les essais pour dimensionner les outils et optimiser le procédé de fabrication sont très coûteux. Pour réduire ces coûts, la modélisation numérique avec le modèle de Drucker-Prager/Cap peut être employée. Le modèle dans sa forme conventionnelle connaît certaines lacunes surtout pour décrire l'apparition de fissures. Dans le cadre de ses recherches, Coube et al. ont modifié ce modèle en y intégrant une surface de fissuration ou de rupture qui dépend de paramètres telle que la cohésion du comprimé. Ils intègrent les phénomènes de diminution des contraintes internes et de localisation qui conduisent à l'apparition des fissures. De plus, pour améliorer la modélisation de la phase décharge, une loi de comportement élastique non-linéaire est intégrée dans le modèle. Plus de détails peuvent être trouvés à la section 1.6.1.1 et où au sein de la littérature [Coube et Riedel (2000)].

TAB. B.1 – Comparaison entre la densité déterminée expérimentalement et numériquement pour cinq sections de la pièce.

Numéro de la section	Densité mesurée mg/m^3	densité numérique mg/m^3
1	6.97	6.97
2	7.02	7.03
3	7.04	7.06
4	6.83	6.83
5	6.78	6.73

La modélisation qui sera présentée dans cette section concerne la compression d'un pignon de boîte de vitesses (voir Fig. B.1). Cette modélisation a été réalisée dans le cadre d'un benchmark avec le réseau européen PM Modnet. Les différents résultats de ce benchmark entre différents laboratoires ont été publiés par le groupe Modnet Technology [Modnet (1999)]. Pour réaliser cette étude la pièce est modélisée en 2D avec un logiciel éléments finis en tenant compte de la symétrie de la pièce. La cinématique de tous les poinçons est réalisée à l'identique avec l'expérimental. Pour valider les résultats numériques, des mesures expérimentales destructives sur la distribution de la densité sont réalisées dans cinq sections de la pièce. Ces différentes mesures sont comparées aux résultats numériques obtenus par la simulation (voir Tab. B.1). On s'aperçoit que pour toutes les valeurs mesurées expérimentalement, les résultats numériques sont en accord avec ces dernières à 1 ou 2% près.

Dans le but de modéliser la fissuration de la pièce, les auteurs ont eut l'idée de modéliser un test de cisaillement pur. Cet essai peut être réalisé, car les quatre poinçons P1 à P4 (voir Fig. B.1)

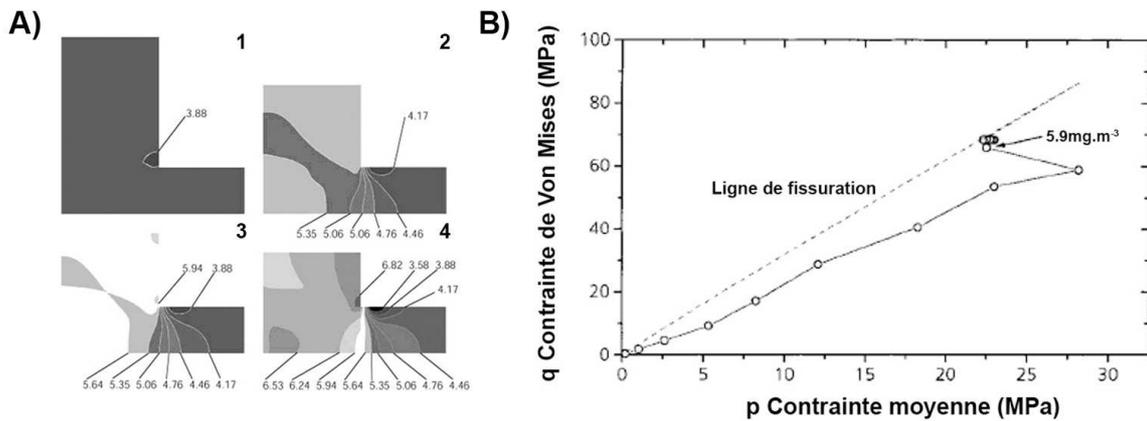


FIG. B.2 – A) Distribution de la densité obtenue numériquement à différentes étapes du test de cisaillement pur (1-4). B) Une courbe dans le plan p-q qui représente l'état de contrainte de la zone proche du coin de la pièce (coin formé par le corps et le bord) tout au long du test de cisaillement

sont indépendants les uns des autres. Dans un premier temps, la pièce est pré-comprimée jusqu'à une densité homogène de 3.88 mg/m^3 , puis dans un deuxième temps les poinçons P2 et P4 sont bloqués tandis que les poinçons P1 et P3 restent en mouvement. Le but est ainsi de réaliser une compression déséquilibrée et donc de générer du cisaillement pour déclencher des fissures au cours de l'essai. La figure B.2A montre l'évolution de la distribution de la densité au cours de l'essai. Comme une conséquence directe du mouvement non proportionnel des poinçons, le corps et le bord (i.e., au niveau du coin) de la pièce développent des valeurs de densités moyennes différentes avec un gradient de densité comme transition entre les deux zones. La courbe dans le plan p-q à la figure B.2B représente l'état de contrainte présent au niveau du coin de la pièce tout au long de l'essai de cisaillement. Cette courbe montre parfaitement que quand la densité moyenne excède 5.9 mg/m^3 , l'état de contrainte atteint la ligne de fissuration du modèle Drucker-Prager/Cap et qu'à partir de là, la fissuration du comprimé est amorcée. Un phénomène qui va de pair avec la diminution de la densité moyenne au cours de l'essai au niveau d'une zone proche du coin formé par le corps et le bord de la pièce (voir FIG. B.2A)

En conclusion, le but d'une telle expérimentation est de prédire la distribution de la densité du comprimé et l'apparition des fissures par des simulations numériques éléments finis avec des modèles phénoménologiques. La partie la plus simple de cette étude est la prédiction de la distribution de la densité. Cet objectif est aisément atteint par l'approche continue avec le modèle Drucker-Prager/Cap, dont les résultats sont en accord total avec les résultats expérimentaux pour une pièce industrielle (pignon de boîte de vitesses) simplifiée. La partie la plus ambitieuse de l'étude menée avec l'approche continue est la prédiction de l'apparition de fissures pendant la phase de compression et d'éjection.

Pour ce faire le modèle de Drucker-Prager/Cap a été modifié, car les simulations avec ce type de modèle donnent de bons résultats pour des essais de cisaillement pur. Cependant des études montrent que le modèle doit encore être amélioré pour prédire l'apparition de fissures dans des cas de chargements plus réalistes, comme ceux qui surviennent au cours du procédé industriel. Pour l'heure ces modèles peuvent indiquer uniquement la probabilité que des fissures apparaissent au cours de la phase de compression ou d'éjection. Pour une grande majorité des chercheurs, la restriction la plus pénalisante avec ce type de modèles employé par l'approche continue est le fait qu'ils soient incapables de prendre en compte l'historique du chargement subit par le comprimé. En sachant cela, si on fait de la prédiction sur la fissuration du comprimé, les modèles macroscopiques passent au travers d'un bon

nombre de fissures qui apparaissent suites aux différents types de chargements que la poudre subit de sa mise en place dans la matrice jusqu'à la phase d'éjection.

La structure numérique de la méthode éléments finis multi-particules

Soucieux de préserver à la fois les avantages acquis de l'approche continue intégrée à la méthode des éléments finis et de l'approche discrète, une méthode particulière basée sur une approche discrète maillée a émergée au travers de travaux plus récents. Elle est désignée dans la littérature sous le nom de méthode des éléments finis multi-particules (MEFMP) ou méthode des éléments discrets maillés (MEDM). Il importe de souligner la particularité qui caractérise cette nouvelle approche. Avec cette méthode couplant éléments finis/éléments discrets, chaque particule est décrite comme un corps continu déformable, les mouvements des particules ainsi que leurs interactions étant calculés de manière analogue à l'approche MED en se basant sur un schéma de résolution explicite proche à la méthode des éléments finis.

C.1 Généralités

Pour chaque particule discrétisée en un certain nombre d'éléments finis (densité de maillage), les forces internes sont déterminées via la méthode des éléments finis et une loi phénoménologique associée au maillage. De nombreux modèles de comportement du matériau sont actuellement disponibles, comme par exemple des lois hyper-élastique, élasto-plastique ou encore visco-plastique. Pour simuler la compression à température ambiante, les lois de type élasto-plastique fournissent une description correcte (voir Eq. C.1).

$$\sigma = K(\epsilon_{plas})^{\frac{1}{m}} + \sigma_y \quad (\text{C.1})$$

Où σ , ϵ , K , m et σ_y sont respectivement: la contrainte (MPa), la déformation, la rigidité du matériau (MPa), le coefficient d'écrouissage et la limite élastique du matériau (MPa).

Dans le code de calculs élément finis ABAQUS, on utilise donc une loi élasto-plastique pour modéliser le comportement de ces particules. Cette loi composée d'une partie élastique est premièrement définie par le module d'Young (E) et le coefficient de Poisson (ν) du matériau étudié sélectionné. Concernant la partie plastique du comportement, celle-ci est renseignée sous la forme de fonctions linéaires par morceaux sur l'ensemble du domaine de déformation ("yield stress - plastic strain") suite à l'utilisation de l'équation C.1.

C.2 Le schéma de résolution numérique de la méthode

Le calcul des déformations et des contraintes est réalisé à l'échelle de chaque particule (échelle microscopique). Cette stratégie de résolution conduit à inverser des matrices de petites tailles, ce qui est peu coûteux en termes de temps de calcul par rapport à l'inversion d'une seule matrice de grande taille comme cela est fait dans le cadre d'une approche continue macroscopique. Le schéma numérique de résolution est basé sur un algorithme de type explicite qui intègre les équations régissant les mouvements des particules en fonction du temps (voir Eq. C.2).

L'équation dirigeant le mouvement d'une particule peut être écrite sous une forme générique:

$$M\ddot{u} + C\dot{u} + Ku = F \quad (\text{C.2})$$

où K , M et C sont respectivement les matrices de: rigidité, masse, amortissement et F est la contribution des forces extérieures, efforts internes et des forces de contacts qui sont appliquées sur une particule.

Pour chaque pas de temps, le calcul des efforts est fait à l'échelle des particules et l'inversion des matrices se fait particule par particule. Cette méthode peut conduire le schéma de résolution à converger sur de mauvaises solutions, c'est-à-dire à converger vers des solutions numériques associées à un déséquilibre mécanique entre les particules en contact. Ces solutions pour lesquelles les forces ne sont pas en équilibre sont générées par le processus d'inversion, en effet les inversions des matrices associées aux particules ne sont pas réalisées de manière concomitante.

Afin de calculer correctement les forces et de respecter les conditions propres au calcul quasi-statique (procédure prédictive- correctrice), il a été introduit dans le schéma de résolution une boucle itérative sur chaque particule et à chaque pas de temps, Cette astuce numérique tend parallèlement à augmenter la durée nécessaire à la réalisation de la simulation.

La valeur attribuée à l'amplitude du pas de temps est un autre élément propre au schéma de résolution qui influe sur la durée de la simulation. Dans le cas des simulations intégrant un comportement plastique, le pas de temps doit être fortement diminué de sorte à assurer que les amplitudes respectives des mouvements des particules et des interpénétrations entre particules soient inférieures au millième de la taille de la plus petite particule [Frenning (2008)].

Cette présentation des principes de résolution numériques associés au schéma de type explicite nécessaire à l'approche par éléments finis multi-particules met en relief les contraintes inhérentes à cette approche en termes de temps de calculs. Ainsi, la procédure prédictive-correctrice nécessaire au

respect du principe mécanique de quasi-équilibre des grains est coûteuse en temps de calcul, et ce de manière proportionnelle lorsque de grandes déformations et un comportement plastique sont caractéristiques du comportement simulé pour les particules. Afin de comprendre le fonctionnement complet d'une telle méthode de simulation, il convient maintenant de présenter l'algorithme de détection des contacts intégré dans la MEFMP. La détection des contacts est pour toutes les approches discrètes la fonction générique la plus importante du calcul mais aussi la plus consommatrice en temps de calcul. Suite à cette présentation une vue d'ensemble de toutes les procédures et contraintes induisant des temps de calculs volumineux sera obtenue.

C.3 La détection des contacts

La détection des contacts est une fonction capitale dans la détermination des interactions entre les particules. Pour un ensemble de N particules comportant chacune n nœuds constitutifs de leurs maillages, il n'est pas approprié de tester si toutes les paires possibles de nœuds sont en contact. Si une telle méthode de détection était appliquée, le temps de calcul nécessaire à la détection des contacts serait quadratique $O((n \times N)^2)$ à ces deux valeurs. Afin d'éviter un coût de calcul prohibitif à cette étape, de nombreuses versions d'algorithmes de détection des contacts ont été développés dans la littérature. Il demeure que les algorithmes à ce jour opérationnels fonctionnent sous couvert du respect de certaines conditions (i.e., si les particules sont sphériques, polyédriques, rigides ou non, ...). Dans le cadre de simulations avec des sphères (3D) ou des cylindres (2D) déformables, la détection des paires en contact se fait en deux étapes [Fujun *et al.* (2000)].

La première étape consiste à discrétiser tout l'espace du domaine étudié par des cellules cubiques ijk (3D) (voir Fig. C.1) ou en carré ij (2D) et de répertorier à quelle cellule appartient chaque élément de type nœud positionné sur la surface de chaque particule. Pour connaître l'appartenance d'un nœud à une cellule ijk , il suffit simplement de diviser les coordonnées (x,y,z) du nœud par la valeur D (i.e., $i=\text{int}(\frac{x}{D})$, $j=\text{int}(\frac{y}{D})$, $k=\text{int}(\frac{z}{D})$) qui est la longueur d'une arête des cellules. Lorsque tous les nœuds sont affectés dans une cellule, une liste des particules potentiellement en contact est construite. La détection des contacts par l'intermédiaire de cette liste repose alors sur le principe que deux particules sont potentiellement en contact, si et seulement si elles possèdent des nœuds dans une cellule commune ou dans deux cellules voisines proches. L'algorithme de détection intègre ainsi une boucle parcourant cette liste afin de trouver si il y a un contact ou une interpénétration (nœud-surface ou nœud-nœud) entre deux particules.

Dés lors que les valeurs des amplitudes d'interpénétrations sont calculées comme non nulles, la force de contact normale nécessaire pour annihiler ces interpénétrations peut être estimée. L'estimation de cette force normale se fait par rapport aux travaux de Wang *et al.*, [Wang *et al.* (2007)]. Une fois les contributions de toutes les surfaces en contact prises en compte, une nouvelle interpénétration est calculée et la force initiale estimée est ainsi corrigée. Dans cette seconde étape, la valeur des forces tangentielles dues au frottement et à la cohésion sont également calculées.

Précisons que la structure numérique de la méthode des éléments finis multi-particules comporte une démarche optimisée pour le calcul des forces de contacts dans le but de réduire le temps de calcul. Naguère sans l'utilisation d'algorithmes de détection des contacts efficaces, le temps de calculs était quadratique en fonction des paramètres N et n .

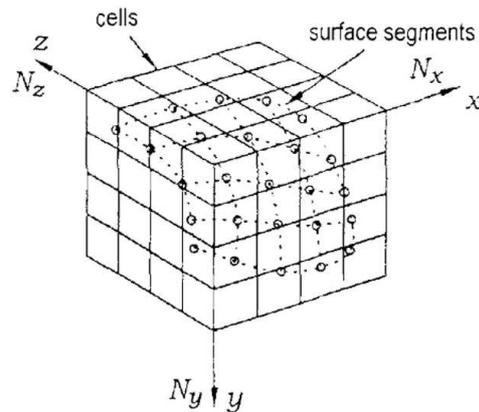


FIG. C.1 – Les nœuds appartenant à une même surface répartis dans plusieurs cellules.

Depuis l'avènement des algorithmes spécifiques de première génération, comme par exemple l'algorithme [Hallquist (1997)] associé à des temps d'exécution de l'ordre de $O((n \times N)\log(n \times N))$ ont été implantés dans les schémas de gestion des contacts de type maître-esclave et de simple surface en contact que l'on retrouve dans le logiciel ABAQUS. Pour l'algorithme récent présenté dans cette section et intégré dans le logiciel développé par Frenning [Frenning (2008)], le temps de détection des particules en contact est linéaire, c'est-à-dire de l'ordre de $O(n \times N)$. Cette caractéristique a donc nettement amélioré le coût de calcul de la méthode éléments finis multi-particules. Malgré tout, si le même algorithme de détection de contact est utilisé dans les simulations de type MED et MEFMP, ce qui est le cas, il demeure que la détection des contacts s'opère plus rapidement d'un facteur n au profit de la MED qui ne met pas en œuvre de maillage des particules. De plus, les simulations exécutées avec la méthode MEFMP n'ont pas pour autant un coût en calcul linéaire au sens de la seule dépendance au facteur n car ce temps de calcul dépend globalement à la fois de la taille des particules, de la densité du maillage, du type d'éléments finis, mais également du nombre de surfaces en contact.

Le temps de calcul est finalement le paramètre clé pour ces simulations qui portent sur l'étude du comportement granulaire au travers d'une description discrète du milieu. Dans les cas où les temps de simulation deviennent trop importants, cela peut conduire à la relégation au second rang d'une méthode de calcul aussi performante soit elle par rapport à une méthode bien plus rapide mais moins précise, comme c'est le cas entre la MEFMP et la MED. Pour comprendre tout ce qui influe sur le temps de calculs d'une méthode aussi performante que la MEFMP, il convient de présenter l'algorithme de détection des contacts qui est l'une des fonctions les plus critiques en terme de besoin en temps de calcul de cette méthode.

La nécessité d'une étude comparative s'impose donc afin d'appréhender concrètement les temps de réalisation des simulations de compression d'un assemblage de particules déformables et de vérifier aussi l'efficacité de la MEFMP dans l'étude de ce procédé. Cette intention trouvera son expression dans la prochaine section où seront présentés différents résultats numériques 2D trouvés dans la littérature et 3D repris des travaux de Chen [Chen (2008)][Chen *et al.* (2007a)].

L'étude de la compression de poudres en 2D par la MEFMP

Une des études les plus riches réalisées avec l'approche MEFMP en 2D est celle proposée par Procopio et Zavaliangos [Procopio et Zavaliangos (2005)]. Cette étude porte sur la compréhension des phénomènes physiques activés lors de la compression quasi-statique de cylindres de même taille. Cette analyse a été exécutée à l'aide du code éléments finis ABAQUS sur des échantillons générés par un algorithme de déposition balistique (cf. voir chapitre 4). Les simulations consistent en un ensemble de sollicitations bi-axiales appliquées à des empilements par différents chemins de chargement. La loi associée au matériau constitutif des particules cylindriques correspond à un comportement élastique parfaitement plastique avec un rapport $\frac{E}{\sigma_y}$ égale à 100 et un coefficient de poisson $\nu = 0.3$. Concernant les paramètres de cohésion et de frottement entre les particules, ils ont été ajustés pour chaque cas de calcul.

Deux aspects principaux conditionnent la taille globale du modèle numérique à simuler. Le premier concerne les particules individuelles. En effet, chaque particule est considérée comme un corps solide élasto-plastique sur lequel il convient d'attribuer un maillage. La recherche d'un maillage optimum a été produite de sorte à pouvoir simuler correctement les déformations élasto-plastiques sans recourir à un nombre d'éléments finis trop excessif par particule. Les maillages les plus optimum présente à ce titre des éléments finis de petites tailles à la périphérie circulaire de la section du cylindre figurant la particule, les éléments finis de plus grande taille étant présents dans la région du centre de cette section. Le second aspect est relatif au nombre de particules composant l'empilement sollicité, ce paramètre important va influencer directement sur le temps de calcul car il participe aussi à la définition de la taille global du cas numérique à simuler. Ainsi le nombre de particules doit être choisi le plus petit possible, parallèlement une diminution drastique de ce nombre de particules peut conduire à une non représentativité du comportement mécanique global de l'empilement. Afin d'établir un choix judicieux, les auteurs ont réalisé une étude paramétrique dédiée à l'influence du nombre de cylindres sur les résultats de comportement de l'assemblage (i.e., l'évolution des contraintes Σ_x , Σ_y , Σ_z résultant de la compression de l'échantillon) et sur le temps de calcul lors d'une compression uniaxiale (voir Fig. D.1), afin de faire un choix judicieux.

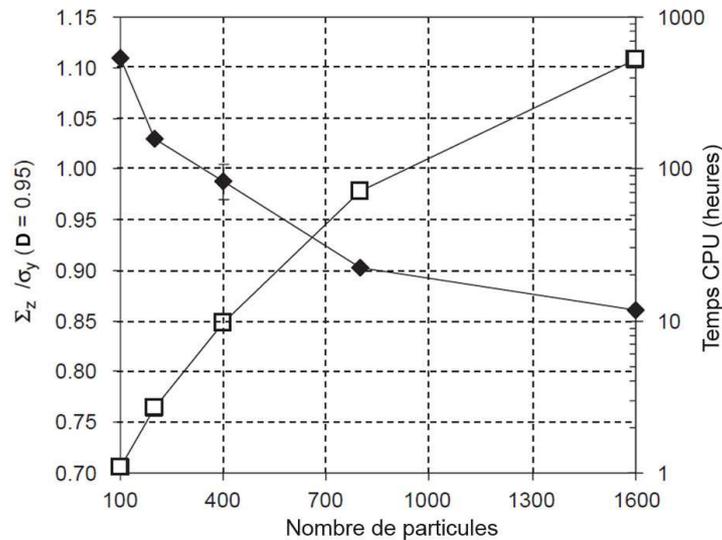


FIG. D.1 – L'étude de la réponse mécanique d'un empilement de cylindres déformables comprimés à une compacité de 0.95 en fonction du nombre de particules. Dans cette figure est également inclu le temps de calcul pour chaque empilement comprimé.

Cette figure D.1 montre que le temps de calcul (Temps CPU) exprimé en heure évolue très rapidement en fonction du nombre de particules (facteur 500 entre deux empilements composés respectivement de 100 et 1600 particules) comprimé en matrice. De sorte à choisir un nombre de particules représentatif du milieu granulaire réel, Procopio se réfère à la convergence de la réponse de la sollicitation globale exprimée en contrainte normée $\frac{\Sigma_z}{\sigma_y}$ en fonction du nombre de particules. Ainsi partant d'une situation de compression en matrice, l'analyse porte sur les variations de niveau (en fonction du nombre de particules) de la contrainte normée $\frac{\Sigma_z}{\sigma_y}$ appliquée après déplacement sur le poinçon supérieur pour une compacité finale (compacité) fixée à $D = 0.95$.

Le critère utilisé par l'auteur pour déterminer la taille finale de l'empilement numérique est basé sur le ratio (Temps CPU/Précision de la réponse) le plus faible possible. D'après ce critère, pour un empilement de 800 cylindres, la réponse en contrainte est proche de celle d'un empilement avec deux fois plus de particules pour un temps de calcul encore raisonnable. Le critère fixé semble ainsi être validé pour un empilement de 800 particules, une validation qui n'est autre que qualitative. Cette démarche dédiée à l'identification du plus petit empilement représentatif du comportement mécanique du milieu granulaire est une méthode efficace pour s'assurer d'obtenir des résultats réalistes pour un temps de calcul optimisé. Dans le chapitre 3, nous discuterons plus en détail d'un critère pour la détermination d'un volume élémentaire représentatif

Les résultats des différentes simulations exposés aux figures D.2-A, D.2-B et D.2-C représentent des courbes contrainte-compacité pour différents chemins de chargement de l'assemblage numérique 2D. Dans chaque figure, il est possible de repérer respectivement les valeurs des contraintes (Σ_z) et latérale (Σ_x) normées par la limite d'élasticité (σ_y) pour un essai réalisé avec un coefficient de frottement (μ) nul ou égale à 0.192. De ces essais numériques, il ressort que l'empilement sans frottement ($\mu = 0$) a une réponse en contrainte plus faible par rapport au même essai avec frottement ($\mu = 0.192$) cette observation étant plus particulièrement explicite en début de compression. Ce type d'observation faite par Procopio et Zavaliangos va dans le sens de ce que Redanz et Fleck [Redanz et Fleck (2001)]

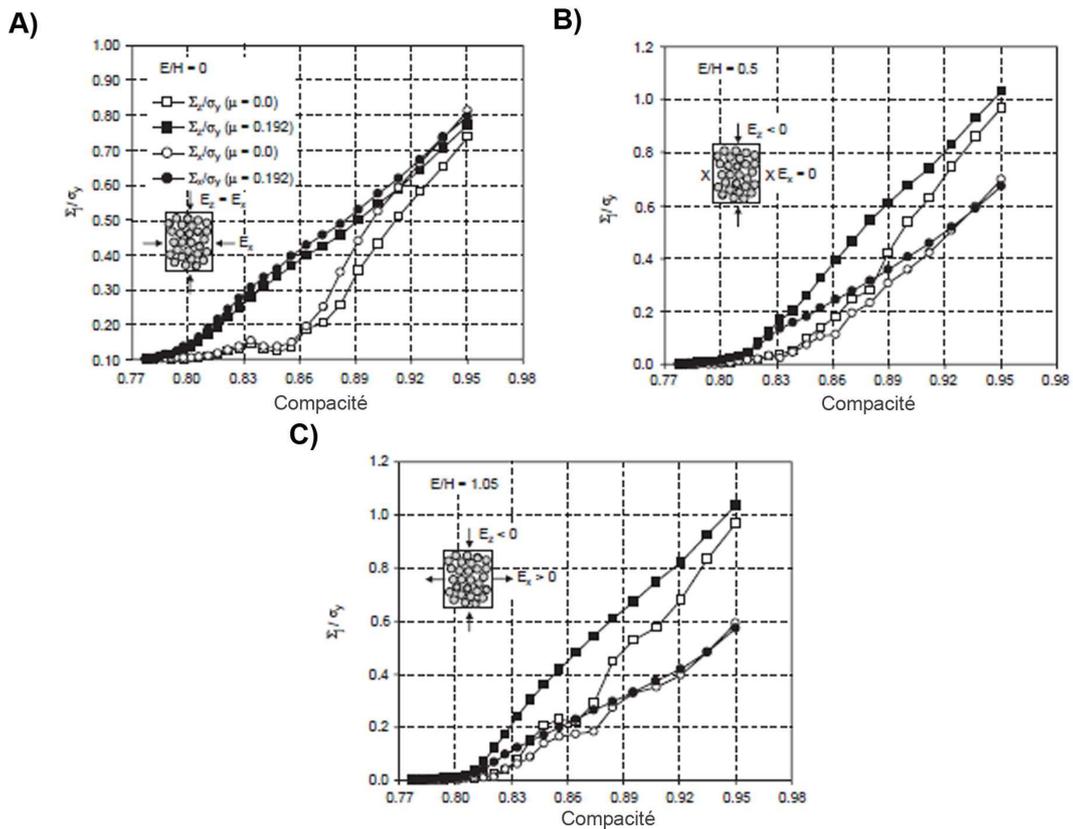


FIG. D.2 – Résultats de simulations (contrainte-densité relative) en 2D de particules déformables avec $\mu = 0$ et $\mu = 0.192$ suivant 3 chemins de chargements différents: A) Compression isostatique. B) Compression en matrice. C) Compression uniaxiale.

(voir Sec. 1.7.3) ont observé dans leurs travaux sur la compression d'échantillons similaires avec la méthode des éléments discrets. Dès lors que de fortes compacités sont atteintes, l'effet de l'incompressibilité plastique du matériau constitutif couplé à la faible mobilité des particules constitue une part prépondérante de la réponse mécanique ce qui conduit à des niveaux de contrainte équivalents pour les cas avec et sans frottement.

Cette richesse des réponses simulées en début de compression s'explique en grande partie par la capacité de l'approche discrète à pouvoir traduire le phénomène de réarrangement inter-particulaire lors de la compression. En effet avec un coefficient de frottement nul, les déplacements et les rotations relatifs des grains par rapport aux autres sont beaucoup plus accentués. Ceci engendre une réponse en terme de contraintes beaucoup plus faible sur les parois: ce qui est qualitativement en accord avec les résultats expérimentaux [Lee (1998)]. Toutefois dans l'article de Procopio et Zavalingos [Procopio et Zavalingos (2005)], il est clairement démontré que même si les deux méthodes (MED et MEFMP) parviennent à objectiver le même phénomène, la méthode qui prend en compte la déformation des particules (MEFMP) obtient une réponse moins élevée aux faibles densités et plus précise dans les hautes densités que celle calculée par la MED. Ces différences au niveau des résultats sont désormais bien connues et identifiées par la littérature. Pour preuve, l'utilisation par la MED de lois de contact restrictives avec une formulation qui ne dépend que d'un seul paramètre (l'interpénétration ou l'indentation) ne permet pas de reproduire tous les phénomènes présents (voir Sec. E) et surtout pas l'influence des nouveaux contacts (existence de surface significative par rapport au rayon et influence

des champs de contrainte associés) qui apparaissent lors d'une compression à haute densité.

Concernant la méthode des éléments finis multi-particules, cette méthode prend en compte le mouvement des particules en contact qui résulte du glissement au niveau des surfaces de contact et des actions diverses dues aux déformations des grains voisins, d'où la réduction significative de la force entre les particules. Evidemment des tels phénomènes sont plus facilement capturés par la MEFMP qui est capable de parfaitement reproduire le contact entre particules sans faire d'hypothèses simplificatrices sur la géométrie du contact.

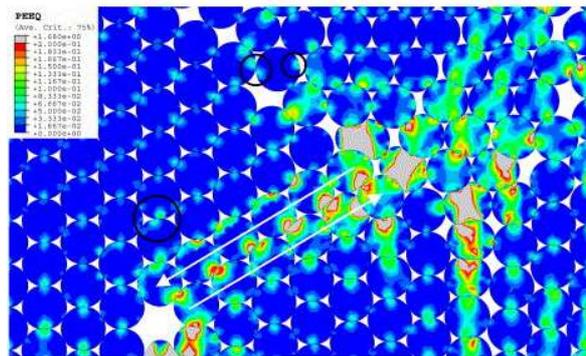


FIG. D.3 – Agrandissement d'une microstructure de particules 2D déformables comprimées à une densité relative de 0.93. On observe la non-uniformité des contraintes dans l'empilement et les deux types de contact local: plastification et glissement.

De plus la méthode des éléments finis multi-particules possède un autre atout majeur qui est sa capacité à donner des informations détaillées sur l'état de contraintes et de déformations au niveau des différents points de contact ainsi que dans la matière constitutive des particules. La figure D.3 présente un échantillon 2D comprimé à une densité relative de 0.93, la distribution des contraintes mise en relief revêt un caractère non uniforme dans l'assemblage. L'intérêt de l'analyse détaillée des contraintes développées au sein de chaque particule consiste en l'identification de certaines essentiellement sollicitées en traction ou cisaillement malgré un chargement macroscopique typique d'un état de compression. Par ailleurs, grâce à l'observation de cette structure granulaire déformée deux types de contact sont mis en évidence: le contact plastifiant et le contact glissant. Ces deux types de contact jouent un rôle prépondérant à haute densité.

Avec cette méthode MEFMP qui permet le couplage entre éléments finis et éléments discrets, il est désormais possible d'accéder à des informations capitales au niveau de la microstructure. Une telle efficacité doit être potentiellement encore plus probante pour simuler les comportements en compression d'empilements tridimensionnels proches des situations expérimentales, voire même industrielles.

Les modèles de contacts adaptés aux stades 0 et 1 de la phase de compression de la poudre

Il semble d'ores et déjà acquis au sein de la communauté scientifique que la loi de contact de Hertz (i.e., loi de contact élastique non linéaire par rapport aux déplacements normaux) est la plus adaptée pour la simulation du comportement du matériau au stade 0 via la méthode des éléments discrets (voir chapitre 3). Il est donc inutile de chercher une nouvelle loi pour ce stade, l'intérêt pour tous ceux qui utilisent cette méthode de simulation est d'intégrer la loi de Hertz dans les modèles analytiques de contact. La loi de Hertz fournit donc une référence pour décrire en stade 0 l'évolution suivant une direction normale, par ailleurs de nombreux travaux spécifiques à la MED concerne des perfectionnement du comportement entre grain suivant une direction tangentielle.

A partir de ce stade 1 les contacts qui apparaissent ont un comportement plastique, ils sont créés par un impact entre une bille avec un autre corps (bille, plan, ...) ou en début de stade 1 par compression dans des conditions quasi-statique. Un certain nombre d'auteurs positionnent parfois l'élaboration et l'utilisation de lois de contact dans le cadre de l'étude de la dynamique des écoulements granulaires, ce type d'études impliquant a priori des chocs et des impacts. Dans la suite de ce paragraphe les lois présentées peuvent aussi être mise en œuvre en stade 1 dans des conditions de chargement quasi-statiques car elles ne présentent pas de composantes visqueuses.

Une fois que la force de contact dépasse la force associée à la limite d'élasticité F_y (voir FIG. E.1-B), le comportement mécanique du contact ne suit plus la loi de contact de Hertz (i.e., un comportement élastique non linéaire) mais une loi de contact élasto-plastique. Pour les matériaux ductiles comme le plomb, le fer, le cuivre ou l'aluminium, les particules se déforment dans un premier temps élastiquement, mais très rapidement pour de très faibles valeurs de h par rapport à R surviennent les déformations plastiques irréversibles. Ce comportement plastique se traduit par l'apparition de zones à faibles déformations irréversibles du matériau qui résultent d'un incrément de force ou de pression relativement faible.

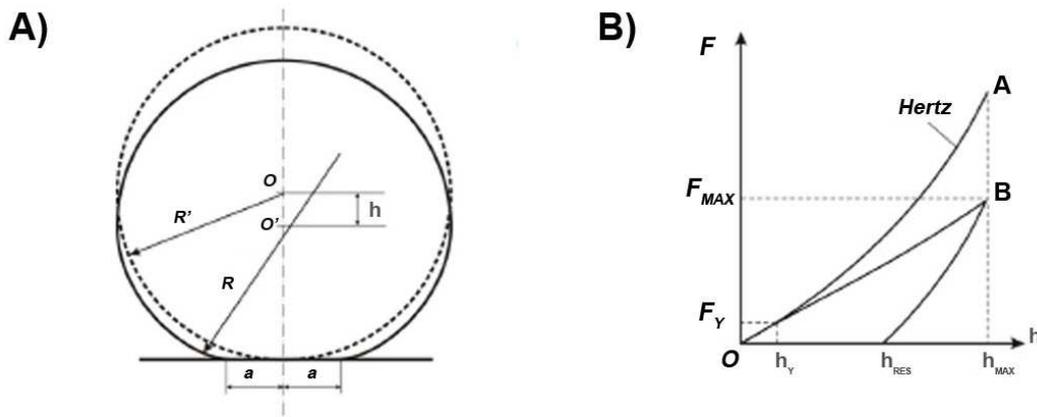


FIG. E.1 – Contact entre une sphère et un plan rigide. A) La sphère initiale avant contact et la sphère déformée après contact. B) La relation entre la force (F)-déplacement (h) représente la loi de contact normale.

La figure E.1-A montre une particule sphérique de rayon R se déformant sur un plan rigide qui représente ainsi les conditions de symétries de deux sphères venant en contact suivant la direction qui relie leurs centres. Au début de l'indentation, une force F apparaît entre la particule et le plan. Puis la surface d'indentation (πa^2) associée au déplacement (h) entre la sphère et le plan augmente au fur et à mesure avec l'apparition d'une surface de contact circulaire de rayon a (voir FIG. E.1-A). Ensuite la particule rebondit et s'éloigne du mur. La relation entre F et h est dictée par une loi de contact normale force-déplacement (NFD) (voir FIG. E.1-B).

Dans le cas du stade 1, les particules s'indentent avec un rapport $\frac{h}{R}$ petit (10^{-5}) mais assez important pour initier un comportement élasto-plastique au contact. Afin de reproduire par la simulation discrète ce phénomène de choc et de rebond de la particule, bien souvent les chercheurs utilisent un modèle basé sur des sphères de taille unique.

$$P = \begin{cases} k_1 h & \text{pour la charge} \\ k_2 (h - h_{RES}) & \text{pour la décharge} \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

Leur but est de représenter le comportement au contact de deux sphères par une loi de contact normale force-déplacement (i.e., $F = fct(h)$) élasto-plastique en s'aidant pour la plupart de la théorie de Hertz pour la partie élastique du modèle. Une exception peut être cependant soulignée pour le cas de la loi bilinéaire proposée par Walton et Braun [Walton et Braun (1986)], en effet le comportement élasto-plastique non-linéaire correspondant à cette loi est approximé par une droite de raideur k_1 pour la charge et de raideur k_2 pour la décharge (voir Eq. E.1). L'intérêt de la loi proposée par Walton et al. est sa simplicité d'écriture (voir Eq. E.1) et d'intégration dans les simulations MED. Précisons que les coefficients k_1 et k_2 sont des coefficients constants qu'il faut calibrer et ajuster à l'aide de résultats expérimentaux dédiés à des sphères car ils n'intègrent aucun paramètre caractéristique du matériau constitutif des grains. A l'évidence, ils ne sont pas complètement adaptés et ne peuvent correctement reproduire la phénoménologie du contact lorsqu'il a plastifié, d'où un coefficient de restitution numérique (i.e., rapport de la vitesse après rebond sur la vitesse avant impact) erroné après le choc entre la sphère et le plan rigide.

D'autres lois de contact normale reliant la force et le déplacement sont proposées par exemple par des chercheurs tels que Thornton [Thornton (1997)], Tsuji et al., [Tsuji *et al.* (1993)], l'utilisation

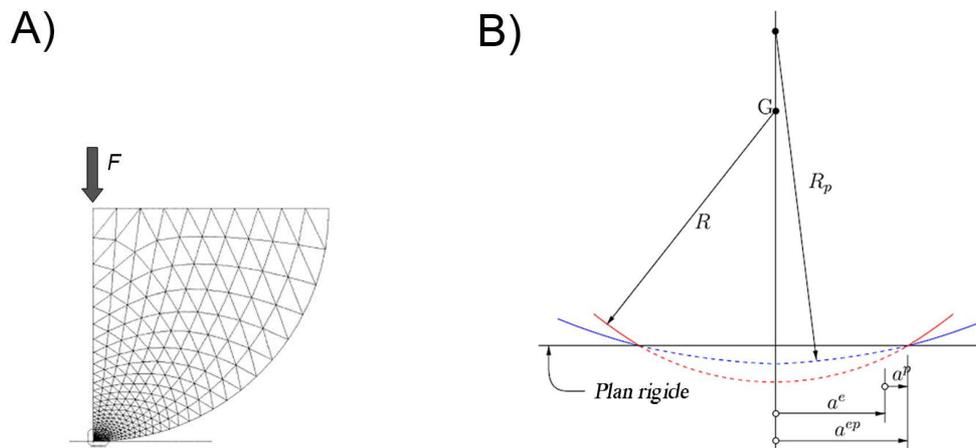


FIG. E.2 – Étude numérique du rayon de contact et décomposition de celui-ci en deux parties. A) Simulation éléments finis axisymétrique d'un contact normal de sphères identiques. B) La déformation plastique au contact provoque l'augmentation local du rayon de courbure de la sphère au niveau de la surface de contact.

de ces lois impliquant également des procédures de calage de paramètres) [Ollagnier *et al.* (2007)]. Ces lois créées à partir de différentes raideurs et de coefficient d'amortissement (voir chapitre 3) font office de nouveaux modèles par rapport au modèle de Walton *et al.* Elles sont capables de prendre en compte la dissipation de l'énergie due à la plastification de la zone de contact lors du choc et reproduisent de ce fait la diminution du coefficient de restitution pour une augmentation de la vitesse à l'impact. Cependant, par rapport aux résultats expérimentaux et aux analyses éléments finis, les résultats donnés par ces lois sont imprécis. Il convient de souligner que ces lois développées uniquement sur le concept ressort-amortisseur ne sont pas associées à des procédures systématiques de calibration et d'identification des valeurs numériques à attribuer aux différents paramètres (raideur, coefficient d'amortissement). Pour cette raison, la pratique de l'approche MED conduit à une calibration de ces paramètres au regard du comportement global d'empilements plutôt que d'une identification préalable de ces paramètres pour des situations n'impliquant qu'une seule particule ou un ensemble très restreint de particules comme cela semblerait logique au premier abord dès qu'il s'agit de calibrer une loi de contact locale.

Dans le but d'avoir un modèle de contact plus précis Vu-Quoc *et al.* [Vu-quoc et Zhang (1999)] propose un modèle élasto-plastique à partir d'une étude éléments finis menée sur une sphère en contact avec un plan rigide (voir FIG. E.2-A). Pour cela une simulation axisymétrique 2D par éléments finis a été exécutée avec une loi élastique parfaitement plastique intégrée aux éléments constituant d'un cylindre en aluminium de rayon 100mm , les caractéristiques du matériau étant bien déterminé. A partir de cette simulation les auteurs ont observé la réponse au contact sous la forme d'une courbe force-déplacement pour un matériau bien précis l'aluminium. Ils se sont aperçus que le calcul élément finis suit très bien la loi de Hertz jusqu'à une valeur F_y (limite d'élasticité) pour ensuite décrire une courbe non-linéaire différente de la réponse de la loi analytique de Hertz (voir FIG. E.3). Le comportement prédit par la simulation élément finis dans le domaine élasto-plastique est naturellement associé à des forces de contact inférieures à la prédiction purement élastique de Hertz (voir FIG. E.3).

L'autre observation que les chercheurs vont faire à partir de la simulation éléments finis est la

décomposition du rayon de contact en une partie élastique et plastique (i.e., rayon de contact elasto-plastique $a^{ep} = a^{el} + a^{pl}$) où a^{el} est issu de la loi de contact de Hertz (voir FIG. E.2-B). Cette décomposition se justifie par le fait que lorsque la plastification intervient au niveau du contact, il y a apparition d'une déformation résiduelle au niveau de la surface de contact. Ainsi Vu-Quoc propose la loi de contact plastique suivante:

$$a^{pl} = \begin{cases} C_a(F - F_Y) & \text{pour la charge} \\ C_a(F_{max} - F_Y) & \text{pour la décharge} \end{cases} \quad (\text{E.2})$$

Grâce à la connaissance préalable de la courbe $(F-a^{pl})$ obtenue par la simulation éléments finis, les auteurs ont pu trouver une relation $a^{pl}=\text{fct}(F)$ (voir Eq. E.2 intégrant deux constantes $C_a(N.m-1)$ qui représentent la géométrie, mais également le matériau de la sphère ainsi que F_Y la limite d'élasticité. Afin de remonter à l'écriture de la loi de contact plastique force-déplacement ($F=\text{fct}(h)$), une seconde relation connue depuis l'écriture de la théorie de Hertz est employée : $h = \frac{a^2}{C_R.R}$ pour être réinjectée dans l'équation E.2.

Ainsi le modèle de contact élasto-plastique de Vu-Quoc est basé sur la loi de Hertz et une loi de contact plastique calibrée à partir de l'analyse d'une réponse mécanique simulée par une approche éléments finis. En effet comme la partie plastique du modèle de contact contient certaines constantes (C_a, C_R) qui dépendent des paramètres matériaux, il est envisageable de calibrer ces constantes à partir d'une simulation éléments finis. Techniquement le modèle de Vu-Quoc serait donc complet avec l'identification d'une loi de contact pour le stade 0 et d'une autre loi pour le stade 1. De sorte à faire aboutir complètement cette démarche, il est nécessaire d'identifier la limite entre les deux lois de contact associée à la valeur F_Y , celle-ci dépendant des caractéristiques du matériau. A cet égard les auteurs ont utilisé le critère limite de plasticité de Von Mises:

$$F_Y = \frac{\pi^3 R^2 (1 - \nu^2)^2}{6E^2} [A_Y(\nu)\sigma_Y]^3 \quad (\text{E.3})$$

Avec $A_Y(\nu)$ un scalaire dépendant du coefficient de Poisson.

Concernant les résultats de la loi normale force-déplacement développée par Vu-Quoc des comparatifs avec des résultats éléments finis et la loi de Thornton peuvent être trouvés dans tous les articles écrits par Vu-Quoc (voir FIG. E.3). Ils démontrent sans contestation aucune l'efficacité de cette loi de contact par rapport aux lois de contact MED aux lois de contact les plus couramment utilisées par l'approche MED comme par exemple la loi de Thornton.

Si on prend le temps de récapituler cette démarche, on s'aperçoit que de plus en plus les nouvelles lois de contact MED suivent en général toute la même procédure, à savoir:

- Expression1: Identifier l'évolution de la force de contact F qui est une intégration de la pression de contact P distribuée sur toute une surface de contact avec a le rayon de contact.
- Expression2: Relier par une fonction analytique le paramètre d'interpénétration (h) avec le rayon de contact (a).
- Déterminer la loi de contact normale force-déplacement en éliminant le rayon de contact dans la première expression avec l'expression 2 pour ainsi faire apparaître le paramètre h .

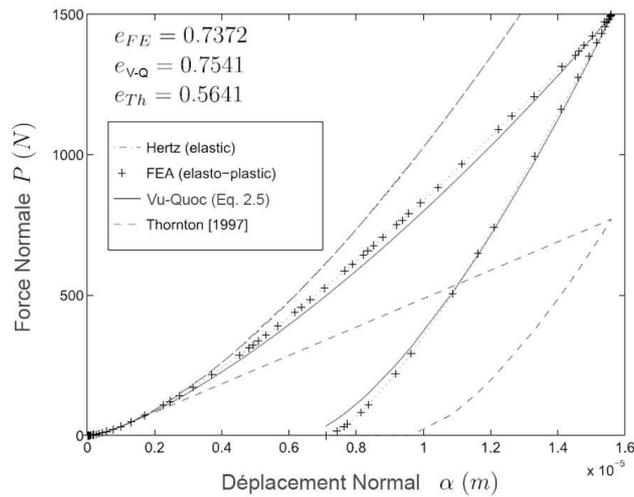


FIG. E.3 – Courbes de la force normale P en fonction de la valeur de l'indentation entre la sphère et le plan. Ces courbes sont obtenues par simulation éléments finis et à partir de différents modèles (Hertz et Vu-Quoc). Le coefficient de restitution obtenu par le modèle de Vu-Quoc e_{V-Q} est très proche de celui réalisé par simulation éléments finis e_{FE} .

L'exemple le plus simple de loi de contact développée à partir de cette procédure est la loi de contact de Hertz (voir chapitre 3). S'agissant de la loi de Vu-Quoc, il n'est pas indifférent de noter que l'auteur s'est appuyé sur cette même procédure mais également sur une méthode proche de la MEFMP (voir FIG. E.2-A) qui est désormais réputée très fiable: ceci afin de développer la loi de contact NFD pour les simulations MED. De surcroît, nous observons que l'avantage de cette loi présentée ici pour le comportement plastique du contact entre deux sphères intègre une grande majorité de paramètre matériau ainsi qu'une démarche de calibration qui est peu coûteuse.

Les capacités de l'algorithme géométrique

Cette annexe est dédiée à l'algorithme géométrique de génération d'empilement de sphères polydisperses, des extensions de l'algorithme développées pour différentes applications vont être présentées. Ces extensions concernent: l'augmentation de la compacité dans une région spécifique de l'empilement désignée par l'utilisateur, la réalisation d'échantillons dits "composites" et en dernier lieu l'utilisation de l'algorithme dans le domaine de l'imagerie par rayons X.

F.1 La densification contrôlée d'un sous-espace de l'empilement

Cette spécificité ajoutée à l'algorithme est spécialement dédiée à l'étude de la compression des poudres métalliques. Comme présenté en début du chapitre 1, la distribution de la compacité est un paramètre physique qui existe au sein d'un tas de poudres disposé dans une matrice suite à la phase de remplissage. Cette propriété géométrique du milieu granulaire a son importance dans la modélisation d'un échantillon de poudres, notamment sur son comportement mécanique en phase de compression. Jusqu'à présent aucun algorithme de génération n'a pu reproduire aisément cette distribution spatiale hétérogène de compacité au sein de l'empilement numérique afin d'en quantifier par exemple l'influence en termes de gradients de contraintes lors de la compression.

L'outil géométrique développé permet d'augmenter la compacité d'une zone spécifique de l'empilement que l'utilisateur doit définir par un ou plusieurs volumes semblables à un parallélépipède rectangle. Il est important de noter que ces sous-espaces définis au sein de l'empilement peuvent être densifiés avec une valeur minimale et une valeur maximale du rayon différentes de celles définies pour générer l'empilement initial. Un exemple appliquée de cette option se trouve à la figure F.1, où l'on voit une partie du cylindre creux montrant que la compacité est augmentée par l'ajout de sphères de tailles plus petites (les sphères de couleur blanche). La valeur de la compacité de ces différentes zones est également contrôlée par l'utilisateur qui doit définir pour chaque zone, une valeur de la

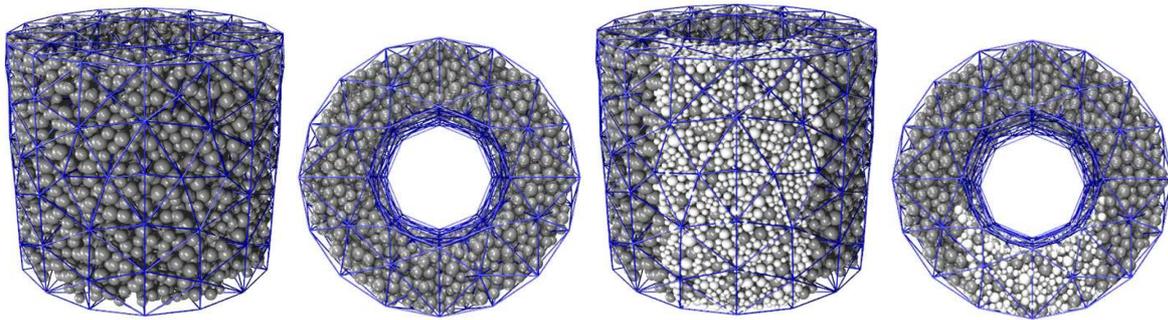


FIG. F.1 – L'augmentation contrôlée de la compacité d'une zone choisie par l'utilisateur. A gauche de cette figure, la vue de face et de dessus d'un empilement cylindrique creux avant la densification d'un sous-espace. A droite de la figure, les mêmes vues après densification d'une zone spécifique avec des sphères de tailles plus petites de couleur blanche

compacité finale. Ensuite cette valeur donnée de la compacité est prise en compte par l'algorithme et elle sera vérifiée numériquement par le code grâce à la notion du triangle sphérique (voir chapitre 2.7.1).

Outre le fait d'étudier l'importance de la prise en compte de la distribution de la compacité dans les simulations sur le comportement de la poudre, grâce à cette option, un nouvel axe de recherche est à notre porté. Il est désormais possible d'étudier l'intérêt d'une distribution spatialement contrôlée de la compacité dans une pièce sur le plan industriel et par la suite, réfléchir aux moyens à mettre en œuvre pour effectuer cette répartition de la poudre dans la matrice.

F.2 La réalisation de matériaux granulaires composites

Les matériaux composites sont bien connus dans les milieux granulaires, avec le béton qui est le plus utilisé d'entre eux. Dans la compression de poudres métalliques avec des mélanges de particules de natures différentes pour l'obtention d'un alliage résistant, le terme de matériaux composites est à la base de procédés de fabrication spécifiques. Aujourd'hui, les études portent désormais sur des mélanges de poudres métalliques classiques avec de grosses particules de carbure qui jouent un rôle de renfort Mishnaevsky *et al.* (2004). Le nombre de particules de carbure présentes dans la microstructure de ce type de matériaux est très faible par rapport au nombre de grains de poudres métalliques ductiles (fer, cuivre,...). La simulation numérique discrète de la compression de tels empilements passe par une phase de construction numérique de l'échantillon de sorte à intégrer ces caractéristiques particulières. Dans la phase en question, les positions des particules de carbure vont être fixées par l'utilisateur afin de s'assurer d'une bonne répartition de celles-ci au sein de l'empilement numérique souhaité représentatif (voir la Fig. F.2-C).

Ce type d'empilement avec des positions de sphères fixées par l'utilisateur est réalisable par l'algorithme géométrique développé. Celui-ci prend en compte les sphères ajoutées (voir Fig. F.2-A), uniquement quand la procédure de génération arrive à l'étape qui précède l'étape 7 (voir chapitre 2.7.1). Cette étape élimine les sphères placées en interpénétration avec les sphères virtuelles activées. L'algorithme peut parallèlement y insérer les sphères fixées par l'utilisateur pour éliminer également toutes les sphères déjà placées qui interpénètrent ces particules ajoutées (voir la Fig. F.2-B). Une fois

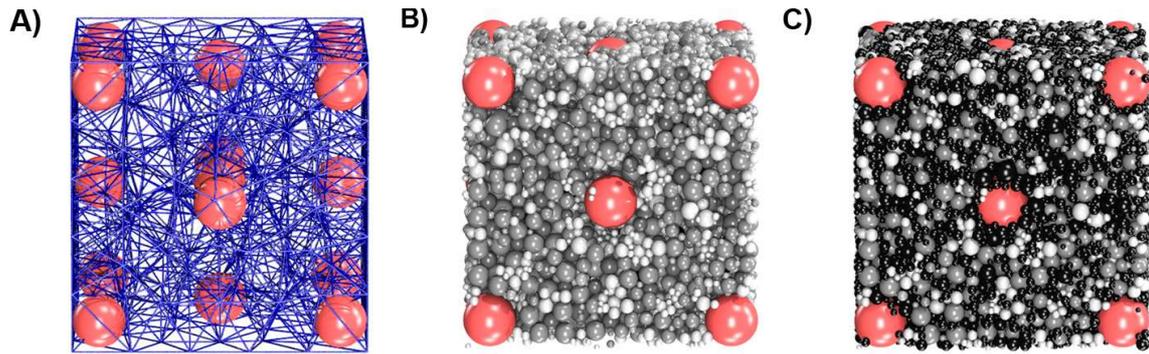


FIG. F.2 – La réalisation d'un empilement avec des sphères fixées par l'utilisateur. A) Le positionnement des sphères par l'utilisateur au sein du maillage initial. B) L'étape d'éliminations des sphères qui interpénètrent les sphères fixées C) L'étape d'augmentation de la compacité par l'ajout de nouvelles sphères et le repositionnement des sphères éliminées (les sphères placées à cette étape sont de couleur noire)

que l'étape 7 commence, l'algorithme augmente la compacité de l'empilement et tente de replacer les sphères éliminées dans l'étape précédente en contact avec les particules (sphères virtuelles ou sphères placées par l'utilisateur) qu'elles interpénétraient (voir la FIG. F.2-C).

Dans le cadre de cette thèse, cette option a été développée pour répondre à un besoin de modélisation rapide et efficace d'échantillons de matériaux granulaires renforcés. Ces types de matériaux présentent des matrices dures ou molles à base de graviers, de grains, de ciment ou de craies et présentent pour éléments de renforts des tiges d'aciers (béton armé) ou des fibres (composites SMC).

F.3 L'application de l'algorithme dans la tomographie

Un autre domaine dans lequel l'outil développé peut être utilisé est la tomographie. Cette technique d'imagerie très utilisée dans la géophysique et plus particulièrement pour l'étude des milieux granulaires permet de reconstruire le volume d'un objet, à partir d'une série de mesures effectuées par tranche depuis l'extérieur de cet objet. Une fois la phase de scanner réalisée, l'objet numérique obtenu est analysé afin d'étudier la microstructure qui constitue le matériau. Aujourd'hui, des simulations numériques par la méthode des éléments finis peuvent être directement appliquées sur le volume numérique après l'avoir maillé (voir la FIG. F.3-B). L'avantage de ce type de calculs est de pouvoir faire des simulations d'un essai mécanique à partir d'un échantillon plus représentatif du milieu réel étudié.

Dans le cas des biomatériaux, la céramique (matériau granulaire) est l'un des matériaux biocompatibles par excellence, fait l'objet d'études poussées. Afin de pouvoir déterminer et prédire le comportement mécanique de ce matériau, les chimistes et biologistes améliorent tous les jours. Les nouvelles voies de recherche en développement et auxquelles j'ai eu l'occasion de participer brièvement est de pouvoir simuler via la méthode des éléments discrets des essais de rupture sur ces matériaux. Un type de simulation que seule l'approche discrète peut réaliser, à l'inverse de l'approche continue qui ne peut modéliser que les amorces de fissures mais pas la propagation de celles-ci.

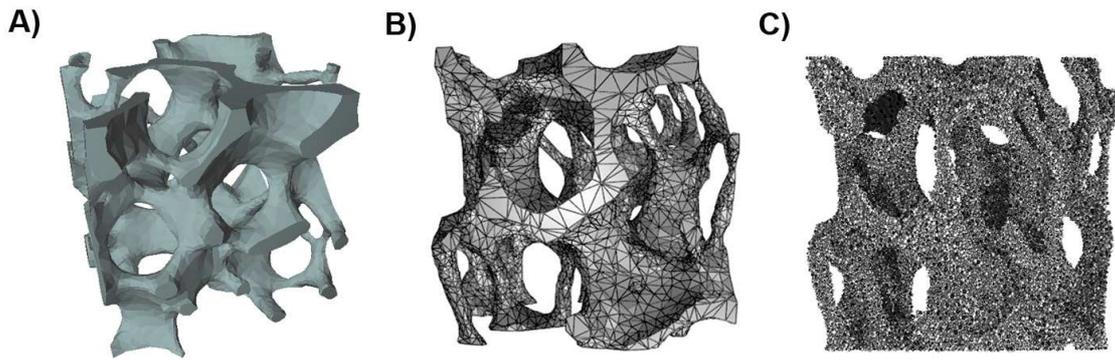


FIG. F.3 – La réalisation d'un empilement à partir d'une tomographie maillée d'une céramique poreuse. Les porosités macroscopiques sont réalisées à l'aide d'agents porogènes, les porosités microscopiques sont dues à l'agencement des particules entre elles A) Image d'une céramique poreuse réalisée sous le logiciel MGPOST B) Le maillage réalisé à partir de la tomographie d'une céramique poreuse. C) L'empilement de sphères en contact réalisé via le maillage éléments finis de la tomographie.

Dans un premier temps, il était indispensable de trouver un outil capable, à partir de la microstructure scannée, d'aboutir à un empilement de sphères avec des propriétés afin que la porosité microscopique soit respectée entre l'échantillon numérique et la céramique. Pour réaliser l'exemple présentée en figure F.3-B il a été nécessaire de récupérer le maillage d'une tomographie (voir la FIG. F.3-B), puis d'exécuter l'algorithme géométrique développé à partir de ce maillage en indiquant la compacité la plus faible et les zones de compacités plus élevées. Pour poursuivre l'étude sur la fissuration de ces biomatériaux, une fois que l'empilement numérique de sphères est généré (voir la FIG. F.3-C), la calibration d'une loi de contact élastique cohésive via différentes sortes d'essais simples devra être faite.

Bibliographie

- AGNOLIN, I. et ROUX, J.-N. (2007). Internal states of model isotropic granular packings. iii. elastic properties. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 76(6):061304.
- AIM, R. B. et GOFF, P. L. (1967). Effet de paroi dans les empilements désordonnés de sphères et application à la porosité de mélanges binaires. *Powder Technology*, 1:281–290,.
- AKISANYA, A., COCKS, A. et FLECK, N. (1997). The yield behaviour of metal powders. *International Journal of Mechanical Sciences*, 39(12):1315 – 1324.
- ALVAIN, O. (2001). *Caractérisation, modélisation et simulation numérique de la mise en forme de pièces par compression et frittage de poudres dures*. These, Institut Polytechnique de Grenoble.
- APARICIO, N. et COCKS, A. (1994). On the representation of random packings of spheres for sintering simulations. *Acta Metallurgica Materialia*, 43:3873–3884,.
- ARIFFIN, A., GETHIN, D. et LEWIS, R. (1998). Finite element simulation and experimental validation for multilevel powder compact. *Powder Metallurgy*, 41(3):189–197.
- ARZT, E. (1982). The influence of an increasing particle coordination on the densification of spherical. *Acta Metallurgica*, 30:1883–1890.
- ASHBY, M. et JONES, D. (1998). *Engineering materials 1-An introduction to their properties and applications*. Elsevier, third édition.
- BARGIEL, M. et MOSCINSKI, J. (1991). C-language program for the irregular close packing of hard spheres. *Computer Phys.Communication*, 64:183–192,.
- BARGIEL, M. et TORY, E. (1993). Packing fraction and measures of disorder of ultradense irregular packings of equal spheres. *Adv. Powder Technol*, 4:79–101,.
- BAZANT, M. Z. (2006). The spot model for random-packing dynamics. *Mechanics of Materials*, 38(8-10):717 – 731. Advances in Disordered Materials.
- BERNAL, J. (1960). Co-ordination of randomly packed spheres. *Nature*, 188:910–911.
- BERRYMAN, J. (1983). Random close packing of hard spheres and disks. *Physical Review A*, 27: 105361061,.
- BORKOVEC, M. et de PARIS, W. (1994). The fractal dimension of the apollonian sphere packing. *Fractals*, 2:521–526,.
- BOUVARD, D. et OUEDRAOGO, E. (1987). Modelling of hot isostatic pressing: A new formulation using random variables. *Acta Metallurgica*, 35:2323–2328.
- BREWIN, P., COUBE, O., DOREMUS, P. et TWEED, J. (2008). *Modelling of Powder Die Compaction*. Engineering Materials and Processes.

- BROWN, S. et ABOU-CHIED, G. (1992). Appropriate yield functions for powder compaction. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 28:11–16,.
- CAMBOU, B. et JEAN, M. (2001). *Micromécanique des matériaux granulaires*. Paris : Hermès science publications.
- CAPDEVILLE, Y., CHALJUB, E., VILOTTE, J.-P. et MONTAGNER, J.-P. (2003). Coupling the spectral element method with a modal solution for elastic wave propagation in global earth models. *Geophysical Journal International*, 152(1):34–67.
- CARNAVAS, P. et PAGE, N. W. (2003). Elastic properties of compacted metal powders. *Journal Material Science*, 33(18):4647–4655.
- CGAL (2009). *Computational Geometry Algorithms Library*. <http://www.cgal.org>.
- CHAREYRE, B. (2003). *MODélisation du comportement d'ouvrages composites sol géosynthétique par éléments discrets*. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier.
- CHEN, Y. (2008). *Contribution à la modelisation de la compression des poudres par une methode d'elements discrets maillés*. These, Institut Polytechnique de Grenoble.
- CHEN, Y., IMBAULT, D. et DOREMUS, P. (2007a). Densification of granular packing: Experiment and simulation using meshed discrete particules. *In Proceedings European powder metallurgy, Vol.3.*, pages 355–360.
- CHEN, Y., IMBAULT, D. et DOREMUS, P. (2008). Experiment and simulation using meshed discrete particles. comparison for compaction of 3d irregular randomly packed particles. *In EURO PM 2008 p.139-144*, Mannheim, Germany.
- CHEN, Y., IMBAULT, D. et DORÉMUS, P. (2007b). Numerical simulation of cold compaction of 3d granular packings. *Materials Science*, Forum 534-536(1):301–304.
- CHTOUROU, H., GUILLOT, M. et GAKWAYA, A. (2002). Modeling of the metal powder compaction process using the cap model. part ii. numerical implementation and practical applications. *International Journal Solids Structures*, 39:1077–1096.
- COUBE, O. (1998). *Modelling and numerical simulation of powder die compaction with consideration of cracking*. These, University Pierre et Marie Curie, Paris VI.
- COUBE, O. et RIEDEL, H. (2000). Numerical simulation of metal powder die compaction with special consideration of cracking. *Powder Metallurgy*, 43(2):123–131.
- CUI, L. et SULLIVAN, C. O. (2003). Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. *Granular Matter*, 5(3):135–145.
- CUNDALL, P. et STRACK, O. (1979). The distinct numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65.
- DANZER, R., LUBE, T., SUPANCIC, P. et DAMANI, R. (2008). Fracture of ceramics. *Advanced engineering materials*, 10(4):275–298,.
- DELAUNAY, B. (1934). Sur la sphère vide. *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskikh i Estestvennykh Nauk.*, 7:793–800,.
- DELLIS, C., BOUVARD, D. et STUTZ, P. (1994). Numerical modeling of particle deformation. *In Proceedings Hot Isostatic Pressing '93*.
- DONZÉ, F. et MAGNIER, S. (1995). Formulation of a three-dimensional numerical model of brittle behavior. *Geophys. J. Int.*, 122:790–802,.
- DONZÉ, F., RICHEFEU, V. et MAGNIER, S. (2009). Advances in discrete element method applied to soil, rock and concrete mechanics. *Electronic Journal of Geotechnical Engineering*, pages 44,.
- DORÉMUS, P., TOUSSAINT, F. et PAVIER, E. (2001). Investigation of iron powder friction on a tungsten carbide tool wall. *Powder Metallurgy*, 44(3):243–247,.
- DRUCKER, D. (1959). A definition of stable inelastic material. *Journal of Applied Mechanics*, 26:101–106,.

- DRUCKER, D. et PRAGER, W. (1952). Soil mechanics and plastic analysis or limit design. *Quarterly of Applied Mathematics*, 10(2):157–175,.
- DRUGAN, W. et WILLIS, J. (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element. *J. Mech. Phys. Solids*, 44:497–524,.
- DUBOIS, F. et JEAN, M. (2003). Lmgc90 une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d'interaction. *In 6ème colloque national en calcul des structures pages 111-118*, Giens, France.
- DUTT, M., HANCOCK, B., BENTHAM, C. et ELLIOTT, J. (2005). An implementation of granular dynamics for simulating frictional elastic particles based on the dl poly code. *Computer Physics Communications*, 166(1):26–44,.
- EVANS, A. (1982). Considerations of inhomogeneity effects in sintering. *Journal of the American Ceramic Society*, 65(10):497–501,.
- FENG, Y. T., HAN, K. et OWEN, D. R. J. (2003). Filling domains with disks: An advancing front approach. *Inter. J. Numer. Methods in Engineering*, 56(5):699–731.
- FISCHMEISTER, H., ARZT, E. et OLSSON, L. (1978). Particle deformation and sliding during compression of spherical powders: a study by quantitative metallurgy. *Powder Metallurgy*, 21:179–187.
- FLECK, N. (1995). On the cold compaction of powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(9):1409 – 1431.
- FLECK, N., KUHN, L. et McMEEKING, R. (1992). Yielding of metal powder bonded by isolated contacts. *International Journal of Fracture*, 40(5):1139–1162.
- FRACHON, A. (2002). *Modélisation et simulation numérique de la compression en matrice de poudres métalliques*. These, Institut Polytechnique de Grenoble.
- FRACHON, A., IMBAULT, D. et DOREMUS, P. (1999). (pm-modnet computer modelling group) state of the art review : Comparison of computer models representing powder compaction process. *Powder Metallurgy*, 42:301–311.
- FRACHON, A., IMBAULT, D. et DOREMUS, P. (2002). (pm-modnet computer modelling group) numerical simulation of powder compaction for two multilevel ferrous parts, including powder characterisation and experimental validation. *Powder Metallurgy*, 45:335–343.
- FRENKEL, D. et SMIT, B. (2002). *Understanding molecular simulation : from algorithms to applications*. San Diego, Calif. ; London Academic,, second édition.
- FRENNING, G. (2008). An efficient finite/discrete element procedure for simulating compression of 3d particle assemblies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(49-50):4266–4272.
- FU, G. et DEKELBAB, W. (2003). 3-d random packing of polydisperse particles and concrete aggregate grading. *Powder Technology*, 133:147–155,.
- FUJUN, W., JIANGANG, C. et ZHENHAN, Y. (2000). A contact searching algorithm for contact-impact problems. *Acta Mechanica Sinica*, 16(4):374–382.
- GEOORGE, P. (1997). On delaunay-based three dimensional automatic mesh generator. *Finite Elements Anal Des Vol*, 25:297–317. <http://www-c.inria.fr/gamma/ghs3d/ghs.php>.
- GELLATLY, B. et FINNEY, J. (1982). Calculation of protein volumes an alternative to the voronoi procedure. *Journal of Molecular Biology*, 161(4):305–322.
- GERMAN, R. (1994). *Powder Metallurgy Science. Second Edition*. Metal Powder Industries Federation, 105 College Rd. East, Princeton, New Jersey 08540-6692.
- GERMAN, R. (1997). On delaunay-based three dimensional automatic mesh generator. *Finite Elements Anal Des Vol*, 25:297–317. <http://www-c.inria.fr/gamma/ghs3d/ghs.php>.
- GETHIN, D., ARIFFIN, A., TRAN, D. et LEWIS, R. (1994). Compaction and ejection of green powder compacts. *Powder metallurgy*, 37(1):42–52.

- GETHIN, D., RANSING, R., LEWIS, R., DUTKO, M. et CROOK, A. (2001). Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material. *Computers and Structures*, 79(13):1287–1294.
- GETHIN, D., YANG, X.-S. et LEWIS, R. (2006). A two dimensional combined discrete and finite element scheme for simulating the flow and compaction of systems comprising irregular particulates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(41-43):5552 – 5565.
- GEUZAIN, C. et REMACLE, J.-F. (2002). Gmsh: A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Finite Elements Anal Des Vol*, 1:1. <http://www.geuz.org/gmsh/>.
- GÉLIN, J.-C. et BARRIÈRE, T. (2004). Ségrégation de phases dans les écoulements de polymères fondus chargés en poudres métalliques. *Mécaniques et Industries*, 5:429–440.
- HALLQUIST, J. (1997). *LS-DYNA3D : Theoretical manual*.
- HARTHONG, B. (2007). Utilisation des éléments finis pour l'étude d'un contact local: application à la méthode des éléments discrets. *Rapport de fin d'études (Master 2 Recherche)*.
- HARTHONG, B., JERIER, J.-F., IMBAULT, D., DONZÉ, F. et DOREMUS, P. (2009). Modelling of high-density compaction of granular materials by the discrete element method. *International Journal of Solids and Structures (accepted)*.
- HASHIN, Z. et ME (1983). Analysis of composite materials a survey. *ASME J. appl. mech*, 50:481–505.
- HENTZ, S. (2003). *Modélisation d'une structure en Béton armé soumise à un choc par la méthode des éléments discrets*. These, Université Joseph Fourier.
- HILL, R., STORAKERS, B. et ZDUNEK, A. (1989). A theoretical study of the brinell hardness test. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 423:301–330.
- JEAN, M. (1999). The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177(3-4):235–257.
- JERIER, J., IMBAULT, D., DONZÉ, F. et DOREMUS, P. (2009a). A geometric algorithm based on tetrahedral meshes to generate a dense polydisperse sphere packing. *Granular Matter*, 11:43–52.
- JERIER, J., RICHEFEU, V., IMBAULT, D. et DONZÉ, F. (2009b). Packing spherical discrete elements for large scale simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (submitted)*.
- JIANG, M., KONRAD, J. et LEROUEIL, S. (2003). An efficient technique for generating homogeneous specimens for dem studies. *Computers and Geotechnics*, 166:579–597,.
- JODREY, W. et TORY, E. (1985). Computer simulation of close random packing of equal spheres. *Physical Review A*, 32:2347–2351,.
- JONSEN, P. et HAGGBLAD, H. (2005). Modelling and numerical investigation of the residual stress state in a green metal powder body. *Powder Metallurgy*, 155(3):196–208.
- JULLIEN, R. et MEAKIN, P. (2000). Computer simulations of steepest descent ballistic deposition. *Colloids and Surfaces A:Physicochemical and Engineering Aspects*, 165:405–422,.
- KADUSHNIKOV, R. et NURKANOV, E. (2001). Investigation of the density characteristics of three-dimensional stochastic packs of spherical particles using a computer model. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, 40:229–235,.
- KANSAL, A., TORQUATO, S. et STILLINGER, F. (2002). Computer generation of dense polydisperse sphere packings. *Chemical Physics*, 117:8212–8218,.
- KOZICKI, J. et DONZÉ, F. (2008a). A new open-source software developed for numerical simulations using discrete modeling methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- KOZICKI, J. et DONZÉ, F. (2008b). Yade-open dem : an open-source software using a discrete element method to simulate granular material . *Engineering Computations*.
- LARKER, H. (October 1999). Near net shape production of monolithic and composite high temperature ceramics by hot isostatic pressing (hip). *Journal of the European Ceramic Society*, 19:2367–2373(7).

- LARSSON, P. L., BIWA, S. et STORÅKERS, B. (1996). Analysis of cold and hot isostatic compaction of spherical particles. *Acta Materialia*, 44(9):3655 – 3666.
- LEE, P. W. (1998). *Asm Handbook: Powder Metal Technologies and Applications: Vol 7*. Asm Intl.
- LEWIS, R., GETHIN, D., YANG, X. et ROWE, R. (2005). A combined finite-discrete element method for simulating pharmaceutical powder tableting. *International Journal Numerical Methods Engineering*, 62:853–869.
- LIU, L. et YUAN, Y. (2000). Dynamic simulation of powder compact by random packing of monosized and polydisperse particles. *Journal of material science letter*, 19:841–843,.
- LUBACHEVSKY, B. et STILLINGER, F. (1990). Geometric properties of random disk packings. *Statistical Physics*, 60:561–583,.
- LUDING, S. (2004). Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packings. *International Journal of Solids and Structures*, 41(21):5821 – 5836. Granular Mechanics.
- MACGEARY, R. (1961). Mechanical packing of spherical particles. *Journal of the American ceramic Society*, 44:513–522,.
- MARTIN, C. L. (2004). Elasticity, fracture and yielding of cold compacted metal powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(8):1691 – 1717.
- MARTIN, C. L. et BOUVARD, D. (2003). Study of the cold compaction of composite powders by the discrete element method. *Acta Materialia*, 51(2):373 – 386.
- MARTIN, C. L. et BOUVARD, D. (2004). Isostatic compaction of bimodal powder mixtures and composites. *International Journal of Mechanical Sciences*, 46(6):907 – 927.
- MARTIN, C. L., BOUVARD, D. et SHIMA, S. (2003). Study of particle rearrangement during powder compaction by the discrete element method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(4):667–693.
- MESAROVIC, S. D. et FLECK, N. A. (2000). Frictionless indentation of dissimilar elastic-plastic spheres. *International Journal of Solids and Structures*, 37(46-47):7071 – 7091.
- MISHNAEVSKY, L., DERRIEN, K. et BAPTISTE, D. (2004). Effect of microstructure of particle reinforced composites on the damage evolution: probabilistic and numerical analysis. *Composites Science and Technology*, 64(12):1805–1818,.
- MODNET, P. (1999). Computer modelling group. *Powder Metallurgy*, 42(4):301–311,.
- MUELLER, G. (2005). Numerically packing spheres in cylinders. *Powder Technology*, 159:105–110,.
- MUNJINZA, A. (2004). *The Combined Finite-Discrete Element Method*. British library.
- OGBONNA, N. et FLECK, N. (1995). Compaction of an array of spherical particles. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43(2):603 – 620.
- OGER, L. (1987). *Etudes des corrélations structure-propriétés dans les milieux granulaires modèles*. Thèse de doctorat, Université e Rennes 1.
- OLLAGNIER, A., IMBAULT, D. et DOREMUS, P. (2007). Contact particles calibration in order to use discrete element code. In *Proceedings European powder metallurgy, Vol.2,*, pages 355–360.
- ONODA, G. et LINIGER, E. (1990). Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset. *Phys. Rev. Lett.*, 64:2727–2730,.
- OSTOJA-STARZEWSKI, M. (2002). Microstructural randomness versus representative volume element in thermomechanics. *ASME J. Appl. Mech.*, 69:25–35,.
- PAVIER, E. (1998). *Caracterisation du Comportement d'une Poudre de Fer pour le Procédé de Compression en Matrice*. These, Institut Polytechnique de Grenoble.
- PAVIER, E. et DORÉMUS, P. (1999). Triaxial characterisation of iron powder behaviour. *Powder Metallurgy*, 42(4):345–352,.
- PLASSIARD, J. (2007). *Modélisation par la méthode des éléments discrets d'impacts de blocs rocheux sur structures de protection type merlons*. These, Université Joseph-Fourier.

- PLASSIARD, J., BELHEINE, N. et DONZÉ, F. (2009). A spherical discrete element model: calibration procedure and incremental response. *Granular Matter*, DOI: 10.1007/s10035-009-0130-x.
- PROCOPIO, A. (2007). *On the compaction of granular media using a multi-particle finite element model*. These, University of Drexel.
- PROCOPIO, A. et ZAVALIANGOS, A. (2005). Simulation of multi-axial compaction of granular media from loose to high relative densities. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7):1523–1551.
- RADJAÏ, F. (1995). *Dynamique des rotations et frottement collectif dans les systèmes granulaires*. Thèse de doctorat, Université Paris IX, Orsay.
- RADJAÏ, F. (2001). Features of force transmission in granular media. In KISHINO, éditeur: *Fourth international workshop on powders and grains*, Sendai, Japon.
- RANSING, R., GETHIN, D., KHOEI, A., MOSBAH, P. et LEWIS, R. (2000). Powder compaction modelling via the discrete and finite element method. *Materials and Design*, 21(4):263–269.
- REDANZ, P. et FLECK, N. (3 December 2001). The compaction of a random distribution of metal cylinders by the discrete element method. *Acta Materialia*, 49:4325–4335(11).
- RICHEFEU, V. (2005). *Approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints*. Thèse de doctorat, Université Montpellier II, Montpellier.
- ROUX, J.-N., CHEVOIR, F. et TOUSSAINT, F. (2007). États de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique. *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées*, 268-269:pp. 141–152. 15 pages, 3 figures. Article in French. A free English translation is available on the web site of the journal : <http://www.lcpc.fr/en/sources/blpc/index.php>.
- SCHNEIDER, L. (2003). *Compaction and yield behaviour of particulate materials*. These, University of Leicester.
- SCHNEIDER, L. et COCKS, A. (2002). An experimental investigation of the yield behaviour of metal powder compacts. *Powder Metallurgy*, 45:237–245,.
- SCHOBERL, J. (2000). Netgen: An advancing front 2d/3d mesh generator based on abstract rules. *Computing and Visualization in Science*, 1:41–52. <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>.
- SCHOFIELD, A. et WROTH, C. (1968). Critical state soil mechanics. *McGraw-Hill, New Yor*.
- SCHOLTES, L., CHAREYRE, B., NICOT, F. et DARVE, F. (2009). Micromechanics of granular materials with capillary effect. *International Journal of Engineering Science*, 47(1):64–75,.
- SCOTT, G. (1960). Packing of spheres: Packing of equal spheres. *Nature*, 188:908–909,.
- SIBILLE, L. (2006). *Modélisations discrètes de la rupture dans les milieux granulaires*. Thèse de doctorat, INP Grenoble.
- SIIRIÄ, S. et YLIRUUSI, J. (2003). Particle packing simulations based on newtonian mechanics. *Powder Technology*, 174:82–92,.
- SKRINJAR, O. et LARSSON, P.-L. (2004). On discrete element modelling of compaction of powders with size ratio. *Computational Materials Science*, 31(1):131–146,.
- SRIDHAR, I. et FLECK, N. (2000). Yield behaviour of cold compacted composite powders. *Acta Materialia*, 48(13):3341–3352,.
- STORÅKERS, B., FLECK, N. A. et McMEEKING, R. M. (1999). The viscoplastic compaction of composite powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47(4):785 – 815.
- STROEVEN, P. et STROEVEN, M. (2003). Dynamic computer simulation of concrete on different levels of the microstructure. *Computer simulation of concrete*, 22:1–10,.
- TABERLET, N. (2002). *Écoulements gravitaires de matériaux granulaires*. These, Université de Rennes 1.
- THORNTON, C. (1997). Coefficient of restitution for collinear collisions of elastic perfectly plastic spheres. *ASME JI Appl. Mech*, 64:383–386,.
- TRASORRAS, J., PARAMESWARAN, R. et COCKS, A. (1998). Mechanical behavior of metal powders and powder compaction modeling. *ASM Handbook*, 7:326–342.

- TROADEC, J. (1993). *Global geometrical description of homogeneous hard sphere packings*. Disorder and Granular Media.
- TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T. et TANAKA, Y. (1993). Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder technology*, 77:79–87,.
- TURNER, C. et ASHBY, M. (1996). The cold isostatic pressing of composite powders-i. experimental investigations using model powders. *Acta Materialia*, 44:4521–4530,.
- VOIVRET, C., RADJAÏ, F., DELENNE, J.-Y. et YOUSSEFI, M. S. E. (2009). Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Physical review letters*, 102(17):1–4.
- VU-QUOC, L. et ZHANG, X. (1999). An elastoplastic contact force-displacement model in the normal direction : displacement-driven version. *Proceedings - Royal Society. Mathematical, physical and engineering sciences*, 455:4013–4044,.
- WALTON, O. et BRAUN, R. (1986). Viscosity, granular-temperature and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal Rheology*, 30:949–980,.
- WANG, F.-J., WANG, L.-P., CHENG, J.-G. et YAO, Z.-H. (2007). Contact force algorithm in explicit transient analysis using finite-element method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 43(6-7):580–587.
- WOOD, D. (1990). *Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics*.
- WU, C., COCKS, A. et GILLIA, O. (2003a). Die filling and power transfer. *International journal of powder metallurgy*, 39(4):51–64.
- WU, C., COCKS, A., GILLIA, O. et THOMPSON, D. (2003b). Experimental and numerical investigations of powder transfer. *Powder Technology*, 138(2-3):216 – 228.
- YANG, R., ZOU, R. et YU, A. (2000). Computer simulation of the packing of one particles. *Physical review E*, 62(3):3900–3908,.
- YEN, K. et CHAKI, T. (1992). A dynamic simulation of particle rearrangement in powder packings with realistic interactions. *Journal of Applied Physics*, 71(7):3164–3173,.

Articles acceptés ou soumis
