HAL
open science

Modélisation des matériaux granulaires cohésifs à particules non convexes : Application à la compaction des poudres d'UO2

Baptiste Saint-Cyr

To cite this version:

Baptiste Saint-Cyr. Modélisation des matériaux granulaires cohésifs à particules non convexes : Application à la compaction des poudres d'UO2. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2011. Français. NNT : . tel-00660146v1

HAL Id: tel-00660146

https://theses.hal.science/tel-00660146v1

Submitted on 16 Jan 2012 (v1), last revised 16 Jan 2012 (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.

UNIVERSITE MONTPELLIER 2
— Sciences et Techniques du Languedoc —

THESE

pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER 2

Spécialité :	Mécanique et Génie Civil.
Formation doctorale :	Mécanique des matériaux et des milieux complexes, des structures et des systèmes.
Ecole doctorale :	Informations, Structures, Systèmes.

Modélisation des matériaux granulaires cohésifs à particules non convexes : Application à la compaction des poudres d'UO_2.

par

Baptiste SAINT-CYR

Soutenue publiquement le 02/11/2011 devant le jury composé de :

Bernard CUQ	Professeur (UMR IATE, Montpellier-Supagro)	Président
Jean-Noël ROUX	Ingénieur en chef (LCPC, Iffstar)	Rapporteur
Géry de SAXCÉ	Professeur (LML, Université Lille 1)	Rapporteur
Pierre ALART	Professeur (LMGC, Université Montpellier 2)	Examinateur
Gaël COMBE	Maître de conférence (L3S-R, Université Joseph Fourier)	Examinateur
Jean-Yves DELENNE	Maître de conférence (LMGC, Université Montpellier 2)	Co-directeur
Farhang RADJAI	Directeur de recherche (LMGC, Université Montpellier 2)	Directeur
Philippe SORNAY	Expert senior (LCU, CEA-Cadarache)	Co-directeur
François COUVREUR	Chargé d'affaires (STXN)	Invité
Vincent RICHEFEU	Maître de conférence (L3S-R, Université Joseph Fourier)	Invité

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au sein de l'équipe Physique et Mécanique des Matériaux Granulaires du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier et au Laboratoire des Combustibles Uranium du CEA-Cadarache.

Tout d'abord, je souhaite remercier mes encadrants Philippe SORNAY, Jean-Yves DELENNE et Farhang RADJAI pour leur disponibilité, leurs conseils avisés ainsi que leur aide et leur confiance sans faille apportées tout au long de ces trois années. Je tiens à remercier également Emilien AZEMA pour sa participation active au projet. Je remercie aussi les membres de mon jury de thèse pour la qualité de leur évaluation et de l'intérêt porté à l'égard de ce travail. Un grand merci aux collègues du LMGC (JP et les autres ...) ainsi qu'à ceux du LCU (Méryl BROTHIER, Nicole BUON ...) pour leur encouragements.

Les ultimes remerciements vont à ma famille pour son soutien, ses encouragements, sa confiance procurés tout au long de mes études. Ce travail leur est dédié.

Table des matières

Introduction générale **7**

1 Contexte scientifique et applicatif **11**

1.1 Introduction 12

1.2 Le combustible nucléaire 12

1.2.1 Fabrication du combustible nucléaire 12

1.2.2 Quelques caractéristiques des poudres d'UO_2 14

1.3 Propriétés génériques des milieux granulaires 16

1.3.1 Comportement quasi-statique 17

1.3.2 Modèles de comportement 21

1.3.3 Méthodes numériques 22

1.3.4 Milieux granulaires cohésifs 24

1.3.5 Texture granulaire 26

1.3.6 Influence des paramètres matériels 29

1.4 Influence de la morphologie des particules 33

1.4.1 Description de la forme des particules 33

1.4.2 Prise en compte de la forme dans les modèles par éléments discrets . . 39

1.4.3 Influence de la forme sur la texture et le comportement 40

1.5 Conclusion 42

2 Modélisation des poudres à particules non-convexes **45**
2.1 Introduction 46
2.2 Modèle physique 47
2.2.1 Particules non-convexes 47
2.2.2 Granulométrie 49
2.2.3 Interactions 50
2.3 Procédures numériques 52
2.3.1 Code de calcul 52
2.3.2 Méthode de préparation 55
2.3.3 Paramètres numériques 57
2.4 Analyse statistique de l'état isotrope 58
2.4.1 Traitement de données et analyse physique 58
2.4.2 Compacité 61
2.4.3 Connectivité 61
2.4.4 Orientations des contacts 64
2.4.5 Réseau de forces 67
2.5 Conclusion 70

3 Rhéologie et texture en cisaillement **73**
3.1 Introduction 75
3.2 Variables de contrainte et de déformation 75
3.3 Comportement macroscopique 77
3.3.1 Résistance au cisaillement 77
3.3.2 Dilatance 79
3.4 Microstructure de l'état critique 81
3.4.1 Topologie du réseau de contact 81
3.4.2 Anisotropie du réseau de contact 83
3.5 Transmission des forces normales 84
3.5.1 Distributions des forces normales 84
3.5.2 Anisotropie des forces normales 86
3.6 Mobilisation et anisotropie des forces de frottement 89
3.6.1 Mobilisation du frottement 89
3.6.2 Anisotropie des forces de frottement 91

3.7 Modélisation micro-mécanique 94
3.7.1 Origines de la résistance au cisaillement 94
3.7.2 Un modèle pour la compacité 95
3.8 Extensions 99
3.8.1 Un benchmark pour l'effet de forme 101
3.8.2 Agrégats non convexes en dimension 3 103
3.9 Conclusion 107

4 Cohésion et rupture **109**
4.1 Introduction 110
4.2 Comportement macroscopique en cisaillement 110
4.2.1 Tenue mécanique 110
4.2.2 Compacité et variation de volume 115
4.3 Compacités locales 119
4.3.1 Outils d'analyse 119
4.3.2 Systèmes non-cohésifs 122
4.3.3 Systèmes cohésifs 123
4.4 Texture cohésive et efforts de contact 126
4.5 Compression œdométrique 134
4.5.1 Comportement macroscopique 134
4.5.2 Microstructure 136
4.5.3 Etat de compacité hétérogène 138
4.6 Compression uniaxiale 140
4.7 Conclusion 148

Conclusion générale **149**

Bibliographie **155**

Annexes **162**

A Article publié dans Physical Review E **163**

Introduction générale

Le combustible nucléaire est fabriqué actuellement par métallurgie des poudres. Les ébauches crues sont obtenues par compression uniaxiale à température ambiante puis subissent un frittage naturel qui conduit à une compacité voisine de 95%. La fabrication du combustible passe par trois étapes : 1) la préparation de la poudre, 2) la formation de l'ébauche comprimée et 3) le frittage. Ce procédé, utilisé depuis plus de 40 ans dans l'industrie nucléaire, est actuellement revisité dans le cadre de la rénovation de l'outil de production et de l'augmentation des cadences avec un souci fort de minimiser les coûts tout en maîtrisant la qualité du produit final.

Des résultats récents montrent que le taux d'agrégation des poudres a une très grande influence non seulement sur leur compressibilité mais également sur la microstructure des frittés (forme et taille de grains, distribution de la porosité...). Ainsi, l'amélioration du comportement du combustible en réacteur passe, en partie aussi, par la connaissance et la compréhension de l'impact des différentes étapes de son élaboration. L'étape de compaction est déterminante pour le frittage et donc pour la qualité des pastilles de combustible. Si le compact cru n'est pas suffisamment dense après compaction, sa densification par frittage sera difficile. Par ailleurs, si la densité du compact cru est élevée mais trop hétérogène, le frittage conduira à la formation de fissures ou à une microstructure non-homogène.

Les poudres d'UO_2 présentent la particularité de conduire à un empilement peu dense avec des particules élémentaires (cristallites) indéformables. Par ailleurs, compte tenu de la taille de ces particules et de leur mode d'élaboration, elles se présentent pour la plupart sous la forme agrégée et agglomérée ; voir figure 1. Ces agrégats présentent une morphologie complexe, caractérisée notamment par une certaine non-convexité, et s'agglomèrent sous l'effet des interactions cohésives de nature physico-chimiques et modulées par l'humidité ambiante. La compaction de ces poudres résulte donc d'une succession de réarrangements, et de fragmentations des différentes populations des particules. Ainsi, la compressibilité (aptitude à donner des ébauches

denses) et la compactabilité (aptitude à donner des ébauches solides) des poudres d'UO_2 sont principalement fonction des caractéristiques morphologiques des particules, et de la composition chimique et texturale de la poudre. Ces caractéristiques ont une influence notable sur la microstructure des comprimés après frittage.

L'approche macroscopique des céramistes (relation densité-contrainte, rapport entre contrainte axiale et contrainte radiale), ne permet pas de relier les caractéristiques microstructurales des poudres à leur comportement lors de leur compaction en utilisant le formalisme de la mécanique des milieux continus (modélisation par les éléments finis). Les variables internes introduites dans ce type d'approche pour prendre en compte les caractéristiques des poudres sont souvent de nature phénoménologiques et leur sens physique est difficile à préciser. A l'échelle des particules, les variables locales sont au contraire évidentes (formes des particules, structure de l'empilement...). Une approche microscopique à l'aide de la mécanique des milieux granulaires apparaît donc nécessaire pour comprendre et prévoir les mécanismes physiques qui contrôlent le processus de compaction.

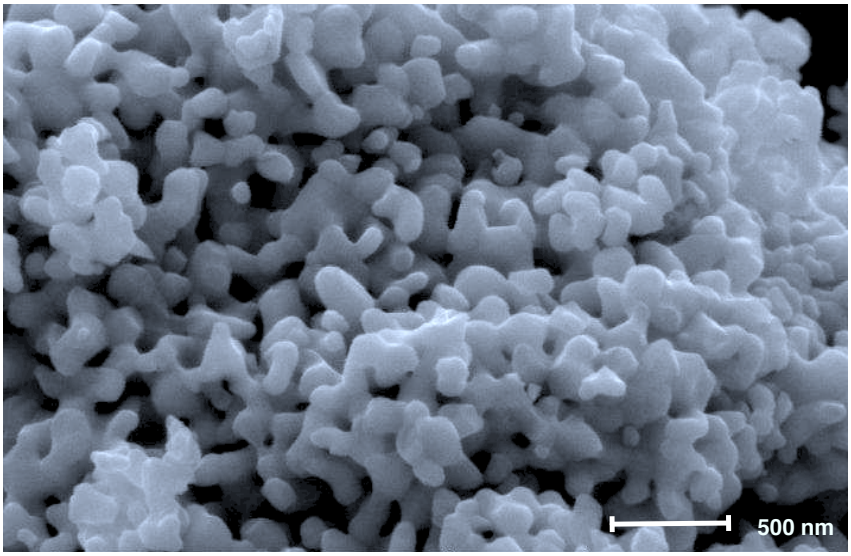


FIGURE *1* – *Micrographie d'une poudre d'UO_2 montrant les agrégats de cristallites.*

L'objectif des travaux présentés dans ce mémoire est de proposer un *modèle granulaire* des poudres d'UO_2 tenant compte de leurs particularités, en vue d'une étude numérique systématique de leurs propriétés rhéologiques et microstructurales. Le modèle développé intègre notamment le caractère non convexe des agrégats, leur frottement et leurs interactions cohésives. Il est mis en œuvre à l'aide de la méthode de *dynamique des contacts* (Contact Dynamics ou CD) en tant que méthode par éléments discrets (Discrete Element Method ou DEM) pour l'intégration pas à pas des équations du mouvement d'une collection de particules rigides. En effet, avec l'augmentation des ressources informatiques, l'approche par éléments discrets constitue aujourd'hui un outil de choix pour l'étude de la matière en grains.

Compte tenu de la complexité des poudres considérées, une modélisation discrète néces-

site des simplifications au niveau de la définition des propriétés des grains (forme simple et unique, énergie de cohésion unique ...), mais elle permet en contrepartie d'obtenir les propriétés rhéologiques émergeant des interactions collectives des particules pendant un processus de compaction ou de cisaillement. Les simulations DEM nous permettent ainsi d'évaluer l'impact des paramètres liés à la forme des particules et à leur cohésion, ainsi que l'influence des processus de mise en place des échantillons numériques.

Cette étude s'inscrit dans la thématique plus générale de compréhension des origines microscopiques (à l'échelle des particules) des comportements macroscopiques des matériaux granulaires. Cette thématique constitue un domaine pluridisciplinaire fédérant des recherches menées par diverses communautés scientifiques telles que la technologie des poudres, la mécanique des sols et la physique de la matière molle. L'influence de la forme des particules sur la microstructure et la rhéologie des matériaux granulaires cohésifs ou non constitue aujourd'hui un enjeu majeur qui intéresse toutes ces communautés. En effet, depuis de nombreuses années la DEM est employée sur la base d'une simplification extrême ne considérant que des formes circulaires (2D) ou sphériques (3D) ou des distributions serrées des tailles des particules. Ces études ont permis d'établir de nombreuses propriétés des milieux granulaires en statique et en dynamique en lien avec leur microstructure. Les connaissances établies dans ce cadre, peuvent servir aujourd'hui de référence pour étudier des modèles granulaires plus complexes et originaux tels que ceux qui nous intéressent dans ce mémoire, en vue d'une meilleure compréhension du comportement des poudres d'UO_2.

Ce mémoire est organisé en 4 chapitres suivis d'une conclusion générale :

Le chapitre 1 décrit le cadre et le contexte scientifique des études réalisées. Nous présentons dans ce chapitre quelques caractéristques physiques des poudres d'UO_2 essentielles à leur modéslisation. Une section de ce chapitre est consacrée à la modélisation du comportement local et macroscopique des matériaux granulaires. Dans ce cadre nous revisitons des aspects génériques du comportements de ces matériaux. Dans la dernière section nous faisons un exposé succinct sur les méthodes de caractérisation de la morphologie des particules dans les matériaux granulaires. Nous discutons de l'importance de la prise en compte de la forme des particules dans les modèles par éléments discrets, et résumons quelques résultats numériques et expérimentaux concernant l'effet de forme sur le comportement des matériaux granulaires.

Le chapitre 2 est consacré à la présentation de la méthodologie employée au cours de cette thèse. Dans ce chapitre, les différentes étapes qui constituent la démarche sont exposées. Dans la présentation du modèle physique, nous introduisons le paramètre de non-convexité construit à partir de formes géométriques simples, ainsi que les interactions associées : contact frottant, cohésion. Ce chapitre est l'occasion d'introduire par ailleurs, un certain nombre d'outils génériques et de variables internes pour la caractérisation statistique de la microstructure des empilements granulaires. Nous le faisons par l'analyse de l'état initial obtenu par compression isotrope.

Le chapitre 3 présente une étude systématique de la rhéologie quasistatique de systèmes constitués de particules de degrés de non-convexité différents, en l'absence de cohésion. L'évo-

lution de la texture entre l'état initial isotrope et l'état stationnaire obtenu par compression biaxiale est étudiée. Les grandeurs macroscopiques mécaniques et géométriques, sont analysées en fonction de la non-convexité des particules. On montre, que la résistance au cisaillement n'est pas forcément liée à l'état de compacité des empilements. Par contre, elle évolue plutôt avec la connectivité et la texture des empilements. La transmission des forces est étudiée en fonction de la topologie du réseau de contact, et la distribution des forces de contact est analysée en fonction de la non-convexité. Dans ce chapitre, on consacre une section à une étude comparative avec d'autres formes dont les caractéristiques morphologiques autres que la non-convexité sont quantifiées par des indices de forme construits de manière identique. Enfin on voit que la mise en œuvre du modèle d'agrégats en 3D confirme une partie des résultats obtenus en 2D.

Le chapitre 4 élargit l'étude au cas des empilements cohésifs. Il est question dans ce chapitre, d'une évaluation simultanée de l'effet de la non-convexité et de la cohésion sur la rhéologie quasistatique et la texture par compression biaxiale des empilements. La résistance mécanique des empilements est évaluée avec la cohésion au début du cisaillement et dans l'état cisaillé. Dans ce chapitre, on verra que la cohésion interne des empilements est fortement dépendante de l'homogénéité de la structure granulaire et qu'elle nécessite des moyens de caractérisation différents. Il sera question par ailleurs dans ce chapitre de l'étude de la compressibilité d'empilements homogènes en fonction du paramètre de non-convexité. Pour finir, la compaction d'empilements granulaires fortement hétérogènes sera aussi discutée.

CHAPITRE 1

Contexte scientifique et applicatif

Sommaire

1.1 Introduction **12**

1.2 Le combustible nucléaire **12**

1.2.1 Fabrication du combustible nucléaire 12

1.2.2 Quelques caractéristiques des poudres d'UO_2 14

1.3 Propriétés génériques des milieux granulaires **16**

1.3.1 Comportement quasi-statique 17

1.3.2 Modèles de comportement 21

1.3.3 Méthodes numériques 22

1.3.4 Milieux granulaires cohésifs 24

1.3.5 Texture granulaire 26

1.3.6 Influence des paramètres matériels 29

1.4 Influence de la morphologie des particules **33**

1.4.1 Description de la forme des particules 33

1.4.2 Prise en compte de la forme dans les modèles par éléments discrets . 39

1.4.3 Influence de la forme sur la texture et le comportement 40

1.5 Conclusion **42**

1.1 Introduction

Ce premier chapitre présente le contexte applicatif et scientifique de nos études. Nous allons commencer par le comportement des poudres de dioxyde d'uranium lors de leur mise en forme par compaction uniaxiale dans le cadre de la fabrication du combustible nucléaire. Nous nous focaliserons essentiellement sur la problématique de compaction de ces poudres et les enjeux industriels associés, ainsi que sur leurs caractéristiques majeures qui seront à l'origine du modèle granulaire proposé dans le chapitre 2. Ensuite, nous nous intéresserons aux matériaux granulaires et à leur comportement expérimental d'un point vue très général afin de préciser le cadre scientifique de la modélisation granulaire mise en place dans nos études. Enfin, nous ferons une synthèse bibliographique des études numériques et expérimentales de l'influence des propriétés des particules, notamment leur morphologie, sur le comportement mécanique et la texture des matériaux granulaires.

1.2 Le combustible nucléaire

1.2.1 Fabrication du combustible nucléaire

La fabrication du combustible nucléaire à base de dioxyde d'uranium (UO_2) repose sur un procédé de métallurgie des poudres, qui à partir de l'UO_2 sous forme pulvérulente, permet d'obtenir un objet solide, mis en forme par pressage uniaxial puis consolidé par *frittage* (i.e traité thermiquement en dessous de la température de fusion de la matière constitutive). Il comporte trois grandes étapes :

- la première concerne la préparation des poudres pour qu'elles soient manipulables dans un procédé industriel. En particulier, elles doivent s'écouler facilement dans les trémies d'alimentation pour répondre aux cadences industrielles. Selon les poudres mises en œuvre, un broyage ou une granulation est réalisée. Très souvent, un produit organique se décomposant au frittage et un agent lubrifiant sont ajoutés. L'ajout de produits organiques permet de maîtriser la densité après frittage des comprimés crus tandis que l'agent lubrifiant facilite entre autres le glissement des particules contre les parois du moule de presse lors de l'étape de mise en forme,
- la deuxième concerne la mise en forme de la poudre sous forme de comprimés. Nous détaillerons plus particulièrement cette étape dans le paragraphe ci-dessous car elle a trait à la problématique de cette thèse.
- la dernière étape consiste à traiter thermiquement les comprimés afin de les consolider et de les densifier. La résorption de la porosité du comprimé dépend entre autres de la texture de l'empilement granulaire résultant de la mise en forme du compact.

Les poudres d'UO_2 sont mises en forme par pressage uniaxial à température ambiante. Un comprimé vert (cru) est obtenu. Cette phase se décompose en trois étapes : le remplissage des matrices de presse, le pressage uniaxial et l'éjection du comprimé cru facilitée par la réduction de la contraite appliquée.

Remplissage des matrices de presses

Lors de la phase de remplissage, les poudres d'UO_2 sont déversées dans les matrices de presse. Le remplissage des matrices doit éviter la formation de "défauts d'empilement" tels que les voûtes qui sont dues aux forces interparticulaires. La phase de remplissage fait intervenir essentiellement les propriétés d'écoulement de la poudre. Ces propriétés sont pilotées par le niveau des forces de cohésion entre les particules, mais aussi par la forme des particules.

Compaction

Lors du compactage, les agglomérats (cf. §1.2.2) se déforment et se fragmentent au moins en partie. Puis les agrégats se réarrangent et peuvent également se fragmenter au niveau des cous de frittage (i.e. entre deux cristallites). Toutefois, les liaisons étant des liaisons solides, leur fragmentation demande beaucoup plus d'énergie que la fragmentation des agglomérats. Le compactage des poudres conduit à une évolution des particules et des porosités qui leur sont associées. Pour les poudres céramiques telles que les poudres d'UO_2, les mécanismes de densification par déformation plastique des particules peuvent être négligés compte tenu de leur dureté. L'évolution de la porosité des compacts résulte alors essentiellement du réarrangement et de la fragmentation des particules. Les contraintes nominales de mise en forme sont comprises généralement entre 300 et 600 MPa.

De nombreux auteurs ont essayé de relier les différentes phases de densification d'un lit de poudre au comportement mécanique des différentes populations de grains (cristallites, agrégats, agglomérats ...) [112, 48, 77]. Le réarrangement et la fragmentation des agglomérats sont prépondérants lors des premiers instants de la compaction. Puis, les agrégats se réarrangent et quelques uns se fragmentent comme en témoignent les faciès de rupture observés au microscope à balayage électronique. Toutefois, s'il demeure difficile de dénombrer exactement le nombre d'agrégats fragmentés, ils sont peu nombreux pour les poudres mises en œuvre. Le mécanisme de densification est donc le résultat du réarrangement des agrégats qui dépend fortement de la nature des interactions entre eux, de leur état de surface et de leur morphologie. Les agrégats présentent des parties convexes et d'autres concaves qui permettent leur imbrication, ce qui modifie la microstructure et la tenue mécanique des compacts.

Décharge et éjection du comprimé cru

Suite à l'étape de compaction, la contrainte est réduite jusqu'à atteindre 10% environ de la contrainte maximale. Lors de cette phase, le comprimé restitue une partie de l'énergie élastique emmaganisée lors de la compaction en se déformant dans la direction de compression. La phase d'éjection proprement dite consiste en un accompagnement de l'extraction du comprimé par un déplacement relatif des poinçons et de la matrice. Cette phase est critique dans la mesure où le comprimé doit avoir une cohésion satisfaisante lui permettant d'accommoder au mieux l'effort de cisaillement induit par l'expansion radiale de la partie du comprimé hors de la matrice par rapport à la partie qui se trouve encore à l'intérieur de la matrice.

Contrairement à la plupart des industries qui ajoutent des liants pour obtenir plus aisément des ébauches crues solides et sans défauts, la tenue mécanique des comprimés crus de poudres

d'UO_2 repose entièrement sur les caractéristiques des poudres et du cycle de mise en forme. En résumé, si l'on prend les précautions nécessaires lors du remplissage pour éviter la formation de voûtes et/ou de zones à densité apparente différente, la tenue mécanique des comprimés crus est très majoritairement due à l'empilement des agrégats et aux forces qui existent entre eux. Autrement dit, les deux principales caractéristiques macroscopiques des comprimés crus qui sont la densité et la tenue mécanique, dépendent presque exclusivement des caractéristiques des agrégats et des forces qui les lient.

1.2.2 Quelques caractéristiques des poudres d'UO_2

Les poudres d'UO_2 sont élaborées selon un procédé en voie humide (précipitation puis calcination) ou en voie sèche (réaction solide-gaz). Comme le montre la figure 1.1, les poudres d'UO_2 provenant de l'un ou l'autre des procédés d'élaboration (P1 ou P2) forment un système granulaire complexe constitué de trois types de particules [35] :

- les cristallites, particules monocristallines de forme ovoïdale, et de taille généralement comprise entre 0,05 et $0,2\ \mu\mathrm{m}$,
- les agrégats formés de cristallites reliées entre elles par des liaisons fortes (pont solide). Leur forme est généralement dendritique et elle résulte du pré-frittage se produisant pendant l'élaboration de la poudre. Leur taille fluctue généralement de $0,2\ \mu\mathrm{m}$ à quelques microns,
- les agglomérats constitués d'ensembles d'agrégats de cristallites formés naturellement en fonction des caractéristiques physicochimiques de la poudre (surface spécifique, force de van der Waals, pont liquide, ...). Ces agglomérats peuvent évoluer en fonction de leurs conditions de stockage et de transport (atmosphère, température, humidité ...). Ce sont des assemblages labiles d'agrégats, caractérisés par des liaisons faibles. Leur taille généralement variable est comprise entre quelques dizaines et centaines de $\mu\mathrm{m}$. Leur forme dépend fortement de la technologie employée dans le procédé d'élaboration. Elle peut être proche de celle d'une sphère pour des particules obtenues par atomisation-séchage ou dans un lit fluidisé. Par contre, elle peut être moins bien définie pour les poudres calcinées directement dans un four tournant.

La taille moyenne des cristallites de la poudre P1 est légèrement plus petite que celle des cristallites de la poudre P2 ce que traduisent également les différences sur les valeurs de surface spécifique. Par ailleurs, on voit qualitativement que les agrégats de la poudre P1 sont de forme plus irrégulière/dendritique que ceux de la poudre P2. La poudre P1 présente des agglomérats sphériques de taille relativement monodisperse alors que ceux de la poudre P2 présentent une distribution granulométrique beaucoup plus étalée et des formes très variées. Les caractéristiques des agglomérats influencent fortement les densités apparente et tassée des poudres.

Lorsque l'on compacte les poudres P1 et P2 à l'aide d'une presse uniaxiale, la densité relative des compacts évolue de manière identique dès que la contrainte appliquée est supérieure à $5\ \mathrm{MPa}$; voir figure 1.2. La différence observée pour la porosité des compacts en dessous de

5 MPa est attribuée à la différence de taille et de forme des agglomérats, mais aussi au fait que la densification des lits des poudres dans ces gammes de pressions est due à leur réarrangement et leur rupture. Au dessus de 5 MPa, l'évolution de la compacité n'est régie que par le réarrangement et la fragmentation des agrégats de cristallites. Compte tenu du module d'Young très élevé de l'UO_2 (200 à 220 GPa [49, 92, 80]) et des conditions de pressage, les cristallites ne se déforment pas plastiquement et ne se fragmentent pas ($K_{IC} = 0,91$ MPa.m$^{1/2}$, [39]) . D'après les observations MEB, il en est de même pour la plupart des agrégats. La compressibilité des poudres d'UO_2 est donc régie par les réarrangements des agrégats.

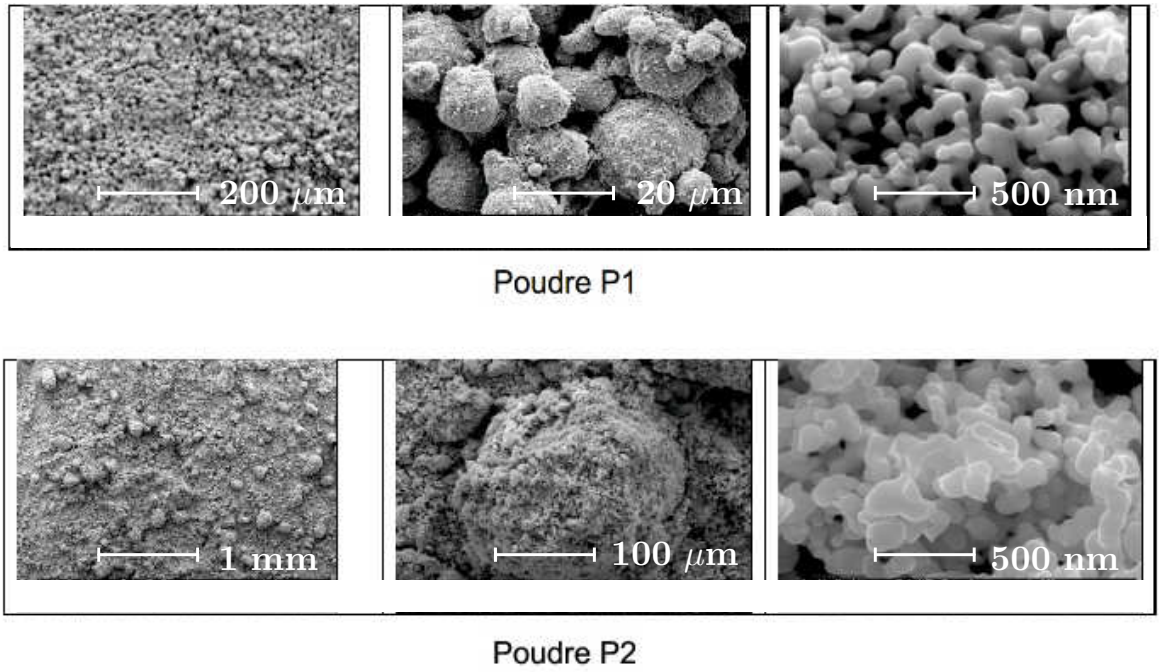


FIGURE ***1.1*** *– Observations au MEB à plusieurs grossissements de deux exemples de poudres d'UO_2 obtenues à l'aide d'un procédé en voie humide (P1) et en voie sèche (P2).*

La résistance à une compression diamétrale (essai brésilien) des compacts élaborés à partir des deux poudres peut être très différente comme le montre la figure 1.3. Cet écart provient d'une part d'une différence de physicochimie de surface qui induit une cohésion plus ou moins importante entre agrégats [17] et d'autre part, d'une différence de morphologie des particules. Après un traitement thermique approprié qui annihile les différences de physico-chimie de surface, la résistance mécanique des compacts issus des deux poudres reste différente, ce qui confirme le rôle joué par la morphologie des agrégats dans leur tenue mécanique.

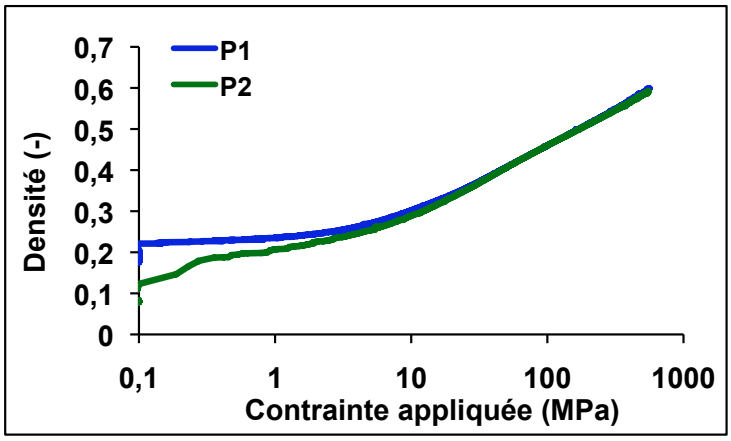


FIGURE *1.2* – *Densité relative des poudres P1 et P2 en fonction de la contrainte appliquée.*

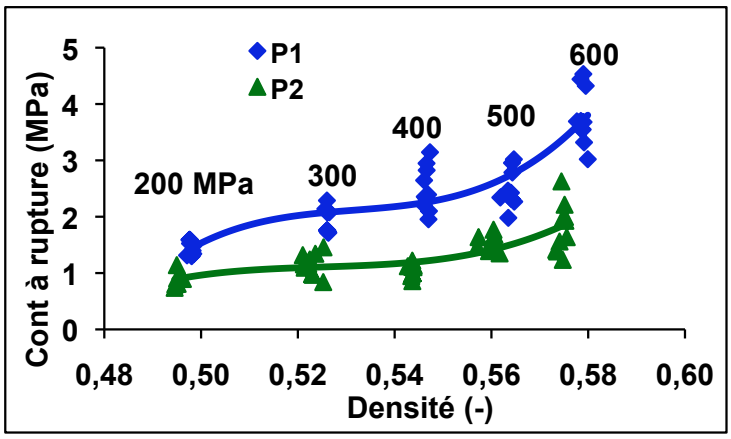


FIGURE *1.3* – *Résistance à la rupture des compacts de poudres P1 et P2 mis en forme entre 200 et* 600 MPa *en fonction de la densité relative.*

1.3 Propriétés génériques des milieux granulaires

Le caractère granulaire des poudres d'UO_2 préconise une modélisation de leur comportement à l'échelle des particules. Une *approche granulaire* implique la prise en compte des caractéristiques locales, des particules et de leurs interactions, qui conduisent à une modélisation appropriée (numérique ou théorique) de leur dynamique d'ensemble lors d'un processus de compaction ou d'un essai de caractérisation par cisaillement. Il se trouve que, malgré des différences importantes entre les propriétés spécifiques de divers matériaux granulaires, leur comportements présentent des aspects communs qui constituent le comportement générique des matériaux granulaires. La complexité de ce comportement découle des contacts frottants, du désordre typique des arrangements granulaires et du caractère dissipatif des interactions.

Par ailleurs, le comportement granulaire peut présenter un caractère solide, liquide ou gazeux en fonction du taux de déformation subi par le matériau.

Les matériaux granulaires peuvent être cohésifs et comporter un fluide ou une phase solide interstitielle en proportion variable. On distingue ainsi les matériaux granulaires *secs* des matériaux granulaires *humides* d'une part, et les matériaux granulaires *cohésifs* (en présence de forces d'adhésion entre particules) des matériaux granulaires *non cohésifs* d'autre part.

Les propriétés rhéologiques des matériaux granulaires ont fait l'objet de recherches systématiques depuis plusieurs années par différentes communautés scientifiques. Ces études, fondées souvent sur des moyens d'investigation modernes tels que l'analyse d'image et les simulations numériques discrètes, ont permis de caractériser d'une manière précise le comportement plastique des matériaux granulaires à faible taux de cisaillement, les écoulements granulaires rapides, la structuration interne en termes de chaînes de contacts et de forces, de nombreux phénomènes dynamiques tels que la ségrégation de taille et l'apparition de patterns, l'influence des paramètres liés à la forme et aux tailles des particules sur le comportement volumique et la résistance au cisaillement, ... Dans cette section, nous allons brièvement présenter des notions de base et des résultats récents directement liés aux études présentées dans ce mémoire.

1.3.1 Comportement quasi-statique

Le comportement macroscopique des milieux granulaires est souvent étudié à l'aide des appareils normalisés qui permettent de déterminer la réponse contrainte-déformation d'un échantillon dans des conditions aussi homogènes que possible. Très souvent, une composante de contrainte, dite contrainte de confinement, est imposée et l'échantillon est soumis à une déformation de cisaillement (compression triaxiale, cisaillement simple, cisaillement direct) ou à une déformation volumique à caractère uniaxial ou isotrope. Dans un test de cisaillement, la réponse du matériau est caractérisée par la contrainte de cisaillement en fonction de la déformation de cisaillement cumulée et par la variation de la compacité (volume occupé par les particules rapporté au volume total) ou de la déformation volumique cumulée en fonction de la déformation de cisaillement. Dans un test de compression, la réponse est caractérisée par la déformation volumique imposée en fonction de la pression moyenne. Nous supposons que, sauf mention contraire, ces déformations sont de nature plastique, c'est-à-dire résultant uniquement des réarrangements internes.

Le comportement des matériaux granulaires étant fortement dépendant du taux de cisaillement, il est nécessaire de définir quantitativement le régime quasi-statique. En fait, la dynamique d'un matériau granulaire composé de particules rigides de diamètre d et de masse m, confiné par une pression p et soumis à un taux de cisaillement $\dot{\varepsilon}_q$ dépend de l'importance relative des forces *statiques* entre grains induites par p et des forces *cinétiques* induites par le cisaillement imposé. L'ordre de grandeur des forces statiques entre particules est $f_s = pd^{D-1}$ où D est la dimension d'espace. L'ordre de grandeur des forces cinétiques est donné par la quantité de mouvement moyenne par unité de temps échangée lors des collisions entre particules. La vi-

tesse relative moyenne étant $\dot{\varepsilon}_q d$, la force cinétique moyenne est obtenue en divisant la quantité de mouvement $m\dot{\varepsilon}_q d$ par le temps caractéristique de cisaillement $\dot{\varepsilon}_q^{-1}$. L'ordre de grandeur de la force cinétique est donc $f_c = md(\dot{\varepsilon}_q)^2$. Le *nombre d'inertie* I [36, 96] est défini comme la racine carrée du rapport de ces deux forces :

$$I = \dot{\varepsilon}_q \sqrt{\frac{m}{pd^{D-2}}} \tag{1.1}$$

Les expériences et simulations numériques montrent que le régime quasi-statique existe pour des valeurs de I inférieures à 10^{-3} [44, 79]. Dans ce régime, le comportement ne dépend pas de I. Par contre, les effets inertiels apparaissent pour des valeurs plus élevées de I et caractérisent le régime d'écoulements granulaires rapides.

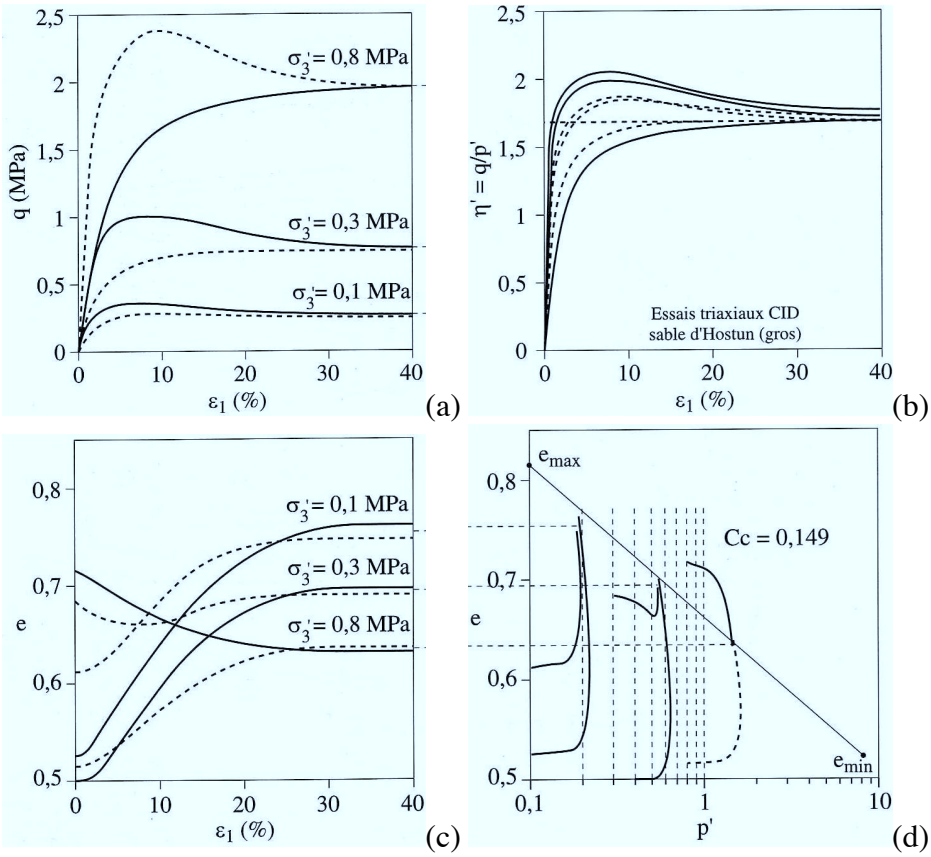


FIGURE *1.4* – *Essai triaxial sur un échantillon de sable : (a) La contrainte déviatorique $\sigma_1 - \sigma_3$ en fonction de la déformation axiale ε_1 pour trois valeurs différentes de la contrainte de confinement σ_3, et pour un échantillon initialement lâche (courbe pleine) et un échantillon initialement dense (courbe en pointillés) ; (b) les mêmes données avec la contrainte déviatorique normalisée par la pression moyenne ; (c) L'indice des vides e en fonction de ε_1 ; (d) L'indice des vides en fonction de la pression moyenne d'après [101].*

La figure 1.4 montre la réponse mécanique typique d'un matériau granulaire dans le régime quasi-statique. Les variables de contrainte et de déformation utilisées dans cette figure sont le

déviateur des contraintes $q = \sigma_1 - \sigma_3$, la déformation axiale ε_1 et l'indice des vides e défini comme le volume total des pores rapporté au volume total des particules. L'indice des vides est relié à la compacité ρ (fraction volumique occupée par les particules) :

$$e = (1 - \rho)/\rho \tag{1.2}$$

En partant d'un système initialement isotrope, la contrainte de cisaillement q augmente d'abord avec ε_1. Cette évolution est non linéaire quelle que soit la compacité initiale ρ_0 et tend vers un plateau plastique pour une contrainte q^* constante et une *compacité critique* ρ^* ou indice des vides critique e^* indépendantes de la compacité initiale ρ_0. Une propriété fondamentale des matériaux granulaires est que q^* est proportionnel à la pression moyenne p de telle sorte que la *résistance au cisaillement critique* est caractérisée par le rapport q^*/p [113]. Cette propriété reflète l'absence d'une contrainte intrinsèque au matériau en raison de la raideur des contacts entre les particules et de la nature de la loi de frottement de Coulomb qui régit les glissements aux contacts entre particules. La raideur des contacts entre les particules entraîne une faible déformation élastique des particules qui peut être de l'ordre de p/E, où E est le module de Young des particules.

Une autre propriété remarquable des milieux granulaires est le rôle crucial de l'indice des vides initial pour l'évolution des contraintes. Pour un indice des vides initial e_0 inférieur à l'indice critique e^* (état *dense*), après une faible contraction initiale, le matériau se dilate au cours du cisaillement et e augmente et tend vers sa valeur critique e^*. Cette augmentation du volume avec le cisaillement correspond à la *dilatance* de Reynolds [30]. Elle est caractérisée par le rapport $\dot{\varepsilon}_p/\dot{\varepsilon}_q$, où $\dot{\varepsilon}_p$ est le taux de déformation volumique et $\dot{\varepsilon}_q$ est le taux de déformation de cisaillement. Le rapport varie avec la déformation pour s'annuler dans l'état critique de sorte que la déformation d'un matériau granulaire dans l'état critique est isochore.

En parallèle avec la dilatance, le rapport q/p passe par un pic avant de relaxer vers sa valeur critique. Contrairement à la résistance critique, la contrainte au pic n'est pas intrinsèque au matériau et dépend de e_0. Elle est d'autant plus grande que la compacité initiale est plus élevée. Pour un indice des vides e_0 supérieur à e^* (état *lâche*), le matériau se contracte au cours du cisaillement et e diminue et tend vers e^* (dilatance négative). Dans ce cas, la contrainte de cisaillement augmente sans passer par un pic.

L'indice des vides critique ne dépend pas de l'état initial mais il dépend de la pression moyenne p. Pour les sables, cette dépendance est linéaire ; figure 1.4(d) :

$$e^* = e_0^* - C_c \log\left(\frac{p}{p_0}\right) \tag{1.3}$$

où C_c est une constante du matériau (coefficient de consolidation) et p_0 est une pression de référence prise ici égale à la pression de consolidation pour laquelle l'indice des vides critique à p_0 est e_0^* [113, 100]. Une relation logarithmique similaire est également observée entre l'indice des vides et la contrainte appliquée lors d'une compaction isotrope ou uniaxiale.

L'état critique constitue un état de référence dans la mesure où il ne dépend pas de l'état initial. Au cours du cisaillement, le système perd la mémoire de l'état initial et s'auto-organise

pour se trouver dans un état qui reflète uniquement les propriétés des grains et de leurs interactions. Cette perte de mémoire et le changement de volume après une déformation de l'ordre de 30% est une conséquence des réarrangements des particules et de l'évolution du réseau des contacts entres particules. Les déformations élastiques pour la plupart de matériaux granulaires sont faibles et ne dominent le comportement qu'à de très faibles déformations (de l'ordre de 10^{-5} pour la plupart de sols et des poudres dans les conditions normales d'utilisation). Ces faibles déformations élastiques sont responsables de la propagation du son dans les matériaux granulaires [106].

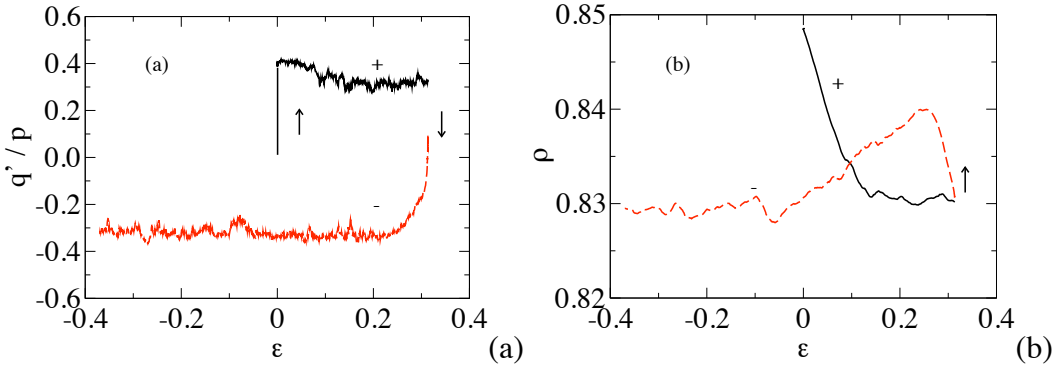


FIGURE *1.5* – *Evolution de la contrainte déviatorique $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$ normalisée par la contrainte moyenne $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ et de la compacité ρ en fonction de la déformation de cisaillement cumulée $\varepsilon_q = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ dans la simulation numérique 2D par la méthode de dynamique des contacts d'un test de cisaillement simple avec les conditions aux limites bi-périodiques d'après [85].*

Le comportement des matériaux granulaires présente aussi un caractère *anisotrope*, comme on peut l'observer sur la figure 1.5(a) où l'évolution de q/p est représentée en fonction de la déformation cumulée avant et après une inversion de la direction de la déformation à partir des simulations numériques par la méthode de dynamique des contacts. Le matériau atteint l'état critique dans la nouvelle direction après un long transitoire et sans que la contrainte passe par un pic. Il est remarquable que la compacité augmente immédiatement après l'inversion avant de diminuer vers la compacité critique ; figure 1.5(b). De ce fait, si la direction de la déformation est périodiquement inversée avec une faible amplitude de déformation, la compacité augmente après chaque changement de direction et tend vers une compacité bien plus élevée que la compacité critique ; figure 1.6. Ce phénomène de *ratcheting* est contrôlé par l'anisotropie intrinsèque du matériau imprimée dans sa texture [53].

Le comportement quasi-statique des matériaux granulaires peut ainsi être décrit comme un comportement élasto-plastique avec trois propriétés essentielles :

1. *plasticité non-associée* : la direction de la déformation est donnée par la dilatance qui est différente de celle donnée par la normale à la surface de charge déterminée par le critère de Coulomb (cf. §1.3.4) ;
2. *écrouissage ou hardening* : le seuil plastique q/p évolue avec la déformation plastique ;
3. *anisotropie* : le seuil plastique dépend de la direction de sollicitation.

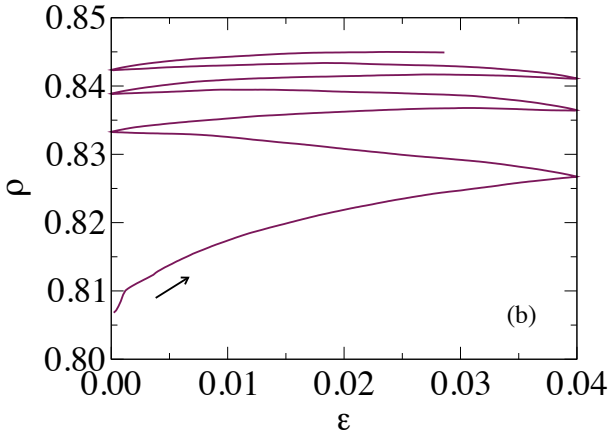


FIGURE *1.6* – *Evolution de la compacité en fonction de la déformation de cisaillement cumulée $\varepsilon_q = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ dans un cisaillement simple cyclique simulé par la méthode de dynamique des contacts avec les conditions aux limites bi-périodiques d'après [85].*

1.3.2 Modèles de comportement

Le comportement expérimental des matériaux granulaires est souvent décrit dans le cadre de modèles phénoménologiques dont le plus classique est le modèle Mohr-Coulomb pour le comportement en cisaillement. Dans ce modèle, le matériau ne se déforme que lorsque le niveau du déviateur des contraintes atteint sa valeur critique. Dans cet état, le système se déforme plastiquement avec un niveau de contrainte constant. Il s'agit donc d'un modèle rigide-plastique caractérisé par un seuil plastique. Ce seuil est défini comme un rapport des contraintes de sorte que la surface limite de charge est un cône. En d'autres termes, dans l'espace des contraintes normale et tangente sur un plan (σ_n, σ_t), la surface de charge est donnée par deux droites $\sigma_t = \pm\sigma_n \tan\varphi$. Le milieu se déforme lorsque la condition $\sigma_t = \pm \tan\varphi\, \sigma_n$ est atteinte au moins sur un plan, caractérisé par son orientation. L'angle φ est l'*angle de frottement interne* du matériau.

Le modèle de Mohr-Coulomb ne décrit pas les mécanismes de déformation, mais une image associée à ce modèle consiste à supposer que lors de la rupture le matériau granulaire se scinde en deux blocs rigides glissant l'un par rapport à l'autre suivant un plan de rupture. En réalité, il peut y avoir une infinité de plan de rupture dans le matériau. Ce mécanisme de localisation du cisaillement est effectivement observé dans les matériaux granulaires, mais contrairement au modèle de Mohr-Coulomb (ou matériau idéal de Coulomb), l'orientation des plans de rupture est contrôlé à la fois par l'angle de frottement interne et par la dilatance [68]. La bande de localisation a une largeur de l'ordre de 10 à 20 fois le diamètre moyen [24].

Un modèle plus réaliste, qui prend en compte les déformations volumiques, est le *modèle des états critiques* développé pour les sols (critical-state soil mechanics) [100, 113]. Ce modèle est basé sur la plasticité associée, l'existence d'un angle de frottement interne et la relation 1.3. Dans ce modèle, la compacité apparaît comme une variable d'écrouissage qui contrôle la réponse du système à tout instant. Ce modèle ne peut décrire le comportement d'un matériau granulaire que pour une sollicitation monotone.

La dépendance par rapport à la direction de sollicitation implique l'introduction de variables internes à caractère tensoriel décrivant l'anisotropie du milieu. Les études les plus récentes dans ce domaine font appel à des simulations par éléments discrets, mais plusieurs modèles phénoménologiques existent sans toutefois conduire à un consensus clair établi autour d'un modèle particulier. En fait, la complexité introduite par plusieurs variables internes et la nécessité de modéliser l'évolution de chaque variable est telle qu'il apparaît plus simple et physiquement plus satisfaisant de s'appuyer sur une *approche par éléments discrets* ou sur une *approche multi-échelles* permettant de relier les variables de texture, c'est-à-dire une description de l'organisation des particules et de leurs contacts dans l'espace, au comportement macroscopique.

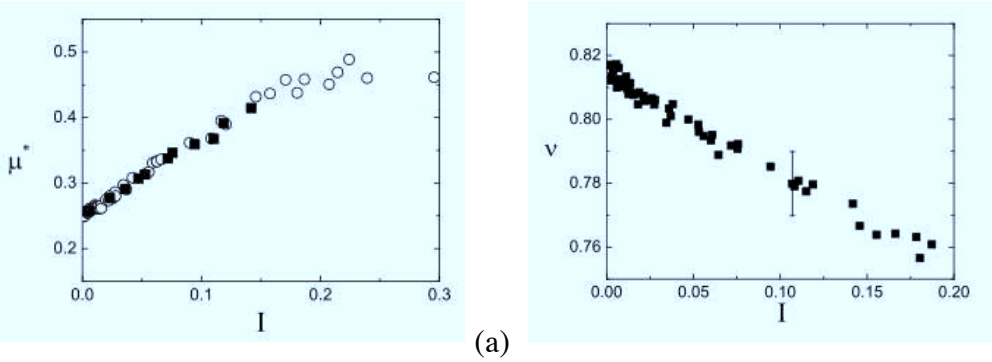


FIGURE ***1.7*** *– Le coefficient de frottement interne μ^* et la compacité ν en fonction du nombre d'inertie I dans les simulations numériques discrètes d'un système 2D en cisaillement d'après [16].*

Plusieurs études récentes montrent que tous les traits du comportement quasi-statique brièvement évoqués plus haut, restent valables également dans le régime des écoulements granulaires rapides, avec un état critique qui varie en fonction du nombre d'inertie I. L'angle de frottement interne φ^* (pour μ^*) augmente avec I tandis que la compacité critique ρ^* (pour ν) diminue :

$$\varphi^* = \varphi^*(I=0) + f(I), \tag{1.4}$$

$$\rho^* = \rho^*(I=0) - g(I), \tag{1.5}$$

où $f(I)$ et $g(I)$ sont des fonctions croissantes de I (voir figure 1.7). La connaissance de ces fonctions a permis de décrire correctement de nombreuses observations expérimentales dans différentes géométries d'écoulement [36].

1.3.3 Méthodes numériques

La première mise en pratique d'une approche par éléments discrets est réalisée par Cundall à la fin des années soixante avec la méthode aux éléments distincts (Distinct Element Method ou DEM) dédiée à des applications de mécanique des sols [15]. Les approches discrètes sont cohérentes avec la nature divisée et le comportement complexe des milieux granulaires. En

effet, la complexité du comportement des milieux granulaires résulte de la manière spécifique dont les particules interagissent les unes avec les autres. Afin de mieux comprendre ces milieux, il s'avère donc nécessaire de les modéliser dans l'état c'est-à-dire comme un ensemble de corps indépendants en interaction mutuelle.

Ces approches constituent un appui non négligeable à l'expérimentation dans le sens où elles permettent d'accéder à un certain nombre d'informations inaccessibles (force de contacts, orientation des contacts, ...). Enfin, les approches discrètes permettent de multiplier les expériences numériques dans le but d'étudier l'influence de certaines caractéristiques physiques des particules (granulométrie, morphologie, ...) sur le comportement local et collectif du système. Elles permettent au final de tenir compte d'une certaine réalité physique du comportement à l'échelle des particules nécessaire à la compréhension des milieux granulaires.

Les approches par éléments discrets reposent sur deux familles de méthodes numériques : les méthodes régulières (Smooth Methods) dont la méthode aux éléments distincts de Cundall fait partie et les méthodes non-régulières (Nonsmooth Methods). La méthode de dynamique moléculaire (Molecular Dynamics ou MD) [15, 78, 50, 59] et la méthode de dynamique des contacts (Contact Dynamics ou CD) [66, 67, 64, 41, 83, 42] sont respectivement les méthodes régulière et non-régulière les plus employées à ce jour.

La différence essentielle entre les approches régulière et non régulière réside dans la modélisation des interactions de contacts.

Dans les approches régulières, les interactions sont décrites de manière explicite. En d'autres termes, il existe une application qui lie les forces de contact à la configuration géométrique des particules en contact. Par exemple, la réaction normale qui s'oppose à la pénétration de deux corps est prise comme proportionnelle à cette distance de pénétration. Ce modèle d'interaction permet de rendre compte des déformations élastiques au contact des particules. Le mouvement des particules se trouvent être deux fois différentiables, par conséquent les équations de la dynamique s'écrivent sous forme d'équations différentielles ordinaires, qui peuvent être intégrées aisément. Ces approches utilisent des schémas d'intégration explicites avec un pas de temps faible devant le temps de réponse élastique du contact.

Dans les approches non-régulières, en particulier la méthode CD, les interactions de contact sont décrites par des lois de contact dites non régularisées. Ces lois de contact sont la condition d'interpénétrabilité des corps, et le frottement sec de Coulomb. On ne tient donc pas compte d'une description fine du contact comme dans les méthodes régulières. Par conséquent, le temps caractéristique du système est fixé par rapport à la dynamique des particules. Le mouvement des particules n'est plus régulier, mais comporte des sauts de vitesse traduisant les collisions multiples et des frottements collectifs entre les particules. En raison de ces discontinuités, les équations du mouvement sont écrites sous une forme intégrée et nécessitent un schéma d'intégration implicite pour les résoudre. En conséquence directe, la CD admet des pas de temps bien plus grands que la MD. Il est à noter que la modélisation des interactions de contact suivant l'approche CD est en accord avec l'hypothèse de rigidité des agrégats de cristallites.

1.3.4 Milieux granulaires cohésifs

Les milieux granulaires cohésifs interviennent dans de nombreux domaines de recherche, des poudres fines jusqu'aux couches sédimentaires cohésives en géologie. Ces matériaux sont caractérisés à la fois par une résistance à la traction et par une résistance au cisaillement. On peut distinguer les matériaux *faiblement cohésifs*, dont le comportement est proche des milieux non cohésifs, des matériaux *fortement cohésifs*, dont le comportement est essentiellement dicté par la cohésion. Les poudres (non frittées) sont des matériaux faiblement cohésifs. Elles s'écoulent et se manipulent comme les matériaux non cohésifs. Le paramètre sans dimension qui détermine le degré d'importance de la cohésion dans un milieu granulaire est le rapport de l'intensité des forces de cohésion entre les particules à la pression de confinement. Une poudre très cohésive lorsqu'elle est manipulée sans confinement (soumis uniquement à son poids) se comporte comme un milieu non cohésif soumis à une forte pression de confinement.

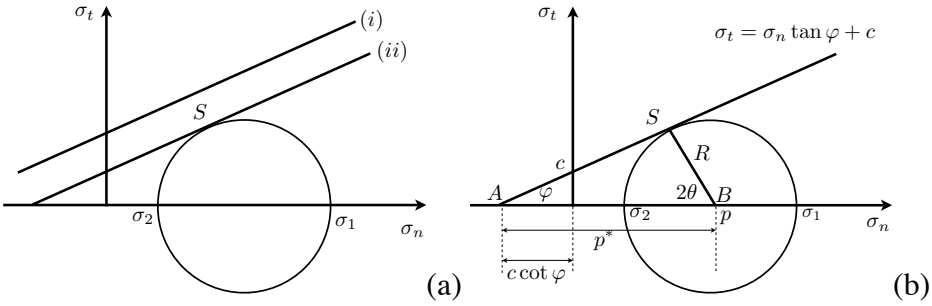


FIGURE *1.8 – Cercle de Mohr et la droite caractérisant la surface limite de charge dans le modèle de Coulomb. (a) états de contrainte possibles par rapport à la surface de charge, (b) représentation du critère de Mohr-Coulomb et de ces paramètres.*

Pour les mêmes raisons évoquées dans le cas de milieux non cohésifs, la surface limite de charge d'un matériau granulaire cohésif est un cône avec la particularité de présenter une valeur non-nulle à l'origine [68]

$$\sigma_t = \pm(\tan\varphi\, \sigma_n + c) \tag{1.6}$$

où c est le paramètre de cohésion. Cette relation est assez bien vérifiée par les expériences qui indiquent que l'angle de frottement interne dans l'état critique est le même en compression et en extension [113] (figure1.8(a)). Il faut remarquer que la cohésion c, telle qu'elle est introduite dans l'équation 1.6, décrit la rupture en cisaillement pour une contrainte normale nulle. Le seuil de rupture théorique (ou la résistance à la traction) est donné par $\sigma_n = -c/\tan\varphi$.

La relation 1.6 en association avec la représentation de l'état des contraintes par le cercle de Mohr, permet de déterminer le plan de rupture. Le cercle de Mohr est déterminé par son rayon R, qui correspond à la contrainte déviatorique, et la position de son centre qui correspond à la contrainte moyenne p. Le diagramme de la figure 1.8(a) met en évidence deux possibilités

(1) le cercle de Mohr est entièrement sous la droite de Coulomb (i). Quel que soit l'état de contrainte (σ_n, σ_t), on a $\sigma_t < \mu\, \sigma_n + c$, où $\mu = \tan\varphi$ est le coefficient de frottement interne, et donc il n'y a pas de rupture par glissement au sein du matériau.

(2) le cercle de Mohr est tangent à la droite de Coulomb en un point S. Dans ce cas, il existe au moins un plan Π (représenté dans le cercle de Mohr par le point S) tel que $\sigma_t = \mu\sigma_n + c$.

D'après la figure 1.8(b), le rayon du cercle de Mohr R est donné par $q = p^* \sin\varphi$ où p^* est la distance entre le centre du cercle (point B) et l'intersection de la droite de Coulomb avec l'axe des contraintes normales (point A). En 2D, les contraintes principales sont données par

$$\sigma_1 = p^*(1 + \sin\varphi) - c\cot\varphi, \tag{1.7}$$
$$\sigma_2 = p^*(1 - \sin\varphi) - c\cot\varphi. \tag{1.8}$$

En ajoutant les équations ci-dessus, et en utilisant la relation $p^* = q/\sin\varphi$, on obtient

$$\frac{q}{p} = \sin\varphi + \frac{c}{p}\cos\varphi \tag{1.9}$$

avec $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ et $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$.

Comme on peut le voir sur la figure 1.8(b), la connaissance de l'angle de frottement interne φ permet de déterminer l'angle $\theta - \theta_\sigma$ que fait le plan de cisaillement (ou de glissement) avec la direction principale majeure θ_σ. Une orientation 2θ du plan de cisaillement par rapport à la direction principale majeure sur le diagramme de Mohr-Coulomb correspond à une orientation θ du plan de glissement. On obtient ainsi que l'angle entre le plan de glissement et la direction principale majeure est $\theta - \theta_\sigma = \pi/2 - \varphi/2$.

La résistance au cisaillement d'un matériau granulaire cohésif comporte ainsi deux paramètres indépendants : l'angle de frottement interne φ et la cohésion adimensionnée c/p. Ce dernier permet au milieu de rester en équilibre statique sans se déformer plastiquement même pour un frottement interne nul ou pour une pression de confinement nulle. C'est cette propriété qui permet à l'angle de talus d'augmenter au-delà de φ [38].

Remarquons que, dans le cas d'un milieu faiblement cohésif, les particules sont mobiles et la cohésion évolue avec la déformation. La valeur de c dans l'équation 1.6 correspond à la valeur mesurée dans l'état critique. Lorsque la cohésion est importante, les particules sont beaucoup moins libres de se déplacer et, par conséquent, le milieu subit une *rupture* fragile sans se plastifier (sans se réarranger). Pour cette raison, ces matériaux sont souvent étudiés dans le cadre de la mécanique de la rupture [21, 22, 23].

En technologie des poudres, la cohésion interparticulaire joue un rôle majeur dans les propriétés mécaniques et géométriques des compacts. Le niveau de la cohésion interparticulaire peut entraîner l'apparition de structures granulaires mécaniquement stable caractérisées par une forte porosité. La présence de ces structures rend leur densification difficile et conduit à des hétérogénéités dans la distribution des contraintes et de la densité au sein des compacts. Ces hétérogénéités de densité sont à l'origine de la fragilité des compacts lors de leur manipulation, et perturbent localement les mécanismes de consolidation lors du processus de frittage qui suit l'étape de mise en forme. Ces aspects peuvent être pénalisant pour les industriels dans le domaine de la technologie des poudres. Dans le cas des poudres céramiques comme l'UO_2 cet aspect peut être accentué par la morphologie dendritique des agrégats de cristallites qui

contribue à diminuer leur capacité de réarrangement en raison des phénomènes de blocages par enchevêtrement mais aussi à cause du frottement intergranulaire qui se trouve accentué. Ces phénomènes en rapport avec la compaction des poudres de type céramique et métallique ont été étudiés numériquement par de nombreux chercheurs [47, 48, 58, 55, 57, 56].

Dans la littérature granulaire récente on trouve plusieurs études numériques menées par les méthodes par élémets discrets tenant compte de la cohésion intergranulaire. Par exemple, Richefeu et al. ont étudié l'effet de la capillarité dans les sables humides par la méthode de dynamique moléculaire [90]. Luding a proposé dans [51] une étude du comportement en cisaillement des matériaux granulaires cohésifs avec la méthode de dynamique moléculaire par des essais de compression biaxiale. Bartels, Kadau, Wolf et al. [45, 7] ont étudié la texture et plus précisément l'effondrement inélastique des pores sous des conditions de compression oedométrique à partir d'échantillons numériques de faible densité. Yang et al. [114] ont étudié numériquement, l'effet de la taille des particules et par conséquent des forces de Van der Waals sur la structure des forces normales de contact. Bien que ces travaux concernent des aspects différents du comportement des matériaux granulaires cohésifs, on peut souligner que la majeure partie des modèles granulaires utilisés prennent en compte des particules sphériques. Or, en l'absence de cohésion, certains matériaux granulaires peuvent montrer une cohésion. Cette cohésion qualifiée de cohésion apparente, se manifeste en raison de la géométrie des particules et de la qualité d'empilement des échantillons et non par des phénomènes d'attraction physico-chimique [63]. La rugosité de deux surfaces en contact provoque une résistance à leur séparation par glissement. C'est un aspect qui a été exploré dans nos études.

1.3.5 Texture granulaire

La texture et le comportement des matériaux granulaires à l'échelle des particules ont fait l'objet de nombreuses études depuis les années 60. La micromécanique des matériaux granulaires a émergé de ces études en motivant des approches micro-macro dès les années 80. Un peu plus tard, les physiciens se sont intéressés également à la phénoménologie des milieux granulaires en y apportant notamment des concepts de la mécanique statistique [40, 31, 81, 61].

D'une manière générale, la texture traduit la manière dont les particules s'arrangent dans un empilement. Elle peut être appréhendée en s'intéressant à la distribution des phases poreuses et des phases solides, à l'orientation des particules dans le cas où celles-ci sont anisotropes, à l'orientation des contacts entre particules ou plus encore à la coordinence. C'est une caractéristique purement géométrique qui a son importance dans l'étude du comportement mécanique des matériaux granulaires. Par exemple, il est bien connu que la compression biaxiale induit une anisotropie dans l'orientation des contacts (tout les contacts s'orientant dans la direction principale majeure) [74, 72] et que cette structure granulaire supporte la majeure partie du chargement extérieur et donc contribue à accroître la résistance mécanique des matériaux granulaires. L'obtention d'une structure granulaire anisotrope à partir d'un état de contrainte anisotrope est inévitable dans le cadre des matériaux granulaires. La question qui se pose est comment évolue cette structure granulaire en fonction de la non-convexité des grains.

A l'ordre le plus bas, la géométrie du réseau des contacts est caractérisée par le nombre de coordination Z, nombre moyen de particules en contact avec une particule donnée. La valeur de Z décrit la connectivité moyenne des particules et elle varie au cours de la déformation à l'intérieur des limites imposées, d'une part, par les exclusions stériques et, d'autre part, par la condition d'équilibre de chaque particule.

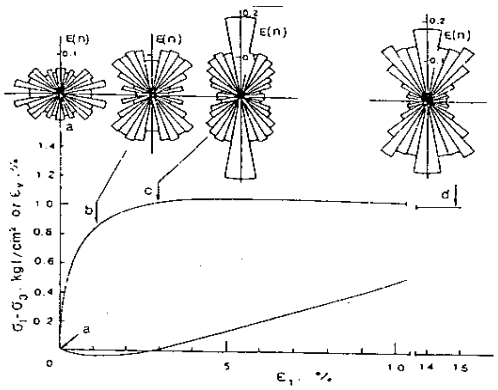
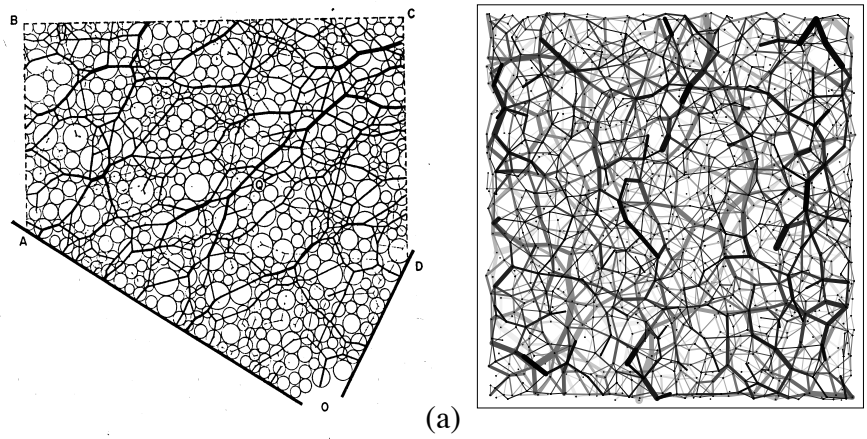


FIGURE *1.9* – *La contrainte de cisaillement $\sigma_1 - \sigma_3$ et la déformation volumique cumulée ε_v en fonction de la déformation axiale ε_1 dans un test de compression bi-axiale sur un échantillon de disques. La distribution des orientations des contacts est représentée par un diagramme polaire à plusieurs stades de déformation. A l'état initial, il y a plus de contacts avec une orientation horizontale. Le nombre de contacts avec une orientation verticale augmente au cours de la compression verticale et devient prépondérant dans l'état critique [74].*

Cette description peut être encore enrichie en considérant les directions $\vec{n}$ des contacts. La distribution statistique normalisée des contacts $P(\vec{n})$ décrit la fraction de contacts orientés dans un petit secteur angulaire autour de $\vec{n}$. Les expériences et simulations montrent que cette distribution n'est pas uniforme [73, 11, 107, 95, 87]. En partant d'un système initialement isotrope, $P(\vec{n})$ évolue au cours du cisaillement en corrélation avec q/p et devient très anisotrope dans l'état critique. Cette observation indique que l'anisotropie du milieu contribue fondamentalement à augmenter sa capacité à supporter des chargements déviatoriques (voir figure 1.9). Les paramètres décrivant l'anisotropie du milieu peuvent être extraits de la distribution $P(\vec{n})$. De nombreuses études indiquent que cette distribution prend une forme relativement simple lors d'une déformation homogène, de telle sorte qu'un seul paramètre scalaire suffit généralement pour caractériser l'anisotropie du réseau des contacts [60, 93].

La répartition très hétérogène des forces de contact est une autre propriété remarquable des milieux granulaires [18]. Comme on peut voir sur la figure 1.10, le réseau des forces normales comporte un grand nombre de contacts qui transmettent des forces normales dites *faibles* (i.e inférieure à la force normale moyenne). Par ailleurs, un nombre plus faible de contacts portent des forces normales dites *fortes* (i.e supérieures à la force normale moyenne) et forment des structures filamentaires appelées *chaînes de force*.

L'analyse des anisotropies du réseau des contacts et du réseau des forces a permis de mettre en évidence le *caractère bimodal* de la transmission des forces [82, 86]. Le réseau dit *faible* contient 60% des contacts mais ne contribue que pour 30% à la pression moyenne. Ce réseau contient tous les contacts qui portent une force normale f_n inférieure à la force moyenne $\langle f_n \rangle$. Le réseau *fort*, complémentaire au réseau faible, porte toute la contrainte déviatorique et 60% de la pression moyenne. La distribution $P(f_n)$ des forces normales dans le réseau fort est exponentielle décroissante. Elle est presque uniforme ou en loi de puissance dans le réseau faible (voir figure 1.11).



(a) (b)

FIGURE *1.10* – *(a) Le réseau des forces dans un échantillon de disques obtenu à l'aide de l'effet photoélastique et encodé par l'épaisseur des traits reliant les centres des disques [28] ; (b) Le réseau des forces dans une tranche à l'intérieur d'un échantillon numérique composé de particules sphériques et simulé par la méthode de dynamique des contacts. Dans les deux cas, la largeur des traits est proportionnelle à la force normale tandis que leur niveau de gris représente la profondeur du champ dans le cas (b) [89].*

L'hétérogénéité des forces soulève le problème de la définition d'une échelle représentative pour le milieu. Les forces de contact sont corrélées sur une distance d'environ $10d$ où d est le diamètre moyen des particules. La taille linéaire du *volume élémentaire représentatif* (VER) du milieu doit être donc supérieure à $10d$. D'habitude, le VER correspond à une échelle où les valeurs moyennes des grandeurs microscopiques sont bien définies. Dans le cas d'un milieu granulaire, où l'état microscopique est caractérisé par des distributions du type $P(\theta)$ et $P(f_n)$, on peut définir le VER par un volume suffisamment grand pour que ces distributions soient bien représentées [84]. Les simulations numériques montrent que ces distributions sont assez bien définies pour des systèmes de taille minimum $50d$. Les parois rigides ou une forte cohésion entre particules ont pour effet de renforcer les corrélations et peuvent donc sensiblement modifier ces valeurs.

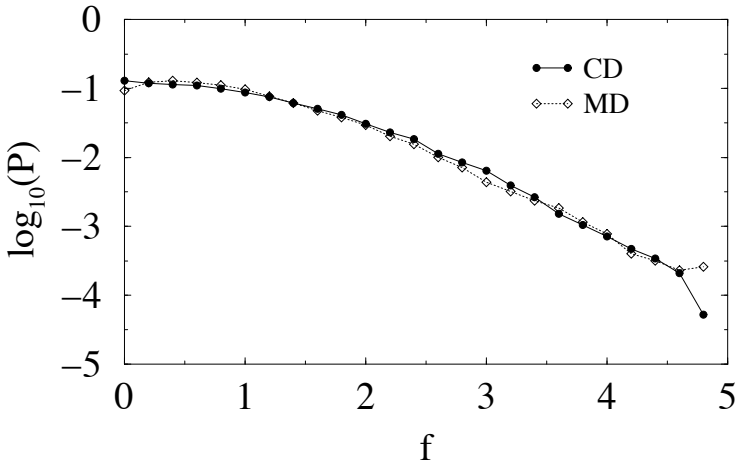


FIGURE *1.11* – *Densité de probabilité des forces normales dans deux systèmes identiques composés de disques avec une faible polydispersité de taille, simulés par les méthodes de dynamique moléculaire (MD) et dynamique des contacts (CD) d'après [91].*

1.3.6 Influence des paramètres matériels

Les études quantitatives des propriétés rhéologiques et microstructurales des milieux granulaires depuis 30 ans portent majoritairement sur des systèmes modèles constitués de particules rondes (disques en 2D ou sphères en 3D) de faible étalement de taille et interagissant essentiellement par des contacts frottants. Ce modèle minimaliste est, en effet, suffisamment riche pour représenter le dénominateur commun de tous les matériaux granulaires. La complexité du comportement dans ce système modèle est liée à la fois à la forte non-linéarité des interactions par contact frottant et à la dynamique d'ensemble qui conduit à des propriétés émergentes. L'applicabilité des résultats de ces études aux matériaux réels rencontrés dans diverses applications d'ingénierie n'est néanmoins pas évidente dans la mesure où les particules réelles se présentent très souvent avec des formes variées non-sphériques et des granulométries étalées, et elles interagissent par des forces de cohésion de natures physico-chimiques très différentes.

Dans ce contexte, il devient impératif d'aller au-delà du système minimaliste pour explorer les mécanismes physiques se trouvant à l'origine de la modulation du comportement par rapport au modèle minimaliste. Certaines études réalisées autour de cette question montrent que l'effet de ces paramètres matériels est loin d'être intuitif [96]. Déjà dans le cadre du modèle minimaliste, le lien entre le coefficient de frottement macroscopique $\mu^* = \tan\varphi^*$ et le coefficient de frottement de glissement μ_s entre particules n'est pas linéaire. μ^* est non-nul pour $\mu_s = 0$. Ensuite, il augmente avec μ_s et sature à une valeur indépendante de μ_s ; voir figure 1.12. Cette saturation indique clairement que la valeur de μ^* n'est pas une conséquence directe des interactions binaires entre particules mais qu'elle reflète également dans une large mesure la structuration interne du matériau. C'est aussi vrai pour l'effet des coefficients de restitution lors des collisions entre particules. Ces paramètres élastiques n'ont pratiquement aucun effet sur le comportement plastique des milieux granulaires.

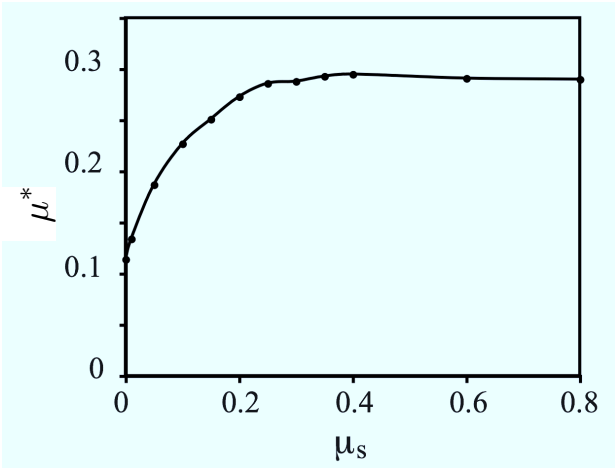


FIGURE *1.12* – *Evolution du frottement effectif μ^* en fonction du frottement solide μ_s.*

De telles études systématiques de l'influence des paramètres matériels sont expérimentalement difficiles à mettre en œuvre. Au niveau de simulations numériques, des développements numériques supplémentaires sont souvent nécessaires et les calculs sont souvent plus longs du fait de la nécessité de traitement approprié des interactions (détection des contacts, calcul des forces, ...). Par exemple, un élément de volume représentatif d'un matériau très polydisperse comporte nécessairement un nombre important de particules de petite taille, ce qui augmente considérablement le temps de calcul même pour une distribution de tailles sur une décade. Une méthodologie a été récemment mise en œuvre pour optimiser le nombre de particules en fonction de la distribution granulométrique dans une géométrie 2D [110, 111]. Les études numériques réalisées ont permis de montrer que, contrairement à toute attente, l'angle de frottement interne φ^* est pratiquement indépendant de l'étalement granulométrique (voir figure 1.13).

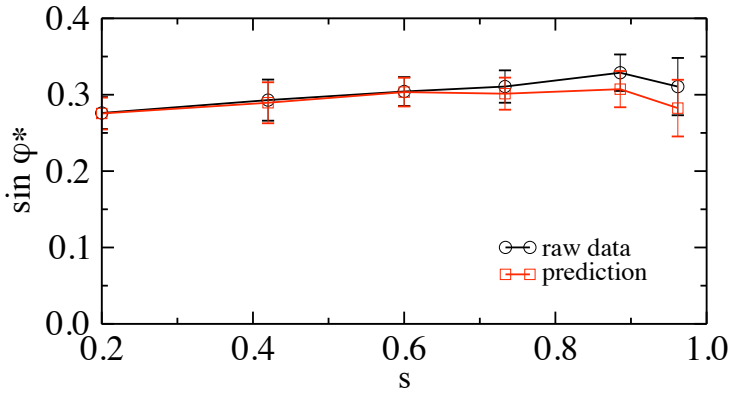


FIGURE *1.13* – *La résistance au cisaillement $\sin\varphi^* = q^*/p$ dans un cisaillement simple simulé par dynamique des contacts en fonction de l'étalement granulométrique $s = (R_{max} - R_{min})/(R_{max} + R_{min})$ d'après [110].*

.

L'influence des forces de cohésion entre particules sur le comportement et notamment son lien avec la cohésion de Coulomb c est un autre problème intéressant. La cohésion entre deux particules se traduit par le gel partiel des degrés de liberté relatifs des deux particules. En 2D, il y a trois degrés de liberté : (1) déplacement relatif v_n suivant la normale au contact $\vec{n}$, (2) glissement v_t suivant $\vec{t}$, le vecteur unitaire perpendiculaire à $\vec{n}$, et (3) roulement sans glissement v_r (définie comme la différence entre les rotations des deux particules autour du point de contact). Les efforts associés sont respectivement (1) la force normale f_n, (2) la force tangentielle f_t, et (3) le couple de contact f_r. Le déplacement relatif normal est naturellement interdit par la force de répulsion du type "cœur dur" lorsque les deux particules tendent à s'interpénétrer. La cohésion normale implique également une force d'attraction permettant au contact de résister à une force de traction (séparation) agissant sur les deux particules. La force tangentielle est la force de frottement, qui en dessous du seuil de Coulomb ($f_t = \mu_s f_n \mathrm{sign}(v_t)$) bloque le glissement relatif. Enfin, le couple ponctuel de contact s'apparente à une résistance au roulement dont l'action est similaire au frottement de glissement.

La caractérisation la plus simple du contact cohésif consiste à introduire un seuil pour chacun des efforts considérés. Le seuil pour la traction est une force $-f_c$, la force d'attraction la plus grande (en valeur absolue) appliquée par chacune des particules sur l'autre lorsqu'elles sont en contact. Pour le glissement le seuil est donné par le coefficient de frottement μ_s. Pour le roulement on peut, de même, introduire un coefficient de frottement de roulement μ_r. Avec ces seuils, les deux particules restent *soudées* l'une à l'autre tant qu'aucun effort de contact n'a atteint son seuil. Ce soudage ou cimentation du contact peut provenir de la présence d'un pont (liant) solide entre deux particules. Mais les origines physiques pour les trois actions peuvent également être très différentes. Par ailleurs, la rupture (lorsqu'un des seuils est atteint) peut être réversible ou irréversible. Enfin, pour un chargement combiné, la valeur du seuil de rupture est une fonction des seuils élémentaires.

Les forces d'attraction résultent à la fois des propriétés de l'interface entre particules, comme la rugosité, et de la taille des particules. En dessous de 100 μm, les interactions dominantes sont d'origines physico-chimiques (forces de van der Waals, forces électrostatiques, ponts capillaires, ...). La cohésion des poudres et des suspensions colloïdales résulte de ce type d'interactions. Dans la gamme millimétrique, les forces d'adhésion peuvent provenir de l'énergie de surface γ. Mais, l'adhésion entre deux particules peut être également induite par un pont liquide (force capillaire), ou encore par un pont solide (colle, liant).

Pour établir le lien entre l'adhésion locale et la cohésion de Coulomb, il faut prendre en compte la texture désordonnée du système. Par exemple, en utilisant une approche par homogénéisation statistique, une relation a été récemment proposée entre la résistance locale à la traction $-f_c$ et la cohésion de Coulomb dans une géométrie de cisaillement simple [90]. Cette relation s'écrit

$$c = \frac{3}{4\pi}\mu^* s \frac{\rho Z}{\langle d \rangle} f_c. \tag{1.10}$$

où s est une fonction de la granulométrie. Cette relation est bien vérifiée par les expériences de cisaillement simple pour un matériau humide où les forces d'attraction sont d'origine capillaire. Une autre étude montre que l'étalement granulométrique amplifie l'effet de l'adhésion entre

les particules et conduit de ce fait à une cohésion macroscopique croissante en fonction de l'étalement (voir figure 1.14).

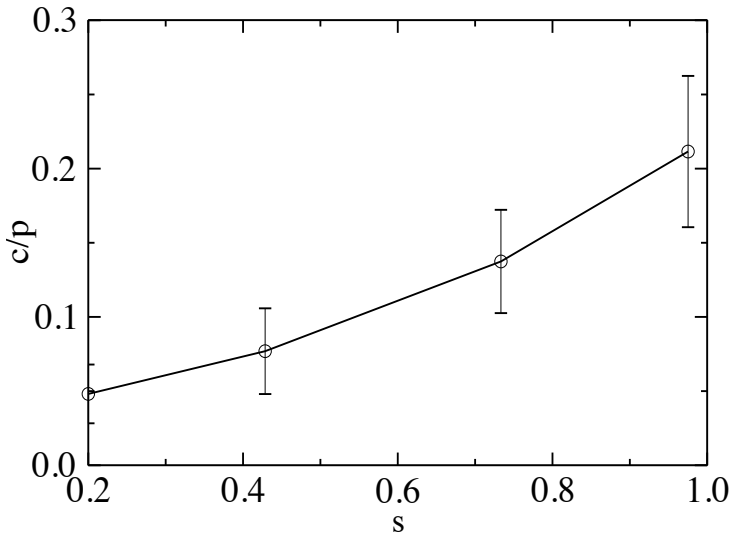


FIGURE *1.14* – *La cohésion macroscopique normalisée par la pression moyenne c/p dans l'état stationnaire pour un système de disques en cisaillement simple simulé par la méthode de dynamique des contacts en fonction de l'étalement granulométrique s [110].*

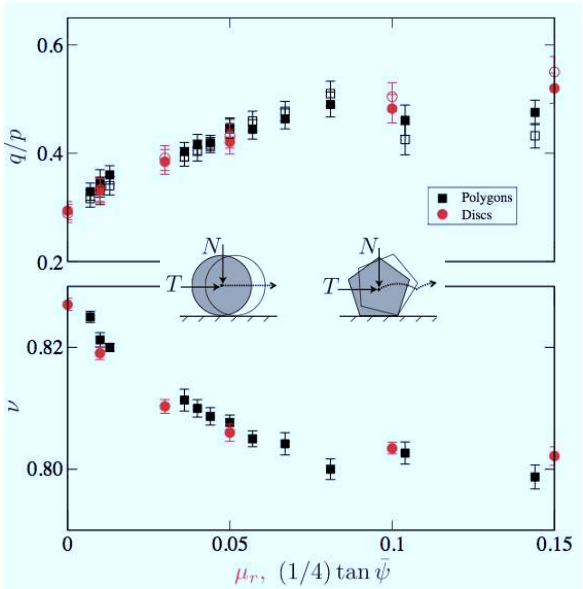


FIGURE *1.15* – *La résistance au cisaillement q^*/p et la compacité critique ν^* de deux systèmes composés respectivement de disques interagissant par un coefficient de frottement de roulement μ_r (en plus d'un frottement de glissement) et de polygones réguliers avec un nombre croissant du nombre de côtés. Le paramètre ψ est inversement proportionnel au nombre de côtés d'après [33].*

Le roulement est un mécanisme de déformation qui dissipe peu dans les milieux granulaires et c'est la raison pour laquelle il est souvent négligé dans les simulations numériques et les modélisations des matériaux granulaires. Or, les interactions cohésives impliquent souvent une forte résistance au roulement. De même, du point de vue numérique, ce paramètre a une valeur d'ajustement remarquable qui permet de caler les résultats numériques sur les données expérimentales. En effet, une résistance au roulement avec les particules de forme sphérique peut avoir le même effet (sur le frottement interne du milieu, par exemple) qu'une forme non-sphérique des particules sans résistance au roulement [32, 33]. Cette correspondance a été récemment fondée sur une base solide à l'aide d'études paramétriques (voir figure 1.15).

La forme des particules est un paramètre granulaire majeur pour la rhéologie et la texture des matériaux granulaires. Cet aspect qui nous intéresse plus particulièrement dans le cadre de cette thèse, sera discuté d'une manière un peu plus détaillée dans le paragraphe suivant.

1.4 Influence de la morphologie des particules

La prise en compte de la morphologie des grains est essentielle pour améliorer notre compréhension du comportement des matériaux granulaires. En effet, la forme des particules d'un matériau granulaire influence ses propriétés d'empilement (compacité), sa texture (distribution des phases vide et solide, réseau de contact) et sa cinématique (mobilisation du frottement intergranulaire, rotation). Dans cette section, nous allons donner un aperçu rapide de la description de la forme des particules d'un matériau granulaire, sa prise en compte dans les modèles par éléments discrets et quelques résultats d'études numériques et expérimentales concernant l'influence de la forme des particules.

1.4.1 Description de la forme des particules

La caractérisation précise de la morphologie de particules réelles (3D) demeure une tâche complexe en dépit de la puissance des moyens informatiques actuels dédiés au traitement d'image [8]. La forme des particules est dépendante de l'échelle d'observation. La sphéricité, l'élongation (rapport d'allongement) et le degré d'aplatissement sont des descripteurs usuels de la forme à l'échelle des grains. A une échelle plus fine, c'est-à-dire à l'échelle des aspérités, on caractérise généralement la texture en termes de rugosité, d'angularité, ou de rondeur.

Les premiers travaux portant sur la caractérisation de la forme des particules ne sont pas récents. En effet, des auteurs tels que Wadell en 1932 ; Krumbein et Pettijohn en 1938 et 1957 ou encore Lees en 1964 sont les premiers à avoir développé des méthodes de caractérisation de la forme des particules [8]. Ces méthodes étaient avant tout dédiées à la caractérisation de particules dans le domaine de la sédimentologie. Aujourd'hui les besoins de caractérisation de la morphologie des systèmes granulaires touchent de nombreux domaines (industrie céramique, génie civil, ...). Nous pouvons distinguer deux catégories de méthodes de caractérisation :

– Les méthodes que nous qualifierons de géométriques car elles se basent sur la comparaison de formes réelles à des géométries connues (disques, ellipses) et sur une classification par des indices de forme utilisant des longueurs caractéristiques.
– Les méthodes analytiques basées sur l'utilisation de concepts et d'outils mathématiques tels que la géométrie fractale ou la description de profil par analyse de Fourier.

1.4.1.1 Méthodes géométriques

Les méthodes géométriques reposent sur l'emploi d'indices de forme calculés à partir de longueurs caractéristiques associées aux particules : sphéricité, élongation, angularité, rondeur .... Certaines de ces caractéristiques morphologiques peuvent avoir plusieurs définitions. Par exemple, la définition originelle de la sphéricité d'une particule donnée par Wadell (1932) [8] est le rapport entre le volume de la particule et le volume de la sphère circonscrite. Cependant, cette définition de Wadell peut ne pas être applicable en l'état car la détermination précise du volume des particules tridimensionnelles n'est pas une tâche facile. De ce fait, certains auteurs ont proposé des caractérisations alternatives, plus pratiques. Par exemple des paramètres de forme construits à partir des dimensions de la surface projetée en 2D des particules réelles ont été utilisés, on parle alors d'indice de circularité. La figure 1.16 montre quelques définitions de ces indices de circularité. La figure 1.17, montre la définition de l'indice de circularité selon Riley, nous verrons par la suite dans la définition du modèle granulaire que ce paramètre de forme présente des similitudes avec le notre.

Formula	Range	Reference	Notes
$\frac{4A}{\pi(L)^2}$	0 to 1	Pentland (1927)	Ratio of the area of the grain to the area of a circle with diameter equal to the longest diameter of the grain. Pentland called this 'roundness'
$\frac{4\pi A}{P^2}$	0 to 1	Cox (1927)	Ratio of the area of the grain to the area of a circle with the same perimeter. Cox called this 'roundness'
$\frac{4A}{\pi(D_c)^2}$	0 to 1	Tickell (1931)	Ratio of the area of the grain to the area of the smallest circumscribing circle. Tickell called this 'roundness'
$\frac{c}{C} = \sqrt{\frac{4\pi A}{p^2}}$	0 to 1	Wadell (1933)	Ratio of the perimeter of a circle with the same area as the grain to the actual perimeter of the grain. Square root of Cox's (1927) formula
$\frac{d_c}{D_c} = \sqrt{\frac{4A}{\pi(D_c)^2}}$	0 to 1	Wadell (1935)	Ratio of the diameter of a circle with the same area as the grain to the diameter of the smallest circumscribing circle. Formula also given in Wadell (1933) but in a different form
$\sqrt{\frac{D_i}{D_c}}$	0 to 1	Riley (1941)	Square root of the ratio of the diameter of the largest inscribed circle to the diameter of the smallest circumscribing circle. Riley called this the 'inscribed circle sphericity'
$\frac{P^2}{A}$	4π to ∞	Janoo (1998)	General ratio of perimeter to area

Notation has been standardized for ease of comparison:
P is the perimeter of the particle.
A is the area of the particle.
D_i is the diameter of the largest inscribed circle.
D_c is the diameter of the smallest circumscribing circle.

FIGURE *1.16* – *Quelques paramètres de circularité usuels d'après Blott [8]*

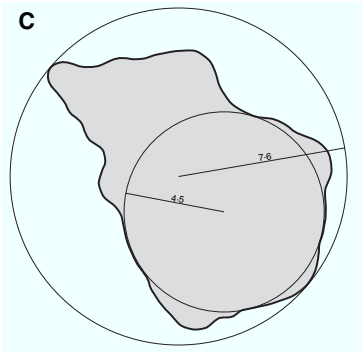


FIGURE *1.17* – *Illustration de la circularité selon Riley d'après Blott [8]*

La rondeur et l'angularité sont deux caractéristiques morphologiques qui s'opposent. La rondeur traduit le caractère arrondi que peut présenter les angles (sommets ou coins) d'une particule. Pour ce caractère morphologique il existe plusieurs définitions.

La figure 1.18 extraite de [8] montre un tableau qui répertorie quelques définitions de ces indices. L'illustration de la figure 1.19 correspond à la définition de la rondeur d'après Wadell (1932).

Formula	Range	Reference	Notes
$\frac{D_k}{L_W}$	0 to 1	Wentworth (1919)	Ratio of the diameter of curvature of the sharpest corner to the long axis of the grain
$\frac{D_k}{(L+I)/2}$	0 to 1	Wentworth (1922b)	Ratio of the diameter of curvature of the sharpest corner to mean pebble diameter
$\frac{\sum \frac{D_r}{D_i}}{n} = \frac{\left(\frac{\sum D_r}{n}\right)}{D_i}$	0 to 1	Wadell (1932) (first formula)	Average ratio of the diameter of curvature of all corners to the diameter of the largest inscribed circle
$\frac{n}{\sum \frac{D_i}{D_r}}$	0 to 1	Wadell (1932) (second formula)	Reciprocal of the average ratio of the diameter of the largest inscribed circle to the diameter of curvature of all corners
$\frac{D_k}{I}$	0 to 1	Kuenen (1956)	Ratio of the diameter of curvature of the sharpest corner to the intermediate axis of the grain
$\frac{D_k}{D_i}$	0 to 1	Dobkins & Folk (1970)	Ratio of the diameter of curvature of the sharpest corner to the diameter of the largest inscribed circle

Notation has been standardized for ease of comparison:
D_r is the diameter of curvature of any corners.
D_k is the diameter of curvature of the sharpest corner.
D_i is the diameter of the largest inscribed circle.
n is the number of corners, including those whose diameters are zero.
L_W is the longest diameter measured through the sharpest corner.
L is the length of the grain, in the projected plane.
I is the width of the pebble, in the projected plane.

FIGURE *1.18* – *Quelques indices pour caractériser la rondeur des particules d'après Blott [8]*

Pour caractériser l'angularité, Lees (1964) utilise la définition suivante pour l'angularité A d'une particule

$$A = (180^\circ - a)\frac{x}{r} \tag{1.11}$$

Pour des raisons pratiques, les définitions de a, x et r sont montrées plutôt sur la figure 1.20.

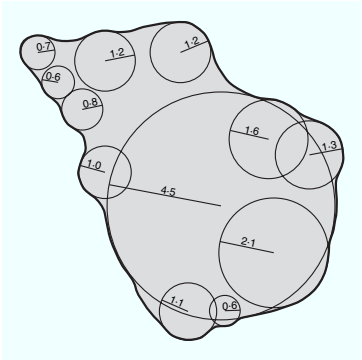


FIGURE ***1.19*** **–** *Illustration de la définition de la rondeur selon Wadell d'après Blott [8]*

L'élongation des particules est quantifiée généralement par un rapport d'aspect entre les plus grande et plus petite longueurs caractéristiques des particules. Généralement, le paramètre d'élongation varie de 0 à 1, la valeur 0 correspondant à une particule sphérique, et la valeur 1 au plus haut degré d'anisotropie.

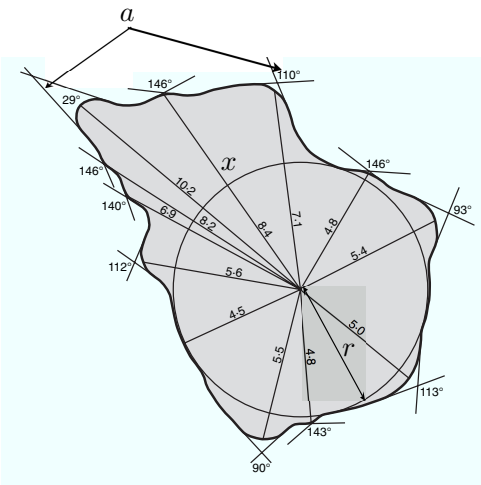


FIGURE ***1.20*** **–** *Illustration des éléments de calcul de l'angularité d'après la définition de Lees, image extraite de [8]*

Dans leur revue bibliographique, Blott et al. [8] proposent un nouvel indice de forme pour caractériser le degré d'irrégularité des particules. L'irrégularité de la forme d'une particule se définit selon eux comme le caractère discontinue que présente le profil de certaines particules. Ce caractère discontinu est dû à la succession d'indentations (concavités) et de projections (convexités) qui ont une taille significative dans le profil de la particule. Dans le cas des poudres d'UO_2, l'irrégularité de la forme des agrégats de cristallites est la caractéristique morphologique prépondérante.

Nous voyons par ces définitions qu'il existe une multitude d'indices de forme géométrique pour caractériser les formes de particules d'un système granulaire. Ces indices sont de com-

plexités variables, selon les caractéristiques morphologiques que l'on veut mettre en avant. L'emploi de ces indices de forme devient limité lorsqu'il s'agit de quantifier des formes de particules beaucoup plus complexes s'écartant des géométries classiques (cercle, sphère, ellipse, carré ...), comme par exemple les formes dendritiques des poudres fines telles que les fumées de carbone (que l'on retrouve dans les suies), les poudres céramiques agrégées comme l'UO_2. Pour pallier ces problèmes certains auteurs, par des procédures analytiques systématiques, ont mis au point des procédures mathématiques pour caractériser ces formes complexes.

1.4.1.2 Quelques méthodes analytiques

Analyse de Fourier

Dans cette approche, le profil d'une particule bidimensionnelle est décrit en coordonnées polaires (R, θ). La figure 1.21 illustre la méthode, le centre de rotation O correspond au centre de gravité de la particule. La variation de l'amplitude R du rayon en fonction de θ est décomposée en harmoniques :

$$R(\theta) = a_0 + \sum_{n=1}^{N} (a_n \cos n\theta + b_n \sin n\theta) \tag{1.12}$$

où $R(\theta)$ est le rayon à l'angle θ, N est le nombre total d'harmoniques considérées, n l'ordre de l'harmonique, a_n et b_n représentent l'amplitude et la phase de chaque harmonique.

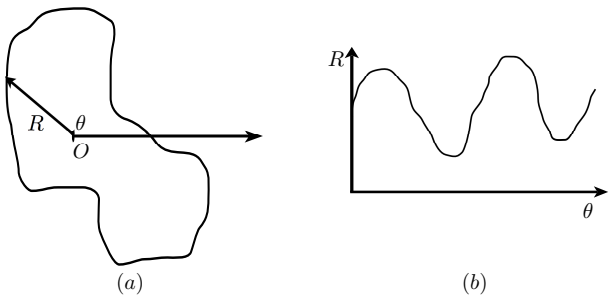


FIGURE *1.21* – *Illustration de la méthode de caractérisation du profil d'une particule par analyse de Fourier. (a) prise en compte des couples (R, θ) et en (b) représentation de la fonction d'onde $R(\theta)$.*

Avec cette approche, il est possible de relier la signature numérique du profil d'une particule à sa visualisation géométrique. L'analyse des différentes harmoniques permet de caractériser le profil des particules à diverses échelles. Cette méthode de caractérisation de la forme des grains couplée à des observations au microscope électronique à balayage peut être très efficace et donner une quantification cohérente de la forme globale à l'état de surface des grains [9]. Cette approche présente néanmoins plusieurs limitations. Par exemple, il est difficile d'accorder une signification physique à l'amplitude du vecteur R lorsque celui-ci traverse une partie concave, comme on peut le voir sur la figure 1.22 où l'on a deux valeurs de R différentes pour une même

valeur de θ. Par ailleurs, lorsque les particules possèdent des protubérances (prolongements dendritiques), il est nécessaire d'utiliser des harmoniques de rang élevé, ce qui complique la transformée de Fourier. Dans la pratique, les harmoniques de faibles rangs permettent de caractériser la forme globale des particules. Les harmoniques de rangs élevés permettent de caractériser plutôt leur rugosité.

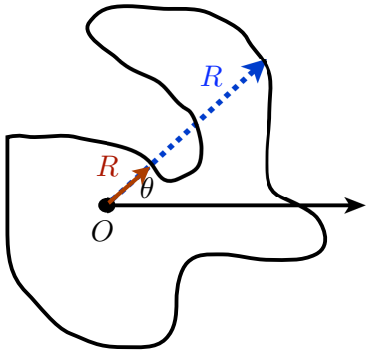


FIGURE *1.22* – *Illustration de l'indétermination de R (en rouge et en bleu) pour deux valeurs de θ identiques.*

Analyse fractale

La géométrie fractale permet de quantifier l'irrégularité de la forme de grains qui présentent des répétitions de motifs géomériques à plusieurs échelles. L'utilisation de l'analyse fractale comme technique de caractérisation de la morphologie des particules de poudres céramiques est naturelle. En effet, d'après Chermant [14], de nombreux processus physiques ou chimiques sont susceptibles de générer des matériaux à structure fractale. Parmi ces processus on note :

- les processus de diffusion-dissolution-précipitation,
- les processus d'agrégation-agglomération,
- les processus de fracture-fissuration-retrait.

La dimension fractale est basée sur le principe que les propriétés mesurées dans un objet fractal dépendent de la taille et de l'unité de mesure. Le principe de la méthode est le suivant : supposons que l'on veuille calculer le périmètre d'une forme de particule quelconque, on se fixe une longueur unité u, puis on dessine le polygone qui approche au mieux la forme de particule comme l'illustre la figure 1.23. Le périmètre $P(u)$ peut être exprimé en fonction de la longueur u, d'une constante de proportionnalité n, et de la dimension fractale D par l'expression suivante :

$$P(u) = nu^{1-D} \tag{1.13}$$

Le concept de dimension fractale a été utilisée par Chan et Page dans [13], pour évaluer la compressibilité, la coulabilité et l'angle de frottement interne de trois poudres de cuivre en fonction de leur rugosité moyenne. La rugosité moyenne de chaque poudre est quantifiée par une dimension fractale moyenne. Les poudres sont hiérarchisées en fonction de leur rugosité moyenne. Les résultats de l'étude expérimentale montrent que l'augmentation de la rugosité moyenne des poudres s'accompagne d'une augmentation de l'angle de frottement interne et

de la diminution de leur coulabilité et de leur compressibilité. Les particules les plus irrégulières s'écoulent plus lentement, conduisent à des empilements plus lâches dont la résistance au cisaillement augmente.

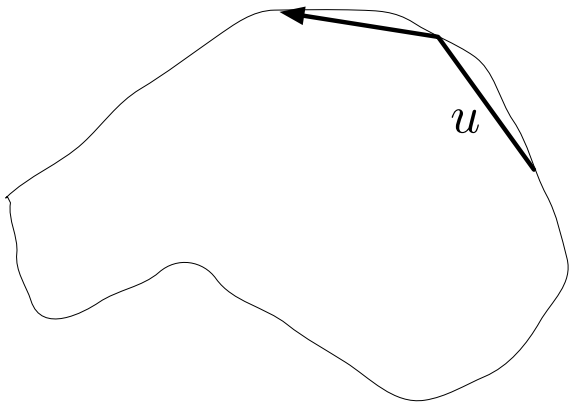


FIGURE *1.23* – *Mesure du périmètre d'une particule à l'aide d'une longueur unité* u.

1.4.2 Prise en compte de la forme dans les modèles par éléments discrets

Prendre en compte des formes de particules de plus en plus complexes dans les modèles par éléments discrets est une tâche nécessaire pour mieux appréhender le comportement de matériaux granulaires où la morphologie des particules joue un rôle majeur. Dans la pratique, il ne s'agit pas d'une tâche aisée. En effet, cet aspect de la construction d'un modèle granulaire nécessite parfois des efforts pour décrire l'enveloppe géométrique des particules dans le modèle et mettre en œuvre une stratégie pour la détection des contacts lors du déroulement des calculs. On trouve dans la littérature plusieurs méthodes qui permettent d'intégrer des formes de particules non sphériques dans les modèles par éléments discrets. Ces méthodes sont décrites d'une manière assez détaillée dans [29]. Nous allons mentionner ici deux approches utilisées dans les simulations numériques discrètes.

Une première approche consiste à utiliser une forme analytique sufffisamment générale pour générer des formes très variées. Par exemple, Delaney et Cleary [20] proposent l'expression

$$(\frac{x}{a})^m + (\frac{y}{b})^m + (\frac{z}{c})^m = 1, \tag{1.14}$$

où m, a, b et c sont des paramètres de forme. La figure 1.24 montre des exemples de formes obtenues pour quelques valeurs des paramètres.

Une seconde approche consiste à réaliser des assemblages rigides (*cluster ou* clump) de formes géométriques simples telles que des disques en 2D ou des sphères en 3D [78, 34, 43, 46, 97, 52]. Un des avantages de cette méthode est que l'on peut utiliser une gestion des contacts simples identique à celle de systèmes granulaires constitués de particules sphériques.

Par ailleurs, l'efficacité en terme de coûts de calcul est très correcte et il est possible de réaliser des assemblages de particules de formes quelconques (polygones en 2D et polyèdres en 3D). Dans la littérature, certains auteurs ont tenu compte de cette approche et ont développé une méthodologie pour prendre en compte les aspects statique et cinématique pour des systèmes granulaires constitués de clusters de deux ou plusieurs sphères [34] . Pour le traitement des particules non-convexes nous préconisons une méthode de traitement identique.

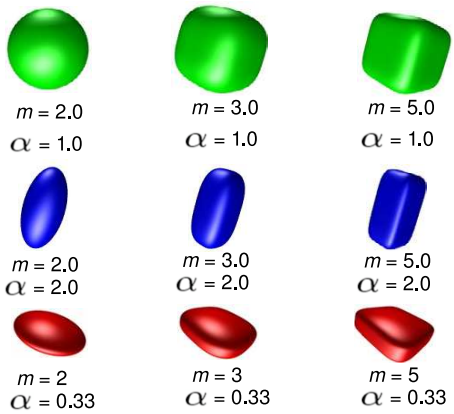


FIGURE *1.24* – *Quelques exemples de superellipsoïdes avec un paramètre de forme m et un rapport d'aspect α d'après Delaney et Cleary [20]*

1.4.3 Influence de la forme sur la texture et le comportement

La forme des grains influence directement le comportement d'un matériau granulaire. En effet, elle joue un rôle considérable dans

- la rhéologie quasi-statique des empilements,
- l'organisation géométrique des empilements (texture, distribution des pores...),
- la mobilisation du frottement intergranulaire,
- et la distribution des forces de contact.

Dans la littérature, on trouve de nombreuses références concernant l'étude par approche discrète de l'influence de l'angularité des particules sur le comportement en cisaillement des matériaux granulaires [102, 62, 76, 70, 37, 5, 6]. Bien qu'elles aient été réalisées dans des contextes parfois différents (Génie civil [5, 6], géologie [54]), le résultat majeur qui ressort de toutes ces contributions est l'augmentation de l'angle de frottement interne en fonction de l'angularité des particules en raison des enchevêtrements et des frustrations des rotations [98]. Il a été montré que ces effets devenaient plus importants dans le cas de milieux denses.

Certains auteurs ont étudié l'effet de l'angularité des particules au delà des caractérisations macroscopiques. Par exemple, Nouguier-Lehon [70] et Azéma [6] étudient l'effet de l'angularité sur la texture des matériaux granulaires. Sur la figure 1.25(a), Azéma montre que le niveau de résistance au cisaillement des empilements de polyèdres (voir figure 1.25(b)) est plus élevé

que celui des sphères. Mair [54] montre que le frottement macroscopique est sensible à l'organisation géométrique du réseau de forces à travers les différentes couches cisaillées d'un échantillon et dépend de la distribution de taille et de l'angularité des particules. Il montre, par ailleurs, que l'augmentation de l'angularité implique un changement de statut dans la cinématique des particules (les contacts en roulement deviennent des contacts glissants) ce qui contribue à une augmentation de la résistance au cisaillement.

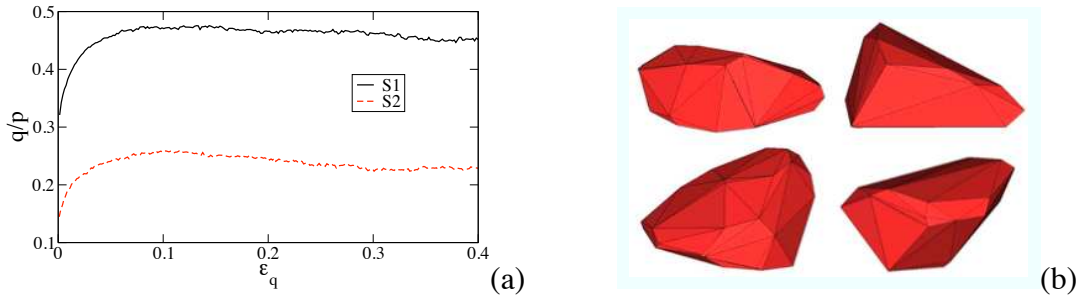


FIGURE *1.25* – *(a) Contrainte de cisaillement q/p en fonction de la déformation de cisaillement cumulée ε_q obtenue par une compression triaxiale simulée par dynamique des contacts pour deux empilements de particules composés respectivement de sphères (S2) et de polyèdres (S1) d'après [6] ; (b) Exemples de particules de ballast utilisées dans les simulations d'après [6].*

L'anisotropie des particules est connue pour influencer fortement la résistance au cisaillement [94, 27, 25, 71, 26, 76, 4]. Rothenburg et Bathurst [94] sont parmi les premiers à s'être intéressés à l'effet de l'eccentricité des particules sur le comportement en cisaillement des matériaux granulaires. Ils montrent que la résistance au cisaillement augmente, atteint un maximum puis décroît au fur et à mesure qu'augmente l'eccentricité. Dans leurs travaux ils attribuent cette évolution de la résistance au cisaillement au nombre de coordination, à la dilatance, et à la géométrie des empilements qui diffèrent selon l'anisotropie ou l'isotropie de forme des particules. En effet, ils montrent que le nombre de coordination et la dilatance suivent la même tendance que la résistance au cisaillement en fonction de l'eccentricité. Par ailleurs, la compacité des empilements ne varie pas de façon monotone avec l'élongation. Elle augmente d'abord lorsque la forme s'écarte d'une forme sphérique pour atteindre des valeurs aussi élevées que dans les empilement cristallins de sphères. Ensuite, pour des élongations plus élevées, elle diminue vers des valeurs extrêmement faibles pour des grands rapports d'aspect (empilement d'aiguilles) [27, 25, 26, 4] (voir figure 1.26).

Plus récemment Azéma et Radjaï [4] ont montré qu'avec des particules allongées appelées sphéro-objets (rectangle formé de deux demi-disques en ses extrémités) la résistance au cisaillement augmente linéairement avec un paramètre de forme décrivant l'écart par rapport à la forme circulaire. Ce paramètre est le même que nous utiliserons dans nos études, et nous verrons qu'il peut être utilisé comme un paramètre d'ordre bas pour décrire pratiquement toute autre forme. L'effet de l'élongation de particules tridimensionnelles a été aussi abordé notamment par différents auteurs tels que Ouadfel [75], Ng [69] ou encore Donev [27, 25, 26] en ce qui concerne les propriétés d'empilement.

La construction de particules de forme complexe par assemblage de disques ou de sphères sous la forme d'agrégats a été utilisée par plusieurs auteurs pour étudier les propriétés d'assemblage et d'écoulement des grains [78, 34, 43, 46, 97, 52]. Jensen [43] s'intéresse à l'influence de la rugosité des particules sur le comportement en cisaillement. Il réalise des simulations numériques par la méthode de dynamique moléculaire et modélise la rugosité des particules par la construction de clusters de trois disques. Dans le cadre d'une étude comparative entre les systèmes granulaires constitués de disques et de clusters, il montre que les clusters contribuent à l'augmentation de la résistance au cisaillement car ils entraînent un blocage de leur rotation au profit de leur mise en glissement mutuelle.

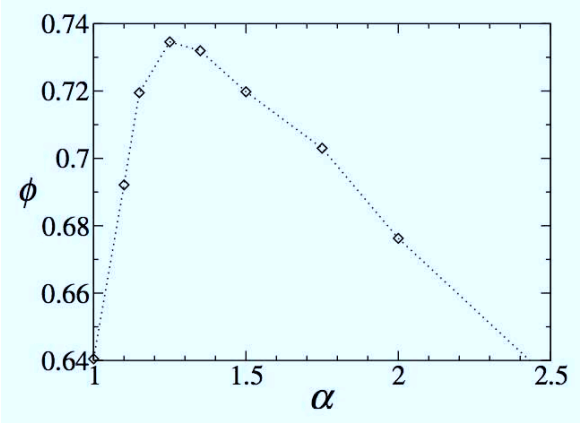


FIGURE ***1.26*** **–** *Compacité d'un assemblage de particules ellipsoïdales en fonction de leur rapport d'aspect simulé par dynamique moléculaire d'après [27].*

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, la problématique de la thèse a été précisée au regard des travaux précédents disponibles dans la littérature. Nous avons souligné la nécessité d'une meilleure compréhension de l'étape de compaction qui joue un rôle déterminant pour la qualité des pastilles de combustible. Nous avons vu que les particules de poudre qui régissent la compaction et la tenue mécanique des comprimés crus d'UO_2 sont les agrégats de cristallites présentant une forme non-convexe. L'énergie de liaison entre ces agrégats est difficile à caractériser compte tenu de leur taille et du fait qu'elle dépend de nombreux facteurs qui peuvent évoluer au cours du temps ou de l'atmosphère dans lequel ils se trouvent. L'objectif de ce travail de thèse est de proposer un modèle granulaire dans le cadre d'une approche discrète dans le but d'analyser l'influence de ces deux facteurs (forme et cohésion) sur la texture et le comportement des poudres. Une approche expérimentale semble difficile compte tenu de la complexité des phénomènes mis en jeu.

Malgré de nombreuses recherches sur les milieux granulaires depuis plusieurs années, les effets liés à la composition complexe des matériaux réels (formes non-sphériques, grandes poly-

dispersités de tailles des particules, cohésion, . . .) ont fait l'objet de peu d'études. En particulier, l'effet d'enchevêtrement attendus pour les formes non-convexes par rapport au comportement en cisaillement et en compaction, avec et sans interactions cohésives, reste totalement inexploré et se trouve donc au centre de nos travaux. Le prochain chapitre présente la méthodologie mise en œuvre et introduit les procédures numériques et les outils d'analyse qui seront employés dans la suite de ce mémoire.

CHAPITRE 2

Modélisation des poudres à particules non-convexes

Sommaire

2.1 Introduction **46**
2.2 Modèle physique **47**
2.2.1 Particules non-convexes 47
2.2.2 Granulométrie 49
2.2.3 Interactions 50
2.3 Procédures numériques **52**
2.3.1 Code de calcul 52
2.3.2 Méthode de préparation 55
2.3.3 Paramètres numériques 57
2.4 Analyse statistique de l'état isotrope **58**
2.4.1 Traitement de données et analyse physique 58
2.4.2 Compacité 61
2.4.3 Connectivité 61
2.4.4 Orientations des contacts 64
2.4.5 Réseau de forces 67
2.5 Conclusion **70**

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'ensemble des ingrédients de la modélisation numérique par éléments discrets mise en œuvre pour l'étude de la rhéologie des matériaux granulaires constitués de particules de forme non-convexe, en vue d'analyser le comportement en compaction et en cisaillement des poudres d'UO_2. Cette modélisation implique le choix d'une méthode de simulation par élément discret, mais aussi la définition d'un modèle physique du matériau qui nous intéresse à l'échelle des grains (agrégats de cristallites), ainsi que le choix du système simulé et de ses paramètres physiques et numériques.

Ce chapitre permet donc de définir le cadre général des simulations et la méthodologie utilisée pour l'ensemble des analyses présentées dans les chapitres qui vont suivre. En effet, le matériau granulaire à l'étude est complexe aussi bien au niveau de la morphologie de ses constituants qu'au niveau de leur interaction, ce qui implique le choix d'un modèle physique simplifié de manière à nous permettre de nous intéresser aux propriétés d'assemblage avec un grand nombre de particules et une précision numérique suffisante. Le choix d'un modèle physique simplifié est important à la fois pour l'efficacité numérique et pour l'analyse et l'interprétation des résultats des simulations étant donnée la microstructure désordonnée et hétérogène des matériaux granulaires.

Les différentes étapes de cette modélisation sont représentées par le schéma de la figure 2.1. Le modèle physique est défini par les formes et les distributions des tailles des particules constitutives du matériau ainsi que pour leur interaction par des lois de contact et de force. Ensuite, il est nécessaire de définir un système granulaire par la donnée du nombre de particules, des conditions aux limites (confinement, vitesse de cisaillement, ...), et des paramètres physiques associés. Par ailleurs, comme un matériau granulaire peut se trouver dans divers états d'empilement et d'écoulement, il est nécessaire de disposer d'une méthode de préparation pour la mise en place et la maîtrise de la configuration initiale des empilements.

Le choix d'un algorithme de calcul et d'une plateforme appropriée est une étape importante qui dépend de la nature du système simulé. Les données issues des simulations numériques doivent être ensuite analysées pour leur cohérence d'ensemble et la pertinence de l'information obtenue par rapport au problème étudié. Il peut s'avérer nécessaire de reprendre les calculs en modifiant les paramètres d'entrée (le cycle 1 sur la figure). En effet, une étude paramétrique est requise lorsque les paramètres d'entrée ne sont pas connus expérimentalement ou lorsqu'on cherche à établir la généralité ou la robustesse des résultats. Le cycle d'étude paramétrique (paramètres/préparation/calcul/analyse) doit converger vers un choix pertinent des paramètres. L'interprétation physique est la phase finale et revient à rapprocher les résultats et la vision globale qui émerge des données expérimentales et des interrogations à l'origine de l'étude. Si le comportement du modèle est éloigné du processus réel, il faut revenir sur le modèle physique (le cycle 2 sur la figure). Comme cette itération est longue, le choix du modèle de base est un point clé de la modélisation numérique d'un processus ou d'un matériau. Tous ces aspects et les choix opérés dans le cadre de nos études sont présentés et discutés dans ce chapitre.

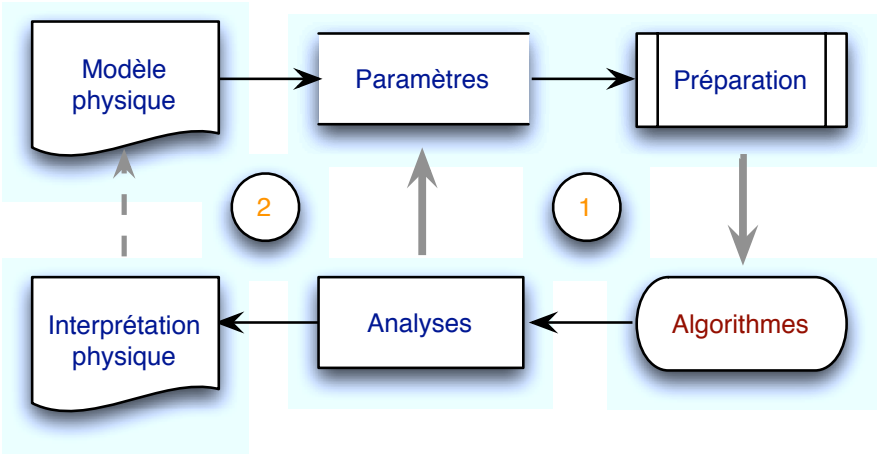


FIGURE 2.1 – *Méthodologie de l'étude*

2.2 Modèle physique

2.2.1 Particules non-convexes

Le choix d'une forme pour les particules dans les études numériques discrètes envisagées doit répondre à quatre critères :

1. traduire la forme dendritique des particules d'UO_2 et notamment sa non-convexité,
2. permettre de changer facilement le degré de non-convexité,
3. éviter une confusion avec tout autre paramètre de forme tel que l'élongation ou la rugosité de surface,
4. permettre des simulations peu coûteuses en temps.

Un agrégat rigide, ou *clump*, de trois disques disposés symétriquement avec une symétrie rotationnelle d'ordre 3 et un degré de recouvrement variable, répond à ces critères ; (voir figure 3.26). En effet, il s'agit d'une forme non-convexe avec une non-convexité modulable en fonction du degré de recouvrement entre les particules. Il est évident qu'un agrégat de deux disques est également non-convexe, mais la forme ainsi obtenue présente aussi une élongation qui varie avec sa non-convexité lorsque la distance entre les deux disques varie. Par ailleurs, pour des agrégats constitués de plus de particules (4 ou plus), disposés ensemble dans une symétrie rotationnelle, le paramètre de non-convexité se confond avec la rugosité de surface et la non-convexité ne peut pas atteindre des niveaux aussi élevés que pour un assemblage de trois disques seulement. Enfin, cette forme est une simple extension de disque et ne présente donc aucune difficulté numérique particulière. L'équivalent 3D de cette forme est un assemblage régulier de 4 sphères. Nous nous sommes limités dans ce mémoire essentiellement à la dimension 2 même si des études en 3D sont en cours et certains résultats sont présentés dans la section 3.8.2 afin de montrer la robustesse des analyses 2D.

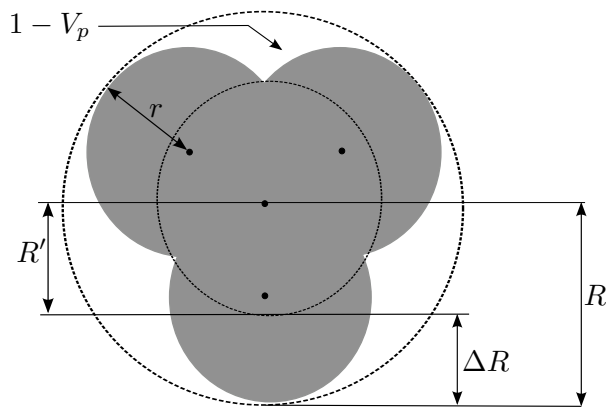


FIGURE 2.2 – *Géométrie d'un assemblage régulier de trois disques représentant un agrégat de cristallites.*

La non-convexité d'un agrégat de trois disques peut être quantifiée par une expression à partir du rayon R de son cercle circonscrit et le rayon R' de son cercle inscrit. La différence $\Delta R = R - R'$ représente la profondeur de concavité de l'agrégat. Nous pouvons donc quantifier la non-convexité par le paramètre η défini par

$$\eta = \frac{\Delta R}{R} \tag{2.1}$$

Ce paramètre varie de 0 lorsque les trois disques se confondent, à 0.73 lorsque les trois disques se touchent sans s'interpénétrer.

La non-convexité des agrégats peut être également définie par le ratio $\lambda = \ell/2r$, où ℓ est la distance entre les centres des disques et r est le rayon d'un disque. η et λ sont reliés par l'expression

$$\eta = \frac{3 + \sqrt{3}\lambda - 3\sqrt{1 - \lambda^2}}{3 + 2\sqrt{3}\lambda}. \tag{2.2}$$

La "rondeur" employée en géologie est une autre grandeur qui peut être utilisée d'une manière équivalente pour décrire la forme de nos agrégats. La rondeur d'une particule est le rapport du rayon de courbure moyen de ses côtés ou de ses coins et le rayon de la plus grande sphère inscrite [63, 8]. La rondeur de nos agrégats est donc donnée par $r/[(1-\eta)R]$. Elle diminue de 1,72 pour $\lambda = 0$ à $\simeq 0,367$ pour $\lambda = 1$.

Nous allons utiliser η comme paramètre car il représente directement la concavité des agrégats. Il faut aussi noter que le paramètre η peut être utilisé pour décrire la déviation par rapport à une forme circulaire (ou sphérique en 3D) pour toute autre forme où, étant donné un point de référence, les bords de la particule sont inclus entre deux cercles concentriques centrés sur ce point de référence. Cette définition s'avère pertinente, par exemple, pour les particules allongées [4]. C'est un point important car l'utilisation d'un tel paramètre à caractère "universel" permet de comparer l'effet de forme pour les matériaux granulaires composés de formes très variées.

Le cercle circonscrit de rayon R peut être considéré comme une enveloppe convexe de l'agrégat. Le rayon R représente ainsi la taille d'un agrégat et, comme les agrégats sont traités comme des particules parfaitement rigides, ce rayon peut être utilisé pour normaliser toute autre longueur dans le système. En d'autres termes, en posant $R = 1$, la non-convexité varie par la réduction du rayon R' du cercle inscrit. Le volume V_p (2D) de l'agrégat est donné par

$$V_p = \frac{r^2}{\pi}\left\{\frac{5\pi}{2} - 3\cos^{-1}(\lambda) + \sqrt{3}\lambda^2 + 3\lambda\sqrt{1-\lambda^2}\right\} \tag{2.3}$$

avec

$$r = \left\{1 + \frac{2\sqrt{3}}{3}\lambda\right\}^{-1} \tag{2.4}$$

et où nous avons posé $R = 1$ (autrement, il faut simplement multiplier V_p par R^2). Comme R est fixé, V_p diminue lorsque η augmente. λ est une fonction implicite de η donnée par l'équation (2.2). Le volume $\pi - V_p$ est le volume du vide entre l'enveloppe convexe et les bords de l'agrégat, et le rapport $(\pi - V_p)/\pi$ représente de ce fait la "porosité propre" de l'agrégat.

2.2.2 Granulométrie

Il serait souhaitable de travailler avec des échantillons monodisperses de manière à focaliser nos analyses sur l'effet de forme. Mais les systèmes monodisperses en dimension 2 présentent l'inconvénient de développer spontanément de l'ordre à longue distance sous la forme de domaines à symétrie hexagonale. Une légère polydispersité (un facteur 1,5, par exemple, entre la plus grande et la plus petite taille), souvent envisagée dans les études 2D, permet de briser cet ordre au niveau du réseau de contact (désordre de contact ou topologique) mais ne suffit pas pour créer un désordre métrique (ou géométrique) suffisant pour l'arrangement des particules dans l'espace, ce qui influence très fortement la compacité. D'après certaines études, le désordre géométrique nécessite un facteur supérieur à 3 entre la plus grande valeur R_{max} et la plus petite valeur R_{min} du rayon. C'est la valeur que nous avons adoptée pour tous nos échantillons numériques et toutes les valeurs de η.

Par ailleurs, notre choix de la densité de probabilité des rayons $P(R)$ dans l'intervalle $[R_{min}, R_{max}]$ a porté sur la distribution uniforme par fraction volumique (de telle sorte que $\pi R^2\ P(R)$=constante). La densité de probabilité est donnée par

$$P(R) = \frac{2R_{min}R_{max}}{R_{max} - R_{min}}\frac{1}{R^2} \tag{2.5}$$

La distribution cumulée des volumes $f(R)$, appelée aussi *courbe granulométrique* est donc une droite d'équation

$$f(R) = 2\pi R_{min}R_{max}\frac{R - R_{min}}{R_{max} - R_{min}} \tag{2.6}$$

Cette distribution conduit à des échantillons compacts et une bonne connectivité entre les particules de toutes tailles [10, 105, 109, 108, 111].

2.2.3 Interactions

Les interactions entre les particules constituent un autre élément essentiel du modèle physique. En effet, la réponse globale d'un milieu granulaire sollicité macroscopiquement résultera d'une réponse collective et simultanée des particules sujettes à des interactions locales. Etant donnée la forme de nos agrégats et leur rigidité, leur interactions ont toujours lieu au niveau des contacts ponctuels comme entre deux disques, à cette différence près qu'il peut y avoir plusieurs points de contact (3 au maximum) entre deux agrégats ; voir figure 2.12. Nous allons donc appliquer un modèle classique de contact frottant à chaque point de contact.

L'effet des phénomènes physico-chimiques se traduit essentiellement par l'apparition d'une force d'adhésion réversible que nous allons également prendre en compte dans nos études. Même s'il est possible d'enrichir ce modèle par des interactions plus complexes, les enchevêtrements et engrenages possibles entre les agrégats du fait de leur forme non-convexe constituent l'ingrédient principal dans notre étude et leur effet combiné avec le frottement et l'adhésion peut suffire à reproduire la cinématique du réarrangement des agrégats dans les poudres d'UO_2. Mais c'est un point qui devra faire l'objet d'autres études en prolongement des travaux de cette thèse.

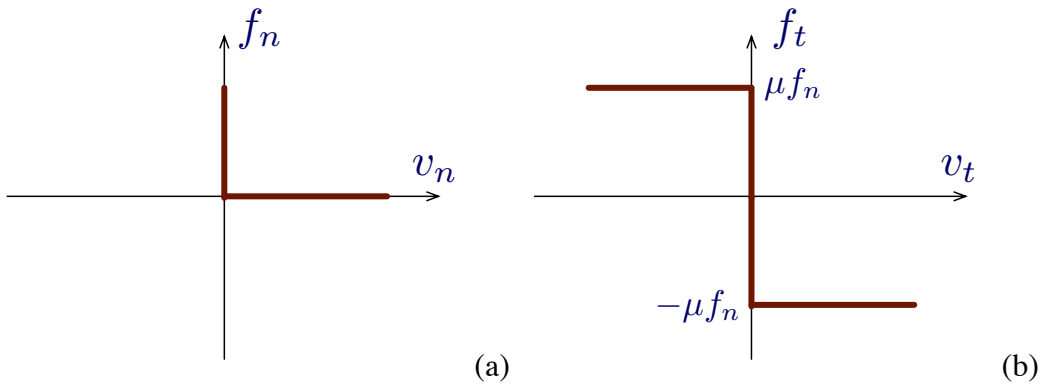


FIGURE 2.3 – *Les graphes de Signorini (a) et de Coulomb (b) reliant les vitesses normale et tangentielle au contact aux forces normale et tangentielle, respectivement.*

Etant donnés la cohésion interne des agrégats et leur module élastique très élevé par rapport aux contraintes qu'ils subissent, nous négligeons leurs déformations élastiques. Dans ces conditions, la mise en contact physique de deux corps se traduit par une condition d'impénétrabilité qui peut être aussi décrite comme une liaison *unilatérale* entre les deux corps. Elle peut être représentée par un graphe, dit de *Signorini*, reliant la force normale f_n et la vitesse normale v_n à chaque contact (voir figure 2.3(a)). Cette liaison est prise en compte par l'introduction d'une répulsion élastique dans les approches numériques de type dynamique moléculaire en s'appuyant sur le contact de Hertz ou une approximation linéaire, mais, comme nous verrons plus bas, elle sera implémentée ici dans le cadre la méthode de dynamique des contacts, qui ne fait pas appel à la répulsion élastique. Par contre, il est possible d'introduire sur une base phénoménologique des *coefficients de restitution* normal et tangentiel, e_n et e_t, qui traduisent la

dissipation de l'énergie lors d'une collision entre deux particules.

Les cas limites $e_n = e_t = 0$ et $e_n = e_t = 1$ correspondent respectivement aux chocs parfaitement inélastique et parfaitement élastique. Il faut remarquer que les collisions dans un milieu granulaire dense présentent toujours un caractère collectif et multiple de telle sorte que la dissipation d'énergie résulte de la propagation d'ondes et donc d'une dissipation globale à des échelles de temps qui sont des temps de réponse élastique et donc nettement plus petites que le temps de déformation plastique qui nous intéresse. A ces échelles, pratiquement toute l'énergie élastique est dissipée à chaque incrément de déformation. C'est pourquoi, nous supposons dans nos simulations que les coefficients de restitution sont identiquement nuls.

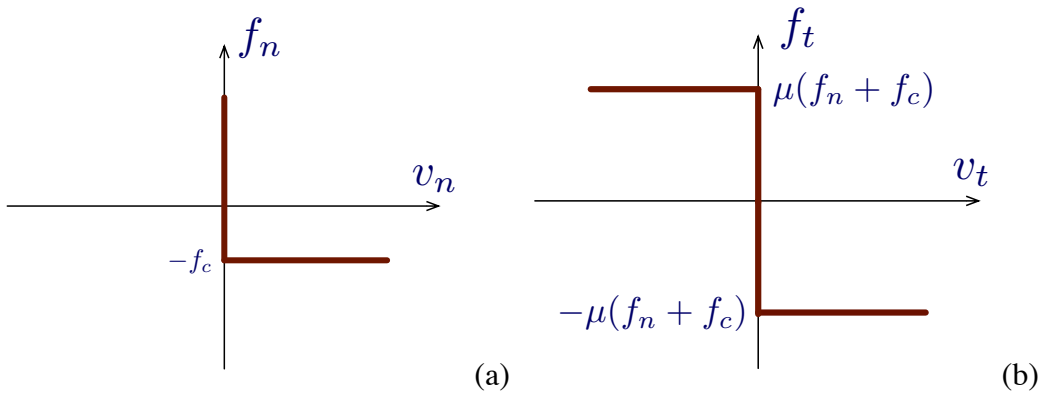


FIGURE 2.4 – *Les graphes de Signorini (a) et de Coulomb (b) pour un contact adhésif de seuil $-f_c$.*

La loi de frottement de Coulomb a un statut similaire aux lois de restitution. Elle résulte des déformations plastiques au niveau des aspérités de surface, mais les échelles de longueur en jeu sont petites devant la taille de nos particules. Cette loi peut se formuler également sous la forme d'un graphe reliant la force tangente (force de frottement) f_t et la vitesse de glissement v_t au point de contact ; voir figure 2.3(b). Le coefficient μ est un paramètre unique qui traduit la dissipation plastique. Sa valeur pour les agrégats de cristallites n'est pas connue. Mais comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, dès que sa valeur dépasse 0,2, le caractère multicontacts d'un matériau granulaire conduit à une résistance au cisaillement qui est pratiquement indépendante du frottement statique μ_s. Nous verrons que cet effet de saturation est également vrai pour des particules de degré de non-convexité élevées, ce qui constitue un résultat intéressant de nos études.

Il existe plusieurs modèles numériques d'interactions qui permettent de prendre en compte les phénomènes de cohésion dans les approches discrètes. Globalement les modèles numériques actuels sont capables de reproduire les effets de trois modes de cohésion : l'adhésion, la capilarité et la cimentation [23]. Dans notre étude, nous avons fait le choix d'un modèle d'adhésion au contact. Les particules se collent lorsqu'elles entrent en contact. Un contact cohésif se rompt lorsque la force normale atteint un seuil de rupture en traction $-f_c < 0$. L'adhésion est réversible, c'est-à-dire qu'un contact cohésif rompu peut se reformer à tout instant au cours de l'évolution du système granulaire.

En présence du seuil $-f_c$, les graphes de Signorini et de Coulomb sont modifiés comme indiqué sur la figure 2.4. Quelle est l'interprétation physique de cette formulation ? La force normale au contact f_n peut prendre toute valeur supérieure à $-f_c$. Si deux particules en contact ne sont soumis à aucune force extérieure, la force au point de leur contact est nulle du fait de l'équilibre de chaque particule. Cet équilibre implique que la force de répulsion élastique f_n^r est égale à la force d'attraction f_c de telle sorte que $f_n = f_n^r + (-f_c) = 0$. Par ailleurs, pour séparer les deux particules l'une de l'autre il faut leur appliquer une force de traction de telle sorte que $f_n = f_n^r + (-f_c) = -f_c$, ce qui implique $f_n^r = 0$. Ces deux exemples indiquent la condition de Signorini s'applique d'une manière générale à la force $f_n^r = f_n + f_c$, ce qui conduit au graphe de la figure 2.4(a). Le même raisonnement tient également pour la force de frottement au glissement qui est donnée par $f_t = \mu\ f_n^r = \mu(f_n + f_c)$, ce qui correspond à un "shift" du cône de Coulomb. Remarquons qu'en l'absence de toute force extérieure la force normale est nulle et le seuil est donné par $f_t = \mu f_c$.

Le modèle de cohésion présenté ci-dessus est simple et il ne fait notamment intervenir aucune longueur d'action pour la force d'adhésion. Une telle généralisation n'est pas compliquée, mais la modélisation proposée ici est essentiellement à l'échelle des particules et néglige de ce fait toute longueur petite devant la taille des particules. Cette approximation peut être efficacement mise en œuvre dans le cadre de la méthode CD. Pour les approches de type MD, au contraire, il est indispensable de traiter les petites échelles au niveau des points de contact même lorsque de telles longueurs n'ont pas d'intérêt immédiat pour le problème étudié.

2.3 Procédures numériques

Nos échantillons numériques sont constitués de 5000 agrégats (soit 15000 disques) avec une distribution uniforme par fractions volumiques. Nous avons construit un échantillon de disques ($\eta = 0$) et 7 échantillons d'agrégats non-convexes avec une non-convexité η évoluant graduellement entre 0,1 à 0,7 par pas de 0,1. Nous allons décrire ici l'algorithme et les protocoles utilisés et ensuite analyser la structure des échantillons en fonction de la non-convexité.

2.3.1 Code de calcul

Pour les simulations numériques discrètes, nous avons utilisé la méthode de dynamique des contacts (Contact Dynamics ou CD) implémentée dans le code de calcul GDM-tk (Granular Dynamics Method toolkit) ; voir le site *cgp-gateway.org*, rubrique *Softwares*. Ce code, écrit en langage C++ suivant les concepts de la programmation orientée objet, permet de simuler des collections de particules interagissant par différentes lois de contact. Sa particularité est dans sa structure organisée en trois niveaux :

1. *Algorithme* : ce niveau contient les classes impliquées dans la résolution numérique des équations du mouvement. Les objects *Sample* et *Network* traitent des données internes de l'assemblage des particules (particules et leur réseau d'interactions) tandis que les

classes de calcul héritent de la classe virtuelle *Algo* et traitent la dynamique des corps en prenant en compte leurs interactions. La classe CDAlgo, par exemple, pour le calcul par la méthode CD, hérite de la classe Algo.

2. *Système* : ce niveau est composé des classes héritant de la classe *System* qui définit les degrés de liberté effectifs (ceux qui sont effectivement contrôlés ou strictement nécessaire dans un processus donné), les conditions aux limites du problème et le post-traitement associé.
3. *Simulation* : ce niveau contient les fichiers de données nécessaires pour une simulation.

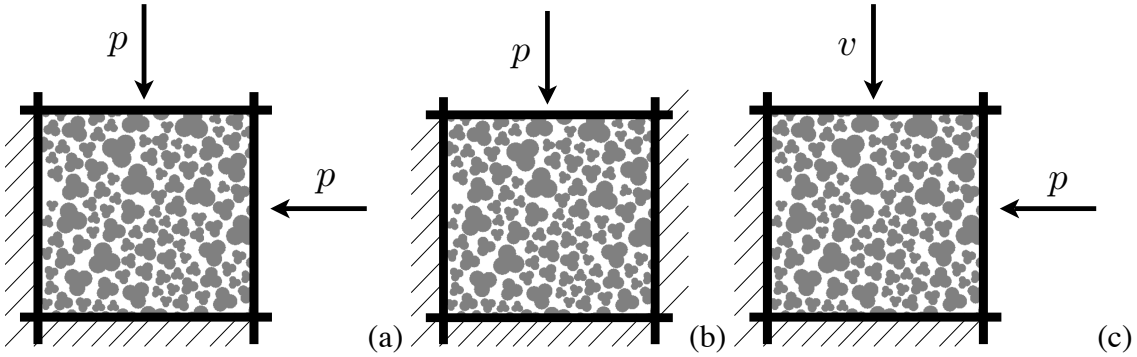


FIGURE 2.5 – *Les conditions aux limites pour les simulations de compaction isotrope (a), de compaction uniaxiale (compression œdométrique)(b) et de compression biaxiale (c).*

Le niveau *System* permet de définir chaque application particulière à partir des modules présents au niveau *Algorithme*. Les classes de post-traitement sont associées au *System*. La séparation entre les niveaux d'algorithme et de système permet d'éviter de charger les modules de calcul par des paramètres et des données propres à chaque application. L'utilisateur averti peut ainsi aisément démultiplier les algorithmes, d'une part, et les systèmes, d'autre part.

Le niveau de la simulation est commandé par un fichier dont un exemple est présenté sur la figure 2.6. Ce fichier contient les paramètres de contrôle de la simulation (numéro de pas initial *ns*, numéro de pas final *nsf*, fréquence d'enregistrement des données dans le fichier d'histoire *nHist*, ...), le système particulier simulé (ici appelé *biaxial*) et ses paramètres, l'agorithme utilisé (ici *CD*) avec ses paramètres (pas de temps *dt*, précision demandée pour le calcul des forces *epsf*, nombre minimal d'itérations *nitermin*, ...), les paramètres physiques d'interaction (Group Relation Data), etc.

Le système *biaxial* est défini par une boîte rectangulaire d'une largeur l et d'une hauteur h formée de quatre objets *rline* (sphéro-lignes) parallèlement aux axes x et y. Ces lignes sont traitées comme des objets de masse et de centre de masse donnés. Deux lignes sont fixes et les deux autres ne peuvent se déplacer que perpendiculairement aux axes. Ces déplacements peuvent être contrôlés soit en contrainte (σ_{xx} ou σ_{yy} imposées) soit en vitesse (v_x ou v_y imposées) ; figure 2.5. Ce système à deux degrés de liberté est suffisant pour simuler une compaction isotrope ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = p$), une compaction uniaxiale (compression œdométrique) ($v_x = 0$ et $\sigma_{yy} = \sigma_0 + \dot{\sigma}_{yy}\, t$), ou un cisaillement biaxial (v_y et σ_{xx} imposées).

```
Simulation{
ns      0
nsi     0
nsf     10000000
nHist   100
nSpeak  2000
historyNetwork
nAnalyse 100
}
System{ biaxial
xval 0.
yval 500.
xmod VELOCITY
ymod PRESSURE
adjust
}
Algo{ CD
dt      0.0001
epsf    0.0001
nitermn 30
nitermx 4000
nver    50
nsuper 2
}
Network{
dverlet 0.005
dsuperList 0.01
}
GroupRelationData{
ngrp 2

noact 1 1

parameter mu
set mu 0 1 0.0
set mu 0 0 0.5
...
cohesionLaw simpleAdhesion 0 0 250
}
```

FIGURE 2.6 – *Un exemple du fichier de commande d'une simulation de compaction dans le code GDM-tk.*

2.3.2 Méthode de préparation

Pour obtenir une distribution discrète de rayons qui soit statistiquement représentative d'une distribution uniforme par fractions volumiques, nous avons divisé l'intervalle $[R_{min}, R_{max}]$ en 10 classes granulométriques, ce qui conduit à approximativement 200 particules dans la classe des plus grosses particules. Ce nombre de grosses particules est suffisamment élevé pour assurer leur représentativité, et par conséquent la représentativité des autres classes plus peuplées, dans nos échantillons. Par ailleurs, chaque classe représente un volume égal à un dixième du volume total des particules, ce qui assure une bonne représentativité des volumes.

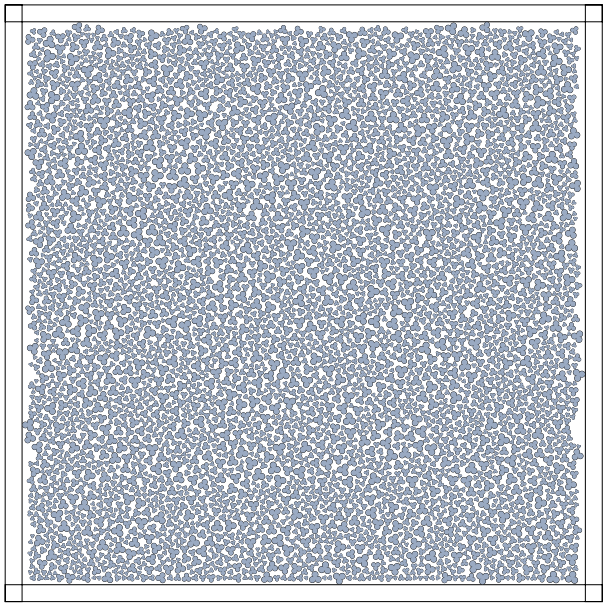


FIGURE 2.7 – *Configuration des agrégats avec $\eta = 0,5$ avant une compaction isotrope.*

Pour les simulations de compression biaxiale (chapitre 3), les échantillons sont générés à partir d'un même échantillon constitué de 5000 disques avec la granulométrie discrétisée, pour les différentes valeurs de η. L'échantillon de disques, qui constituera par la suite l'échantillon de référence, est généré par dépôt aléatoire dans une boîte rectangulaire. Les disques sont initialement disposées sur une grille triangulaire sans recouvrement entre eux. La construction de l'assemblage des agrégats consiste dans un premier temps à substituer chaque disque de l'échantillon de référence par un agrégat de trois disques dont le degré de non-convexité est fixé par la valeur de η et dont l'orientation est choisie aléatoirement. La procédure de compression isotrope est ensuite appliquée à l'échantillon avec un coefficient de frottement nul entre les particules ($\mu_s = 0$), un coefficient de frottement nul entre les particules et les parois ($\mu_w = 0$) et un champ de gravité nul ($g = 0$). Les figures 2.7 et 2.8 montrent l'échantillon avec $\eta = 0,5$ préparé par cette méthode avant et après la compression isotrope.

Cette étape de préparation est menée jusqu'à ce que le réseau de forces de contacts au sein des empilements devienne persistent, et que leur compacité et leur connectivité saturent. La

compacité des écantillons est alors maximale. Nous verrons par la suite, que les paramètres de frottement statique $\mu_s = 0$ et $\mu_w = 0$ (qui a pour effet de minimiser les hétérogénéités induites par des effets de frettage) conduisent à des empilements isostatiques. Cet état d'équilibre mécanique à la particularité de conduire à des états d'empilement statistiquement reproductibles (en terme de compacité, de distribution des forces et de connectivité).

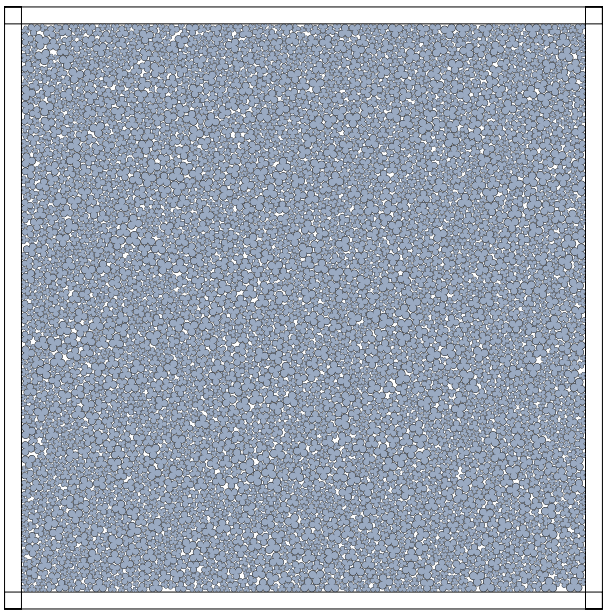


FIGURE 2.8 – *Configuration des agrégats avec $\eta = 0,5$ après une compression isotrope en l'absence de cohésion.*

Tous les systèmes ainsi construits sont très denses (de compacité maximale), isotropes (dépourvus de tout gradient de contrainte) et isostatiques. Rappelons que, dans un système de particules rigides simulé par la méthode CD, le niveau de la pression exercée est immatériel et seulement les rapports des contraintes sont représentatifs (entre la contrainte déviatorique et la contrainte moyenne ou entre la force moyenne et la force de cohésion). En d'autres termes, si pour un échantillon isotrope ainsi préparé la pression est multipliée par un facteur k, toutes les forces normales entre particules augmentent par le même facteur et le système maintient son équilibre statique.

Pour les simulations de compaction uniaxiale (compression œdométrique) (chapitre 4), tous les échantillons sont préparés en disposant les particules sur une grille régulière et par l'application d'une contrainte constante verticale $-\sigma_0$ sur la paroi du haut (la paroi droite étant maintenue fixe). Le déplacement de la paroi supérieure vers le bas conduit au déplacement des particules qui se réarrangent. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, la cohésion entre particules est activée dans la phase de préparation dans le but de générer un système relativement lâche, qui sera ensuite soumis à une compression uniaxiale. La cohésion entre particules a pour effet de permettre aux particules d'atteindre plus rapidement un état d'équilibre. La contrainte σ_0 constitue pour ces échantillons une contrainte de pré-consolidation. La figure 2.9 montre un

exemple d'un échantillon cohésif avec $\eta = 0,5$ construit par cette méthode. On y observe une texture très poreuse et désordonnée.

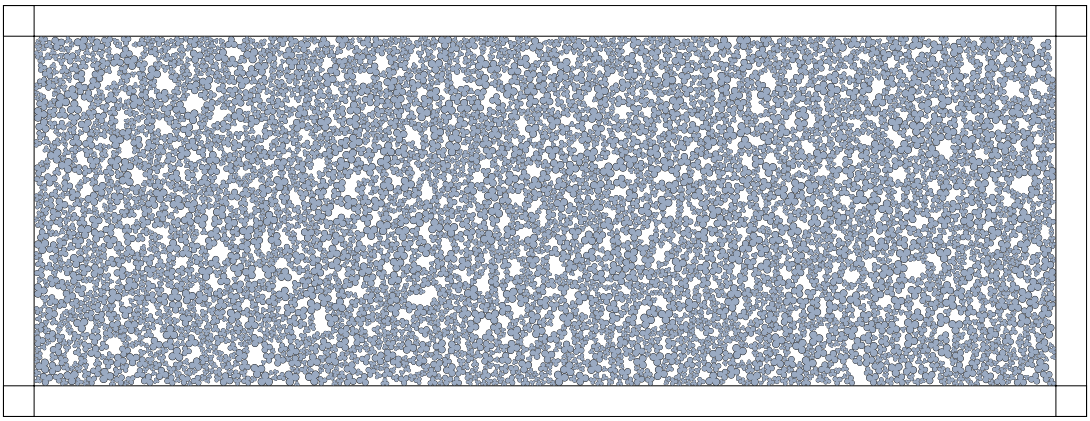


FIGURE ***2.9*** *– La configuration des agrégats cohésifs avec $\eta = 0,5$ à la fin d'une compaction uniaxiale (compression œdométrique).*

2.3.3 Paramètres numériques

La qualité des simulations numériques lors de la mise en place de l'état initial par compaction isotrope et de l'évaluation de la résistance au cisaillement ou à la compression simple est assurée par le contrôle d'un certain nombre de paramètres. Le pas de temps fixé à $\delta t = 10^{-4}$ s permet d'assurer un coût et une qualité de calcul convenable. Ce pas de temps permet de contenir l'interpénétration moyenne des particules sous une valeur correspondant à 1% du plus petit rayon de disque formant les agrégats d'un échantillon numérique. Contrairement à la méthode MD, les interpénétrations entre les particules n'ont pas de signification dynamique dans les simulations CD. Néanmoins, en raison du cumul possible des erreurs d'arrondi numériques à chaque pas, de petites interpénétrations entre les particules ont lieu, ce qui nécessite le choix d'un pas de temps suffisamment petit pour éviter l'accumulation de ces erreurs au cours de longues simulations. Ceci dit, la valeur $\delta t = 10^{-4}$ s est encore nettement plus grande que le pas de temps dans des simulations DM réalisées dans les mêmes conditions avec une raideur faible au niveau des contacts.

La vraie limitation imposée sur la valeur de δt dans les simulations CD est liée au fait que le déplacement maximal $\delta r_{max} = v_{max}\ \delta t$ pendant un pas de calcul doit être très petit devant la taille minimale R_{min} des particules de manière à éviter des interpénétrations importantes lors de la mise à jour des positions des particules. La vitesse relative maximale v_{max} entre particules peut être beaucoup plus grande que la vitesse caractéristique $\dot{\varepsilon}_q(2R_{min})$ où $\dot{\varepsilon}_q$ est la vitesse de cisaillement. Pour cette raison, il est souvent nécessaire de réaliser des tests multiples pour évaluer l'ordre de grandeur de ces erreurs et de choisir la valeur de δt en conséquence. Même dans les simulations de cisaillement quasi-statiques, où le nombre d'inertie I est faible,

des crises dynamiques ont lieu fréquemment et peuvent conduire à des vitesses anormalement élevées des particules à l'échelle d'un pas de calcul.

Un autre paramètre majeur dans les simulations CD est le nombre d'itérations n_{iter} nécessaire pour le calcul simultané des forces de contact et des vitesses des particules à chaque pas. Habituellement, n_{iter} n'est pas fixé et la boucle d'itération se répète jusqu'à ce qu'un *critère de convergence* soit vérifié. Ce critère dans le code GDM-tk est la précision relative sur le calcul des forces vérifiée pendant plusieurs itérations successives. Ce critère est équivalent à exiger la convergence de la force moyenne, mais aussi de ses moments d'ordres plus élevés. C'est pourquoi très souvent, un nombre minimal d'itérations (entre 5 et 30) est effectué. n_{iter} est aussi un indicateur de réarrangements. Dans les phases de réarrangements fréquents, n_{iter} augmente tandis que dans les phases de déformation continue il diminue.

2.4 Analyse statistique de l'état isotrope

Nous analysons dans cette section les échantillons préparés par compression isotrope. Dans la suite, nous noterons toutes les quantités relatives à cet état par la notation ^{iso}. La figure 2.10, montre une vue rapprochée de la texture de quatre échantillons isotropes pour quatre valeurs de η. Ces échantillons isotropes vont servir d'état initial pour les simulations de compression biaxiale présentées dans le chapitre suivant. Le caractère isotrope (à la fois du point de vue des forces et du point de vue du réseau de contact) résulte de la compaction isotrope, mais les analyses réalisées nous permettent de montrer que ces échantillons ont également un caractère *isostatique*. Nous nous intéressons à leur compacité et texture en fonction de η.

2.4.1 Traitement de données et analyse physique

L'analyse de la texture repose sur un certain nombre de variables internes de nature géométrique. La figure 2.11 montre la géométrie d'un contact double avec les vecteurs de base servant à décrire la texture des empilements granulaires :

- le vecteur branche $\boldsymbol{\ell}$, joignant le centre de deux particules en contact O_i et O_j,
- le vecteur donnant l'orientation du contact $\boldsymbol{n}$ défini au point de contact α,
- les vecteurs de contact $\boldsymbol{c}$ joignant le centre des particules O_i au point de contact α.

L'analyse statistique de la texture consiste à évaluer les propriétés de connectivité du réseau par différents types de contact et les distributions des orientations des vecteurs associés aux contacts. Mais la compacité, bien qu'une propriété "externe", fait partie des descripteurs géométriques des empilements dans la mesure où pour une collection de particules rigides elle reflète l'arrangement géométrique des particules.

L'analyse de la statique (l'équilibre d'ensemble) des empilements repose sur la distribution des forces de contact et les fonctions décrivant la valeur moyenne des forces en fonction des orientations des contacts ou des vecteurs branches. Pour nos échantillons isotropes, nous

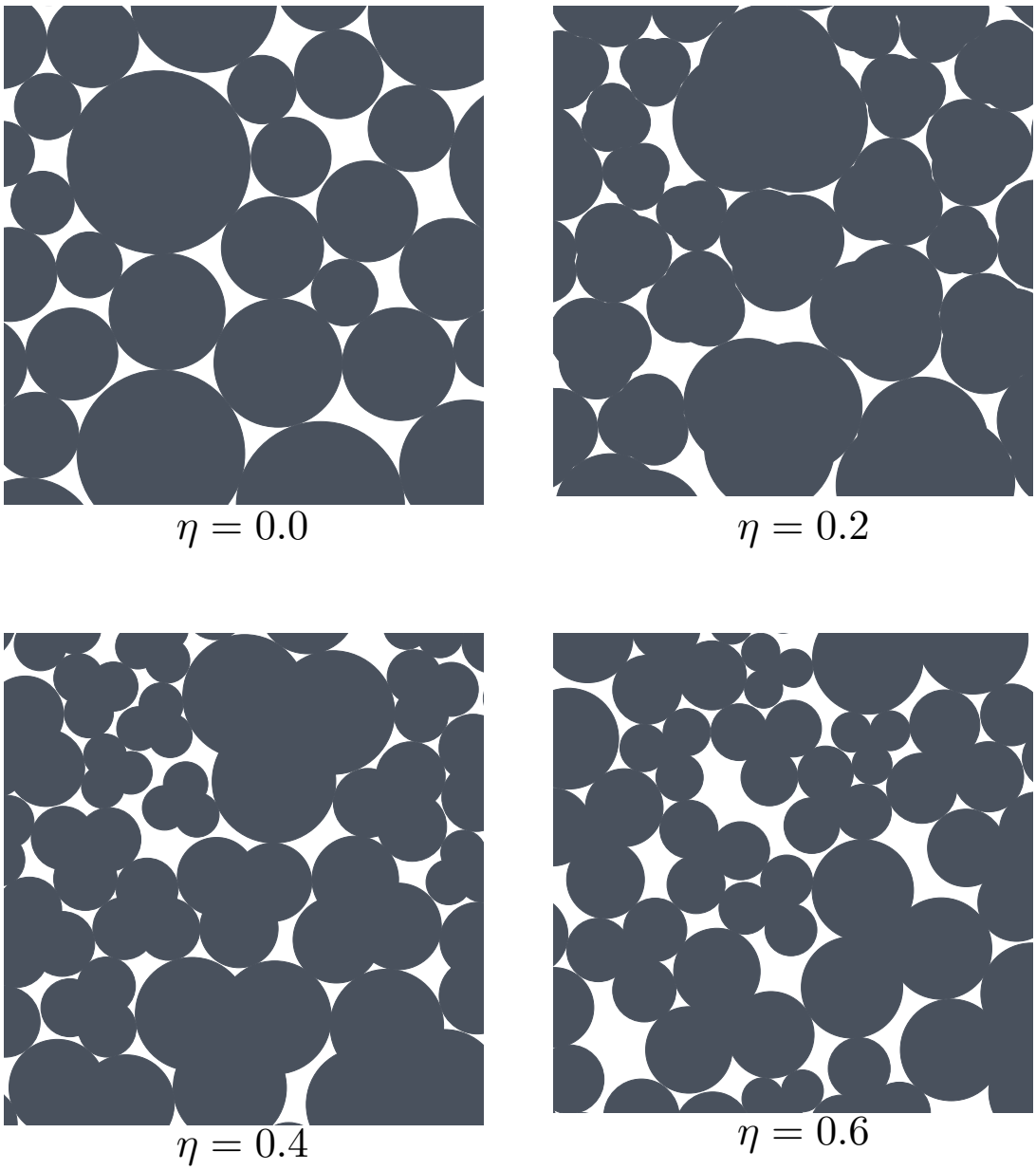


FIGURE *2.10* – *Vues d'échantillons pour différentes valeurs de η à l'issue d'une compression isotrope.*

nous intéressons plus particulièrement à la dépendance de ces fonctions par rapport à la non-convexité.

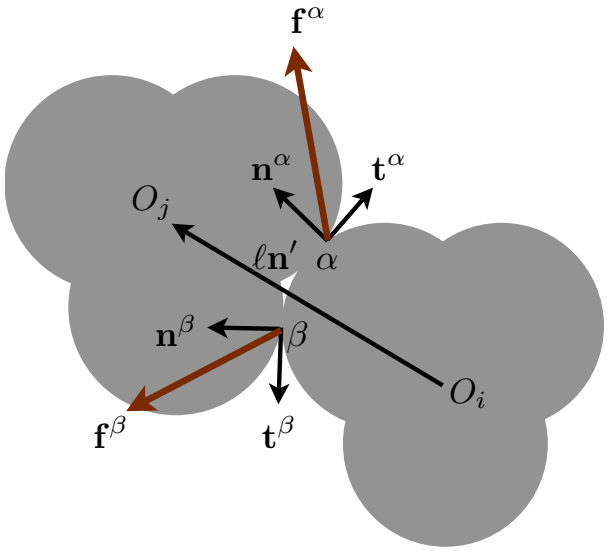


FIGURE 2.11 – *Géométrie d'un contact double et les grandeurs vectorielles associées.*

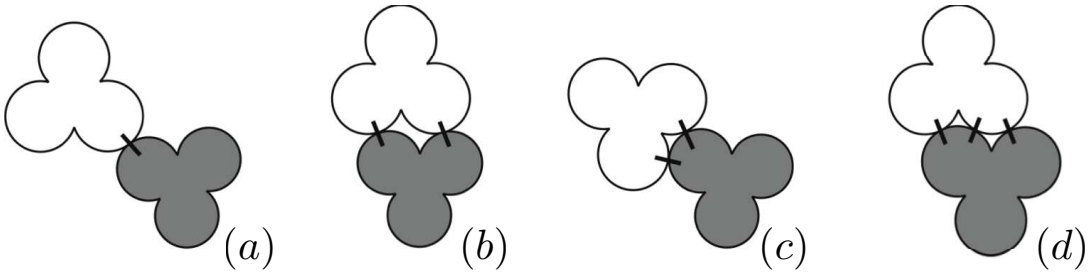


FIGURE 2.12 – *Quatre configurations de contact possible entre deux agrégats (a) simple (S), (b) double-simple (DS), (c) double (D), (d) triple (T).*

Le post traitement des résultats s'effectue par un programme prenant en argument les fichiers d'enregistrement des positions des particules et du réseau de contact, et un fichier contenant des mots clés précisant les quantités et les grandeurs statistiques à calculer. Les routines de post-traitement développées pour les agrégats dans le code GDM-tk reposent sur la structure existante pour le post-traitement des empilements de disques. En effet, chaque agrégat est constitué de trois disques, et chacun de ces disques interagissent avec les disques des autres agrégats par le biais des lois de contact frottant et d'adhésion. Nous avons dû tenir compte de certaines spécificités apportées par la non-convexité de la forme des particules. Le premier effet de la non-convexité est la possibilité d'avoir plusieurs points de contact entre deux agrégats. La figure 2.12 montre ces différents types de contact possibles entre deux agrégats. Nous avons dû tenir compte de cette topologie particulière du réseau de contact pour développer l'outil de post-traitement.

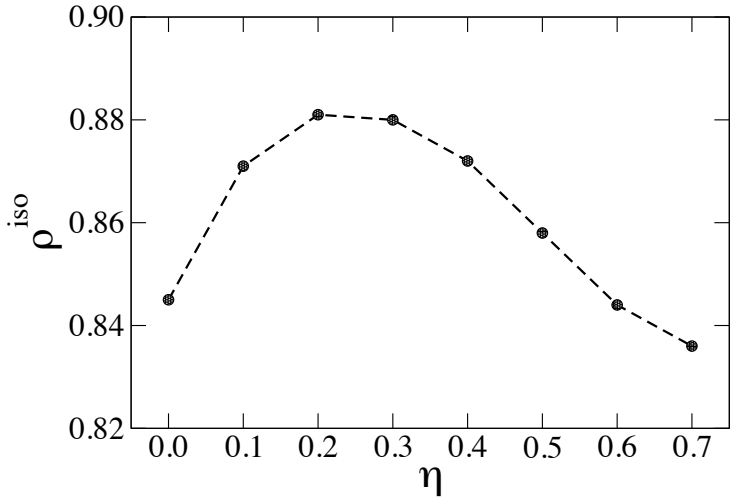


FIGURE 2.13 – *Compacité ρ^{iso} des échantillons isotropes en fonction de la non-convexité η.*

2.4.2 Compacité

La figure 2.13 présente la compacité ρ^{iso} des échantillons isotropes en fonction de η. Nous observons que la compacité augmente à partir de 0,846 pour $\eta = 0$ puis atteint un maximum qui vaut 0,880 en $\eta = 0,2$. Par la suite, elle décroît jusqu'à atteindre une valeur de 0,836 pour $\eta = 0,7$. Il est intéressant de noter dans cette évolution que la compacité maximale est atteinte pour une valeur intermédiaire de η. En effet, on pourrait s'attendre à ce que l'augmentation graduelle de la non-convexité des agrégats conduit à une diminution de la compacité de manière monotone. C'est-à-dire qu'en raison des effets d'exclusions stériques résultant de la rencontre entre les parties concaves et convexes des grains les empilements deviendraient de moins en moins compacts localement. En fait, ces effets d'exclusions stériques deviennent prépondérants à partir de $\eta = 0,2$. Un comportement similaire est observé pour les empilements de particules allongées en fonction de leur rapport d'élongation [25, 4].

Les deux régimes qui ponctuent l'évolution de la compacité en fonction de η résultent ainsi d'une compétition entre des mécanismes locaux qui conduisent à un gain de compacité et à d'autres comme les effets d'exclusions stériques qui contribuent à la diminuer. Cette étude locale de la compacité sera abordée dans le chapitre 3 à travers un modèle phénoménologique.

2.4.3 Connectivité

Un des principaux effets de la non-convexité est de permettre plusieurs points de contacts entre les agrégats. La figure 2.14 montre les quatre différents types de contact entre agrégats dans une portion d'un échantillon avec $\eta = 0,6$: (1) simple (S), (2) double-simple (DS) défini comme deux contacts simples entre deux paires de disques appartenant à deux agrégats différents, (3) double (D) mettant en jeu un disque d'un agrégat et deux disques d'un autre agrégat,

et (4) triple (T) constitué d'un contact simple et d'un contact double. Comme on peut le voir, les contacts (D) et (T) sont enchevêtrés tandis que les contacts (S) et (DS) ne le sont pas. Nous verrons par la suite que cette distinction dans la configuration géométrique des contacts est intéressante vis-à-vis de leur comportement mécanique qui diffèrent lors du cisaillement, ce qui indique que l'effet de forme des particules se traduit essentiellement par le comportement de ces différents types de contact dans leur statistique et dans leur rôle dans la transmission des contraintes.

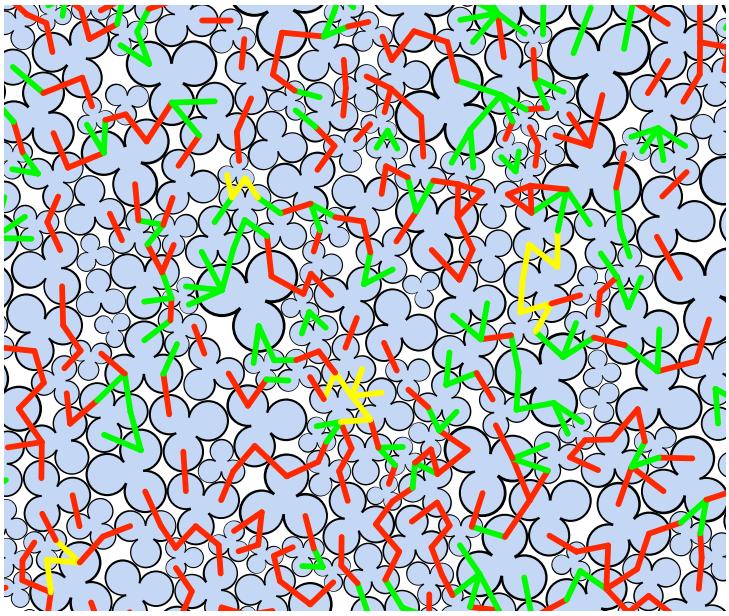


FIGURE 2.14 – *Les différents types de contact possibles entre agrégats pour $\eta = 0.6$, les traits rouges, verts et jaunes correspondent respectivement aux contacts simples, doubles et triples.*

La figure 2.15 montre les proportions k_S, k_{DS}, k_D et k_T de ces différents types de contact en fonction de η. Nous observons clairement que η a peu d'influence sur les proportions des différents types de contact. Les contacts simples représentent la majorité des contacts avec environ 63% tandis que les contacts triples et double simples sont les moins bien représentés avec moins de 10%. Les contacts doubles représentent la catégorie intermédiaire avec environ 27% des contacts. Les contacts double-simples et triples sont dans des proportions négligeables.

Comme chaque particule non-convexe peut avoir plusieurs contacts avec chacune de ses voisines, nous distinguons le nombre de coordination noté Z du nombre de connectivité noté Z_c. Le nombre de coordination Z est défini comme étant le nombre moyen de voisins en contact avec une particule. Dans le calcul de Z les contacts simples, doubles, double-simples ou triples entre deux agrégats comptent pour un seul lien entre deux voisins. Le nombre de connectivité Z_c correspond au nombre moyen de contacts par particule. Il s'agit de dénombrer les contacts effectifs entre les agrégats. Il est à noter que seuls les contacts actifs (portant des forces de

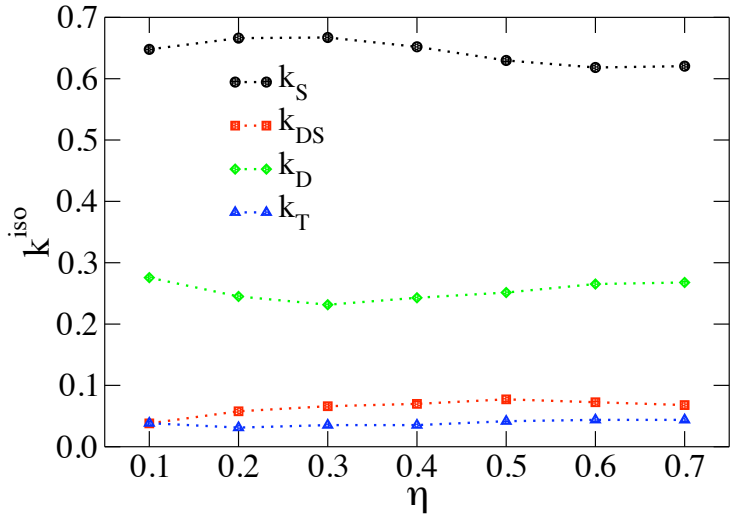


FIGURE 2.15 – *Proportion des différentes types de contact en fonction de η dans l'état isotrope.*

contact non-nulles) sont considérés dans le calcul de Z et Z_c. Z_c est donné par

$$Z_c = 2\frac{N_c}{N_p}, \tag{2.7}$$

où N_c désigne le nombre total de contacts actifs et N_p le nombre de particules impliquées dans le réseau de forces (en excluant donc les particules flottantes).

La figure 2.16 montre l'évolution de Z^{iso} et Z_c^{iso} en fonction de η. Il est intéressant de voir qu'une légère déviation par rapport à la circularité ($\eta = 0,1$) conduit à une augmentation brutale du nombre de connectivité et par la suite ce nombre devient constant en fonction de η. Z^{iso} augmente légèrement entre $\eta = 0$ et $\eta = 0,2$, puis diminue progressivement et légèrement entre $\eta = 0,2$ et $\eta = 0,7$. Il est aussi remarquable que les évolutions de Z^{iso} et Z_c^{iso} ne suivent pas la tendance dessinée par la compacité ρ^{iso}. Des assemblages granulaires de compacités différentes peuvent avoir des connectivités très proches.

Les valeurs de $Z_c^{iso} \simeq 4$ pour $\eta = 0$ et $Z_c^{iso} \simeq 6$ pour $\eta \neq 0$ sont prévisibles si on considère qu'un système de particules à coefficient de frottement nul est isostatique. En effet, dans le cas des disques ($\eta = 0$), l'absence de frottement conduit au fait qu'ils ne sont soumis à aucun moment car les forces de contact sont normales. Le nombre d'équations d'équilibre à résoudre est $2N_p$, où N_p désigne le nombre de particules. Le nombre d'inconnues est le nombre de contacts N_c, qui correspond aux N_c forces normales de contact f_n^c. Si le système est isostatique, alors le nombre d'inconnues est égal au nombre d'équations, c'est-à-dire $N_c = 2N_p$. Avec la définition du nombre de connectivité, il vient que $Z_c = 2N_c/N_p = 4$.

Pour les agrégats non convexes ($\eta \neq 0$), les rotations entrent en jeu car les forces de contact ne passent pas par le centre de masse des particules. Le nombre d'équations d'équilibre est donc de $3N_p$ (3 degrés de liberté par particule, 2 translations et une rotation dans le plan), et le nombre d'inconnues reste fixé à N_c (N_c forces normales de contact). L'hypothèse d'isostaticité implique

alors $N_c = 3N_p$. Et là encore avec la définition de Z_c on trouve que $Z_c = 2N_c/N_p = 6$ [1, 2, 3]. Les valeurs indiquées sur la figure 2.16 sont ainsi compatibles avec l'hypothèse d'isostaticité des échantillons isotropes obtenus en compression sans frottement. Le fait que l'on n'atteigne pas les valeurs exactes de 4 et 6 peut provenir du fait que la précision du calcul n'est pas infinie et qu'un matériau granulaire comporte un grand nombre de faibles forces dont certaines peuvent apparaître comme pratiquement nulles.

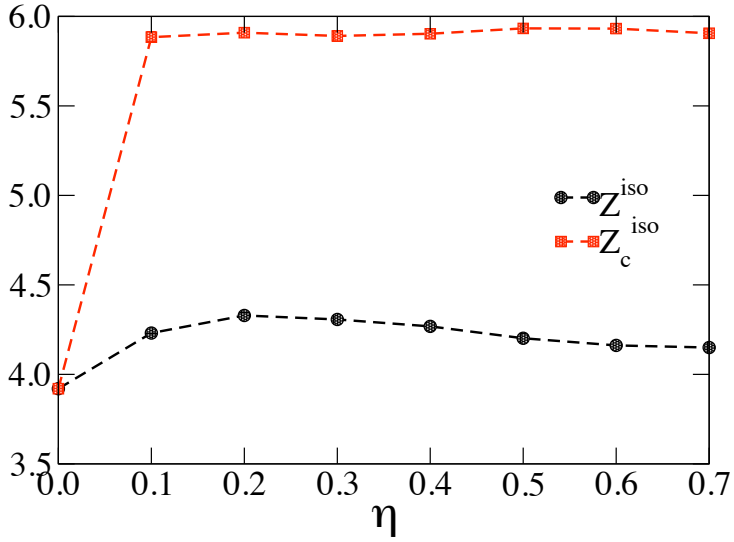


FIGURE 2.16 – *Le nombre de coordination Z^{iso} et le nombre de connectivité Z_c^{iso} en fonction de η dans l'état isotrope.*

2.4.4 Orientations des contacts

La caractérisation de la géométrie du réseau de contact implique sa connectivité, mais aussi son degré d'anisotropie décrit par la distribution des orientations des contacts. La figure 2.18 montre une vue du réseau de contacts pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Les segments verts représentent les normales au contact. Comme nous pouvons le noter, dans ces deux échantillons il n'apparaît pas d'orientations priviliégées pour les normales au contact.

La figure 2.19 montre la densité de probabilité des orientations $P(\theta)$ des normales au contact en coordonnées polaires pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Sur cette figure, les points représentent les données brutes c'est-à-dire issues d'un recensement de toutes les orientations de normales au contact présentent dans le volume des empilements. L'orientation des normales au contact est prise par rapport à la direction azimutale, et tient compte de l'absence de polarité des contacts. Autrement dit, les directions θ et $\theta + \pi$ sont équivalentes. Comme nous le voyons les 4 courbes forment un cercle et se superposent, ce qui montre l'isotropie du réseau de normales au contact indépendamment de la non-convexité des agrégats.

L'approximation théorique repose sur l'évaluation de la densité de probabilité $P(\theta)$. Etant

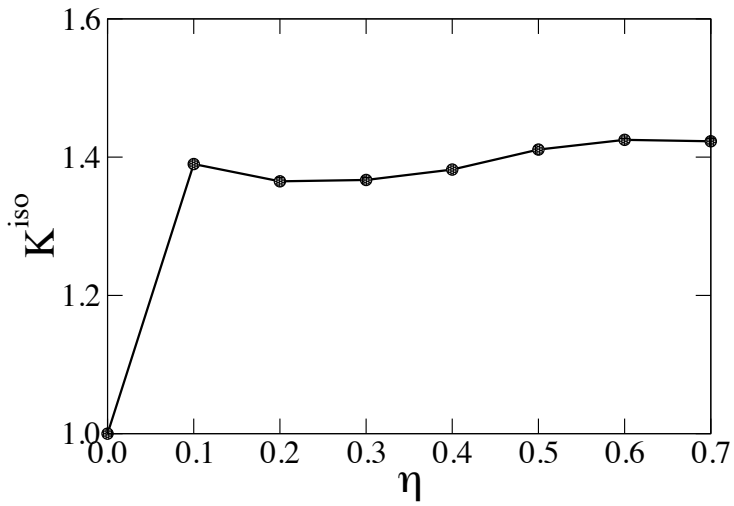


FIGURE 2.17 – *Evolution de K^{iso}, défini par le rapport entre Z_c^{iso} et Z^{iso} à l'issue de la compression isotrope en fonction de η.*

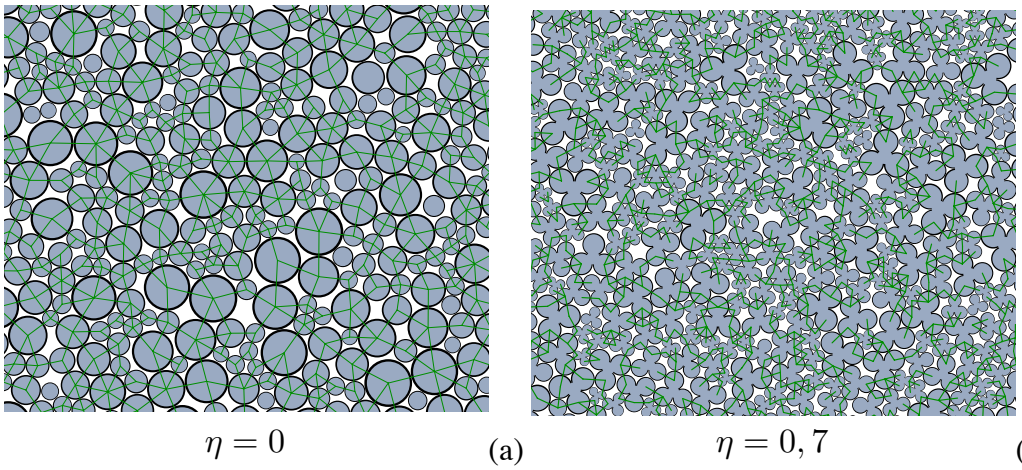


FIGURE 2.18 – *Vue du réseau de contact des échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Les traits verts donnent la direction des normales au contact.*

donnée la π-périodicité de $P(\theta)$, un développement de Fourier à l'ordre 2 prend la forme suivante :

$$P(\theta) \simeq \frac{1}{\pi}\{1 + a_c \cos 2(\theta - \theta_c)\}, \tag{2.8}$$

où a_c désigne le degré d'anisotropie de l'orientation des contacts et θ_c la direction la plus probable pour cette anisotropie. Pour calculer le paramètre a_c, il faut considérer le tenseur de fabrique (ou de texture) $\underline{\boldsymbol{F}}$ qui rend compte de l'orientation moyenne du réseau de contact d'un assemblage granulaire. Ce tenseur est défini sur un volume V contenant N_c contacts par

$$F_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_c}\sum_{c}^{N_c} n_\alpha n_\beta = \langle n_\alpha n_\beta \rangle_V \ , \tag{2.9}$$

où $\boldsymbol{n}$ est le vecteur unitaire normal au contact c et la moyenne $\langle \ldots \rangle_V$ porte sur tous les contacts actifs (portant des forces non-nulles) [99, 60]. La connaissance de l'orientation de chaque contact permet de calculer $\underline{\boldsymbol{F}}$ facilement.

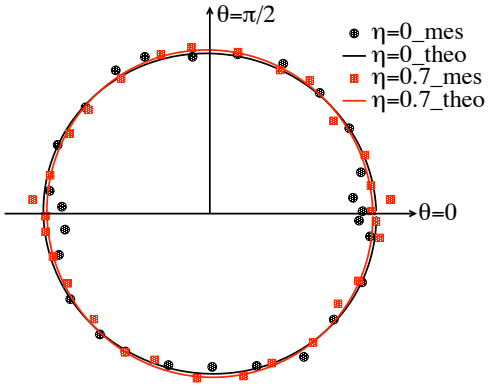


FIGURE 2.19 – *Représentation polaire de la distribution $P(\theta)$ des orientations des contacts pour $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Les courbes "theo" donnent l'approximation de la distribution par un développement de Fourier tronqué.*

Le tenseur de fabrique $\underline{\boldsymbol{F}}$ peut être exprimé avec l'équation 2.8 sous sa forme intégrale par

$$F_{\alpha\beta} = \int_0^\pi n_\alpha(\theta) n_\beta(\theta) P(\theta) d\theta \tag{2.10}$$

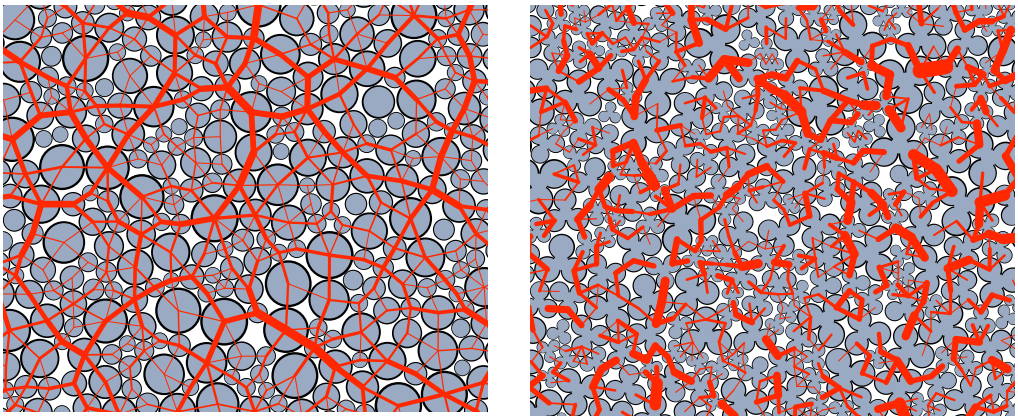
Il vient avec cette expression que l'anisotropie de contact a_c est donnée par

$$a_c = 2(F_1 - F_2) \tag{2.11}$$

où F_1 et F_2 désignent les valeurs propres de $\underline{\boldsymbol{F}}$. a_c désigne l'anisotropie du réseau de contact. C'est une grandeur scalaire qui quantifie le degré d'anisotropie du réseau de contacts d'un système granulaire. En théorie, lorsque $P(\theta)$ est uniforme, le milieu est parfaitement isotrope et $a_c = 0$, puis plus le milieu devient anisotrope plus a_c augmente vers sa valeur maximale 1. Les valeurs obtenues pour a_c à partir du tenseur de fabrique sont respectivement 0,0030 et 0,0025 pour $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Le réseau de contact est donc isotrope avec une très bonne approximation.

2.4.5 Réseau de forces

La figure 2.20 montre une vue du réseau de forces normales des échantillons isotropes pour $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. L'orientation et l'épaisseur des traits rouges donnent respectivement l'orientation et l'intensité des forces. Comme pour l'orientation des normales au contact, les forces normales sont distribuées d'une manière assez isotrope dans toutes les directions de l'espace.



$\eta = 0$ (a) $\eta = 0,7$ (b)

FIGURE 2.20 – *Vue du réseau de forces normales dans les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. L'orientation et l'épaisseur des traits donnent respectivement l'orientation et l'intensité de la force normale de contact.*

Ce résultat qualitatif peut être là aussi quantifié en utilisant la distribution de l'intensité moyenne des forces normales en fonction de l'orientation des contacts représentée pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$ sur la figure 2.21. Les points représentent les données brutes c'est-à-dire issus du recensement des forces normales moyennes $\langle f_n \rangle(\theta)$ par secteur angulaire $[\theta - \theta/2; \theta + \theta/2]$ sur l'ensemble du volume des échantillons. Les courbes en trait continu résultent de l'approximation de Fourier de la distribution angulaire des forces normales moyennes, donnée par l'expression

$$\langle f_n \rangle_\theta(\theta) = \langle f_n \rangle \left\{ 1 + a_{f_n} \cos 2(\theta - \theta_n) \right\}, \tag{2.12}$$

où $\langle f_n \rangle$ est la force normale moyenne, a_{f_n} est l'anisotropie des forces normales et θ_n la direction pour laquelle la force est la plus intense. Comme nous le voyons, les 4 courbes forment un cercle et se superposent. La valeur mesurée de a_{f_n} ne dépasse pas 0,0025, ce qui montre que les échantillons sont dans un état de contrainte isotrope dans la limite de la précision statistique et que là encore la non-convexité n'influe pas sur cet état de contrainte isotrope.

La figure 2.22 montre les densités de probabilité des forces normales. Pour chaque échantillon les forces sont normalisées par la force moyenne correspondante $\langle f_n \rangle$. Les courbes de la figure 2.22 montrent globalement la forme de distribution des forces normales typiquement observé dans les systèmes granulaires (cf. figure 1.11). La distribution des forces fortes ($> \langle f_n \rangle$) peut être approximée par une exponentielle décroissante, tandis que la distribution des forces faibles ($< \langle f_n \rangle$) présente un pic de faible ampleur à une valeur de la force inférieure à la force

moyenne et elle tend vers une valeur finie quand $f_n \to 0$ [88, 103]. La présence de ce pic est caractéristique des empilements statiques et isotropes. Pour les empilements anisotropes, les forces faibles présentent une distribution en loi de puissance décroissante comme on le verra dans le chapitre 3. Il est remarquable que pour ces échantillons la non-convexité n'influe pas sur la distribution des forces. Ce résultat est cohérent avec l'invariabilité du nombre de coordination, du nombre moyen de voisins en contact et de la proportion des différents types de contact en fonction de η. Il indique encore une fois que le caractère isostatique l'emporte sur la forme des particules.

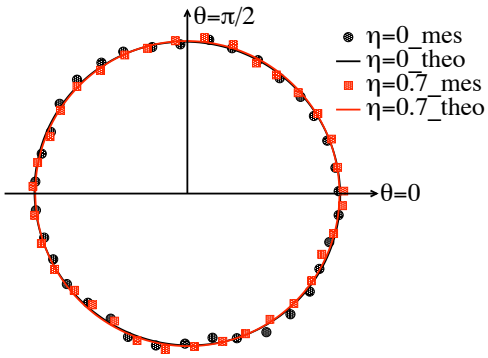


FIGURE 2.21 – *Représentation polaire de la fonction $\langle f_n \rangle(\theta)/\langle f \rangle$ pour $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$. Les courbes "theo" sont les approximations de Fourier.*

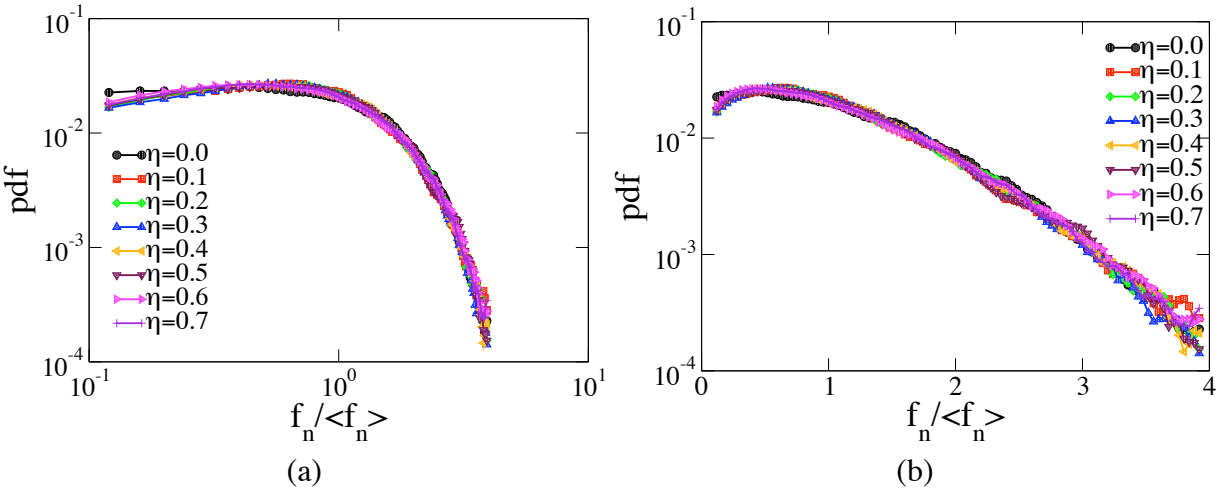


FIGURE 2.22 – *Distribution des forces normales à l'issue de la compression isotrope pour différents échantillons η en échelles logarithmique (a) et semi-logarithmique (b).*

Afin d'évaluer le rôle des différents types de contact par rapport à la transmission des forces, nous avons calculé la force relative moyenne (f_γ) supportée par les contacts simples, doubles, double-simples et triples en fonction de η. Pour un contact de type γ, cette quantité est donnée par

$$f_\gamma = k_\gamma \frac{\langle f_n \rangle_\gamma}{\langle f_n \rangle}, \tag{2.13}$$

où $\langle \ldots \rangle_\gamma$ est la moyenne sur les contacts de type γ et k_γ désigne la proportion de ce type de contact. Cette quantité adimensionnée donne le niveau des forces normales supportées par chaque type de contact indépendamment de leur nombre.

La figure 2.23, montre l'évolution de f_S, f_D, f_{DS} et f_T en fonction de η. Nous voyons dans un premier temps que la non-convexité n'a pas d'effet sur la contribution séparée des différents types de contact concernant la répartition des efforts normaux. Les contacts simples apparaissent comme les principaux supports de la transmission des forces normales. Ils sont suivis par les contacts doubles et double-simples qui ont une contribution équivalente et enfin par les contacts triples. Il est intéressant de voir que les contacts double-simples sont deux fois moins nombreux que les contact doubles (voir figure 2.15) alors qu'ils supportent un chargement équivalent.

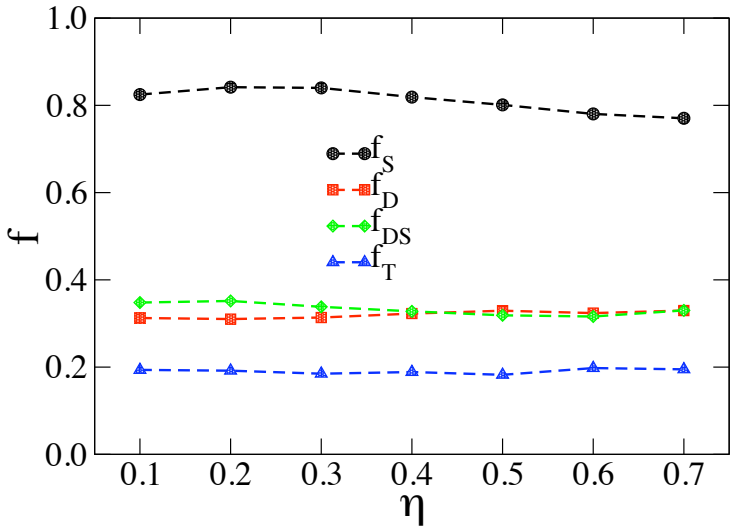


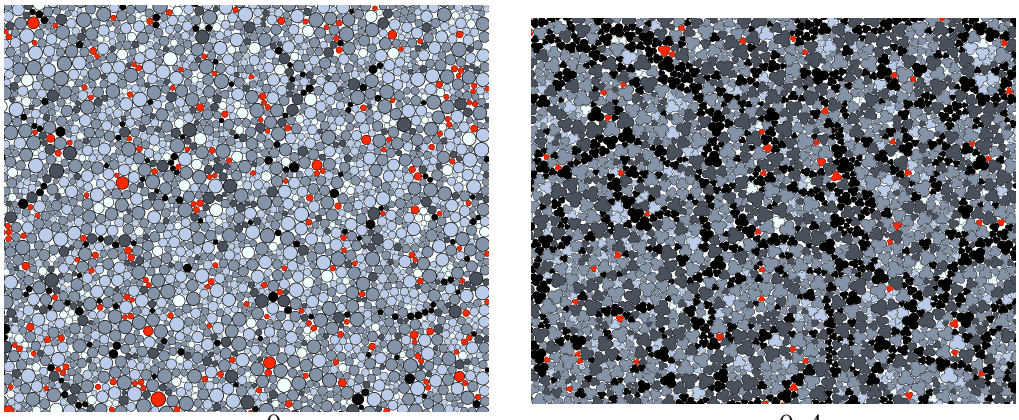
FIGURE 2.23 – *La force moyenne normale par type de contact en fonction de η.*

La visualisation de l'état de contrainte sur les particules est un moyen d'observer qualitativement la répartition spatiale des efforts transmis à l'échelle des particules. En l'absence de forces tangentielles, nous allons considérer ici de la contrainte moyenne sur les particules. Le tenseur de contrainte $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^i$ pour une particule i est donné par

$$\sigma^i_{\alpha\beta} = \frac{1}{V^i} \sum_{c \in \mathcal{I}} f^c_\alpha r^c_\beta, \tag{2.14}$$

où $\boldsymbol{r^c}$ désigne le vecteur contact reliant le centre de gravité de la particule au contact c, V^i le volume de la particule i et $\mathcal{I}$ l'ensemble des contacts de la particule i. La contrainte moyenne pour une particule i, $\langle \sigma^i \rangle$ est donnée par $\langle \sigma^i \rangle = (\sigma^i_{\alpha\alpha} + \sigma^i_{\beta\beta})/2$.

La figure 2.24 montre les cartes de contraintes moyennes des particules pour les échantillons $\eta = 0, \eta = 0,4$. Nous voyons clairement que ces contraintes sont distribuées de manière très hétérogène dans les deux échantillons. Les particules flottantes (en rouge) ne subissant aucun effort et sont plus nombreuses pour l'échantillon $\eta = 0$ que pour les échantillons $\eta = 0,4$.



$\eta = 0$ (a) $\eta = 0,4$ (b)

FIGURE 2.24 – *Carte des contraintes moyennes sur les particules pour les échantillons $\eta = 0$ (a) et $\eta = 0,4$ (b). L'intensité de la contrainte moyenne que subit une particule est proportionnelle au niveau de gris. Plus elle est chargée plus le niveau de gris est élevé. Les particules colorées en rouge ne participent pas au réseau de forces, ce sont des particules flottantes.*

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la méthodologie mise en œuvre dans le cadre de cette thèse pour la modélisation numérique des poudres cohésives à particules non convexes. Cette modélisation comporte un modèle physique du matériau (formes et tailles des particules, leurs interactions), un algorithme et des procédures numériques de préparation et de sollicitation des échantillons. Nous avons souligné nos critères et arguments pour divers choix opérés dans le but d'assurer à la fois la pertinence et la faisabilité des études numériques entreprises.

Nous avons également présenté certains concepts et outils d'analyse plus particulièrement appliqués dans ce chapitre pour caractériser les assemblages préparés par compaction isotrope. Les analyses de la texture et du réseau des forces ont permis de confirmer le caractère isotrope de ces assemblages. La connectivité du réseau de contact indique l'isostaticité de ces assemblages préparés avec frottement nul, une propriété qui est prépondérante et explique l'indépendance des distributions des forces et d'autres grandeurs micro-statistiques par rapport au paramètre de non-convexité η. Le caractère isostatique signifie aussi que l'état mécanique de chaque assemblage ainsi construit pour chaque valeur de η est statistiquement reproductible et indépendant de l'histoire de sa préparation. En d'autres termes, cet état représente uniquement les caractéristiques du matériau, et c'est précisément ce qui fait son intérêt pour nos études. Cet état est en particulier caractérisé par une compacité ρ^{iso} qui peut être considérée comme la compacité maximale du matériau.

Un résultat très intéressant de cette étude est la mise en évidence de l'évolution non-monotone de ρ^{iso} avec η. Cette observation montre clairement que l'effet de la forme des particules sur le comportement des matériaux granulaires est loin d'être intuitif. Les échantillons denses isotropes analysés dans ce chapitre constituent l'état initial des simulations de com-

pression biaxiale du chapitre suivant. La compression biaxiale conduit le système vers l'état critique qui constitue un autre état de référence. Nous étudierons cette transition et les propriétés de l'état critique, ce qui nous permettra de caractériser la résistance au cisaillement et la dilatance en fonction de la non-convexité des particules.

CHAPITRE 3

Rhéologie et texture en cisaillement

Sommaire

3.1 Introduction **75**
3.2 Variables de contrainte et de déformation **75**
3.3 Comportement macroscopique **77**
3.3.1 Résistance au cisaillement 77
3.3.2 Dilatance 79
3.4 Microstructure de l'état critique **81**
3.4.1 Topologie du réseau de contact 81
3.4.2 Anisotropie du réseau de contact 83
3.5 Transmission des forces normales **84**
3.5.1 Distributions des forces normales 84
3.5.2 Anisotropie des forces normales 86
3.6 Mobilisation et anisotropie des forces de frottement **89**
3.6.1 Mobilisation du frottement 89
3.6.2 Anisotropie des forces de frottement 91
3.7 Modélisation micro-mécanique **94**
3.7.1 Origines de la résistance au cisaillement 94
3.7.2 Un modèle pour la compacité 95
3.8 Extensions **99**

3.8.1 Un benchmark pour l'effet de forme 101
3.8.2 Agrégats non convexes en dimension 3 103
3.9 Conclusion 107

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de nos simulations de compression biaxiale des assemblages composés d'agrégats non convexes, en partant des configurations denses isotropes décrites dans le chapitre précédent comme états initiaux. Nous nous intéressons à la rhéologie, c'est-à-dire à l'évolution vers l'état critique en termes de contraintes de cisaillement et de compacité, mais aussi à la texture et la transmission des forces, dans le but de comprendre l'influence du paramètre de non-convexité η des particules sur la résistance au cisaillement.

Nous allons mettre en évidence le rôle des enchevêtrements à travers les contacts multiples entre agrégats et montrer que ces interactions conduisent à une dépendance non-linéaire, voire saturante, de la résistance au cisaillement vis-à-vis de η. Une analyse fondée sur la décomposition harmonique du tenseur de contrainte permet également de quantifier l'influence de la non-convexité des particules sur la résistance au cisaillement à travers l'anisotropie des réseaux de contact et de force induite par le cisaillement.

3.2 Variables de contrainte et de déformation

Les échantillons issus de la compaction isotrope sous l'effet d'une pression isotrope p_0 sont soumis à un chargement biaxial en imposant une contrainte latérale $\sigma_{xx} = p_0$ sur la paroi de droite et une vitesse verticale constante $v_y < 0$ sur la paroi supérieure (voir figure 2.5). Le coefficient de frottement entre les particules est $\mu_s = 0,5$, mais le coefficient de frottement particule/paroi μ_w reste nul afin d'obtenir des conditions aux limites aussi homogènes que possible. La valeur de μ_s n'est calée sur aucune mesure particulière. Mais le choix d'une valeur relativement élevée est motivé par l'hypothèse physiquement plausible que le caractère cohésif des poudres d'UO_2 induit nécessairement une résistance au glissement importante au niveau des interfaces entre agrégats. Par ailleurs, comme signalé dans le chapitre 2, le comportement macroscopique est peu influencé par la valeur de μ_s dès que $\mu_s > 0,2$. Pour cette raison, même si ce chapitre est consacré au comportement en cisaillement des systèmes non-cohésifs (l'effet de la cohésion étant évalué dans le chapitre 4), nous considérons que le frottement élevé entre agrégats est toujours actif.

Pour la description du comportement mécanique, il est nécessaire d'évaluer l'état de contrainte et les déformations cumulées du système à tout instant et dans un élément de volume quelconque. L'état de contrainte est donné par le tenseur de contrainte qui peut être évalué de différentes façons à partir des forces et des orientations des contacts [95]. Il existe plusieurs expressions *micro-mécaniques* du tenseur de contrainte $\underline{\boldsymbol{\sigma}}$ [19, 12].

Pour nos analyses nous avons utilisé une approche introduite par Moreau et basée sur le principe des puissances virtuelles [65]. Un moment tensoriel interne $\underline{\boldsymbol{M^i}}$ est défini pour chaque particule i par

$$M^i_{\iota\delta} = \sum_{c\in\mathcal{I}} f^c_\iota r^c_\delta, \tag{3.1}$$

où f_ι^c est la composante ι de la force exercée sur la particule i au contact c, r_δ^c est la composante δ du vecteur position du contact c ($c \in \mathcal{I}$). La sommation porte sur tous les contacts de la particule i. Cette définition s'applique également à tout assemblage de particules en ne considérant que les contacts sur les frontières de l'assemblage. En raison de l'égalité des actions mutuelles entre deux particules, il est facile de montrer que le moment interne d'une collection de particules est la somme de tous les moments internes de ses particules. Le tenseur des contraintes de Cauchy $\underline{\boldsymbol{\sigma}}$ est obtenu en divisant le moment interne de l'assemblage par son volume

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \sum_{i \in V} \underline{\boldsymbol{M}}^i, \tag{3.2}$$

où V est le volume de l'espace occupé par l'assemblage.

Ainsi, le tenseur des contraintes peut être défini comme la densité volumique des moments internes. L'équilibre des moments des forces sur chaque particule conduit à la symétrie des tenseurs $\underline{\boldsymbol{M}}$ et donc la symétrie du tenseur de Cauchy. En recombinant les différents termes qui interviennent dans la somme de l'équation (3.2), on peut montrer que l'on arrive à une autre expression du tenseur des contraintes couramment employée

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \sum_{c \in V} \boldsymbol{f}_\iota^c \boldsymbol{l}_\delta^c, \tag{3.3}$$

où $\boldsymbol{\ell}^c$ représente le vecteur branche reliant les centres de deux particules en contact noté c [12, 104].

Dans un essai de compression biaxiale, la direction principale majeure des contraintes coïncide avec l'axe de compression et les contraintes principales σ_1 et σ_2 sont respectivement orientées suivant les directions de compression (ici verticale) et d'extension (ici horizontale) de telle sorte que $\sigma_1 = \sigma_{yy}$ et $\sigma_2 = \sigma_{xx} = p_0$. Nous allons couramment faire appel à la pression moyenne p et à la contrainte déviatorique q données par

$$p = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2), \tag{3.4}$$

$$q = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2). \tag{3.5}$$

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

$$\varepsilon_1 = \int_{h_0}^{h} \frac{dh'}{h'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta h}{h_0}\right), \tag{3.6}$$

$$\varepsilon_2 = \int_{l_0}^{l} \frac{dl'}{l'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta l}{l_0}\right) \tag{3.7}$$

où $\Delta h = h - h_0$ et $\Delta l = l - l_0$. La *déformation de cisaillement* cumulée est alors donnée par

$$\varepsilon_q \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2, \tag{3.8}$$

alors que la déformation volumique ε_p est

$$\varepsilon_p = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \int_{V_0}^{V} \frac{dV'}{V'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta\rho}{\rho}\right) \tag{3.9}$$

où $V_0 = l_0 h_0$ est le volume initial et $\Delta\rho = \rho - \rho_0$ est la variation de la compacité.

Pour les particules rigides frottantes, la contrainte déviatorique normalisée est $\sin\varphi = q/p$, où φ est l'angle de frottement interne. Pendant la compression biaxiale, cet angle évolue de sa valeur nulle dans l'état initial isotrope ($q = 0$) vers sa valeur critique φ^* donnée par $\sin\varphi^* = q^*/p$. De la même manière, on définit un angle de dilatance ψ donné par

$$\sin\psi = -\frac{\dot{\varepsilon}_p}{\dot{\varepsilon}_q} \tag{3.10}$$

Une valeur positive de ψ correspond à une augmentation du volume (dilatance) sous l'effet du cisaillement $\dot{\varepsilon}_q$ tandis qu'une valeur négative signifie une diminution du volume et donc une dilatance négative. L'angle ψ s'annule dans l'état critique. Remarquons aussi que, étant données les définitions ci-dessus, la puissance $\dot{w}$ fournie au système est donnée par

$$\dot{w} = \sigma_1\,\dot{\varepsilon}_1 + \sigma_2\,\dot{\varepsilon}_2 = p\,\dot{\varepsilon}_p + q\,\dot{\varepsilon}_q = p\,\dot{\varepsilon}_q(\sin\varphi - \sin\psi) \tag{3.11}$$

Ce travail est positif pendant une déformation quasi-statique et il est en grande partie dissipé à chaque pas de déformation de telle sorte que $\varphi > \psi$. Ceci signifie que le comportement plastique est non-associé.

3.3 Comportement macroscopique

3.3.1 Résistance au cisaillement

La figure 3.1 représente l'évolution de q/p en fonction de la déformation de cisaillement cumulée pour quelques valeurs de η. Cette courbe contrainte-déformation montre que q/p passe par un maximum avant de diminuer et se stabiliser à une valeur moyenne (aux fluctuations près) q^*/p pour $\varepsilon_q > 0,3$. Cette valeur constante de q^*/p caractérise donc l'état critique du matériau. On peut aussi voir que, sur l'ensemble des courbes, le niveau de q/p tout au long du cisaillement, notamment au pic de contrainte et dans l'état critique, croit avec la non-convexité η. En d'autres termes la non-convexité contribue à augmenter la résistance au cisaillement.

Notons que le passage par un pic est une conséquence de l'état de compacité maximale de la configuration initiale pour toutes les valeurs de η. Le pic est atteint après une montée rapide

de q/p (sur un pas de temps de calcul), induite par la rigidité infinie des particules (aucune déformation élastique) et la compacité maximale initiale, et un peu de durcissement accompagné de réarrangements des agrégats. La relaxation de la contrainte déviatorique vers sa valeur critique q^*/p correspond à un transitoire d'adoucissement accompagné de réarrangements et d'une dilatance, comme on le verra ci-après.

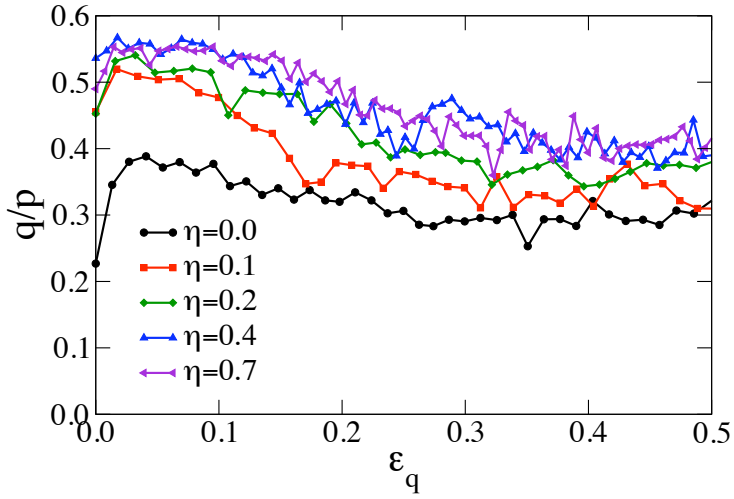


FIGURE 3.1 – *Déviateur de contraintes normalisé q/p en fonction de la déformation de cisaillement pour différentes valeurs de η.*

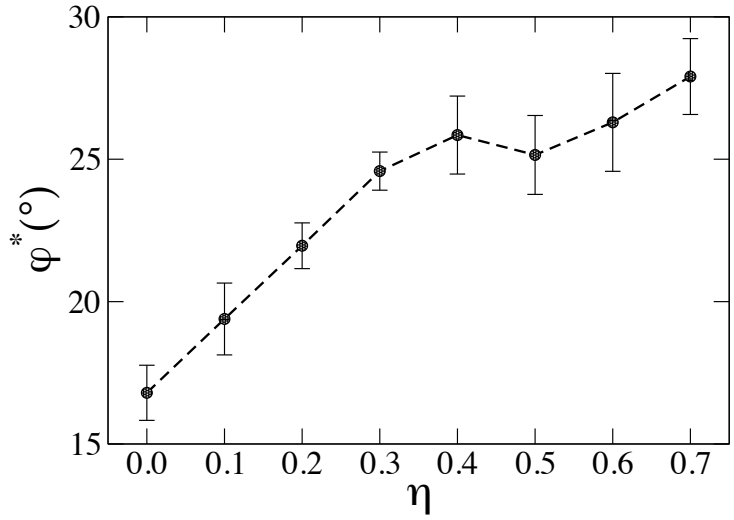


FIGURE 3.2 – *L'angle de frottement interne φ^* en fonction de η moyenné dans l'état critique. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des fluctuations autour des valeurs moyennes.*

La figure 3.2 montre l'angle de frottement critique φ^* en fonction de η. Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne dans l'état critique. L'angle de frottement critique augmente d'abord rapidement et linéairement avec η, puis se stabilise à une valeur constante aux fluctuations près. Il passe d'environ $17°$ pour les disques

à environ $26°$ pour $\eta = 0,7$. L'augmentation rapide de φ avec η est remarquable et reflète l'effet d'enchevêtrement croissant entre particules non convexes, mais sa saturation par la suite indique la limite de cet effet par un mécanisme que nous discuterons lorsque nous descendrons dans l'échelle de description au niveau des particules dès que η dépasse 0,4.

3.3.2 Dilatance

L'évolution de la compacité ρ au cours du cisaillement est représentée sur la figure 3.3 en fonction de ε_q pour différentes valeurs de η. Au début du cisaillement, les échantillons, qui sont initialement denses, se dilatent et donc ρ diminue à partir de sa valeur initiale ρ^{iso} jusqu'à une valeur limite ρ^* pratiquement constante que nous attribuons à l'état critique. On remarque qu'à l'exception des disques ($\eta = 0$), les différentes courbes se croisent peu de telle sorte que l'ordre des compacités en fonction de η reste le même que dans l'état initial.

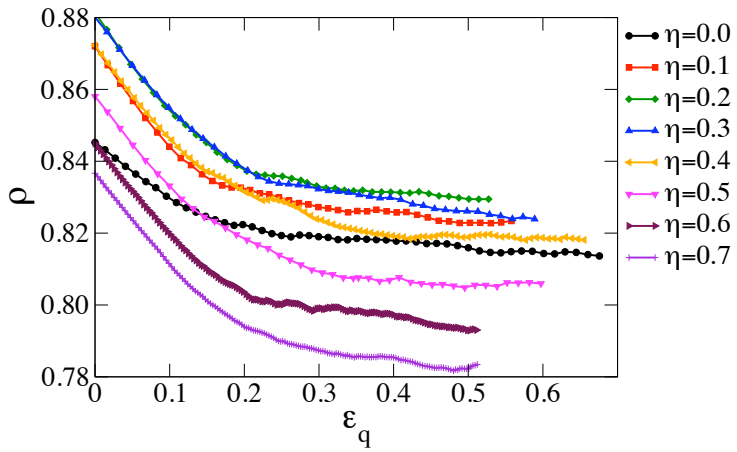


FIGURE 3.3 – *Evolution de la compacité ρ en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour différents degrés de non-convexité η.*

C'est ce que l'on peut voir sur la figure 3.4 qui montre l'évolution de ρ en fonction de η à différents niveaux de ε_q. On constate que la dépendance non-monotone de ρ^{iso} en fonction de η qui avait été mise en évidence au chapitre 2 et qui est reprise sur la figure 3.4 se conserve tout au long du cisaillement. La compacité maximale est toujours atteinte pour une valeur intermédiaire de η. Pour $\eta = 0,7$ la valeur atteinte dans l'état critique ρ^* est de l'ordre 0,78 ce qui représente environ 7% de moins que celle obtenue pour $\eta = 0$.

Il est important de remarquer que les valeurs de la compacité au cours du cisaillement constituent une moyenne sur l'échantillon. Au cours d'une compression biaxiale, après une phase relativement homogène de déformation, celle-ci se localise partiellement dans des bandes d'épaisseurs variables. Nous allons plus particulièrement analyser ces hétérogénéités dans le chapitre 4.

La dilatance est essentiellement localisée dans ces bandes et les compacités sont générale-

ment plus faibles dans ces bandes de cisaillement intense. La poursuite de la déformation de la boîte conduit à l'apparition de nouvelles bandes et le processus d'évolution de ces bandes est complexe. Ce processus se répercute sur la courbe d'évolution de ρ. Il faut noter que les parties de l'échantillon touchées par les bandes se dilatent, mais ne se contractent plus au niveau initial de compacité en raison du caractère irréversible de la dilatance au cours d'un cisaillement monotone de sorte que la compacité continue à diminuer. Mais cette évolution n'est pas linéaire et dépend de la dynamique des bandes. En particulier, il existe des épisodes où aucune nouvelle bande n'apparaît et par conséquent la compacité n'évolue plus, ce qui conduit à une décroissance de la compacité par paliers, comme on peut le voir sur la figure 3.3.

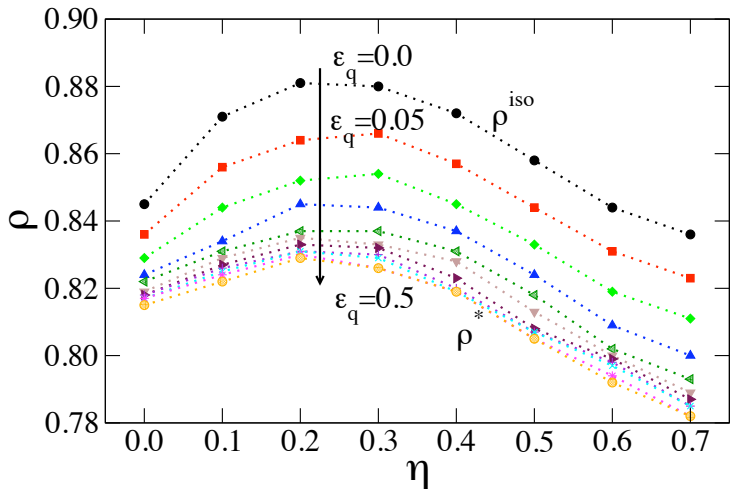


FIGURE 3.4 – *Evolution de la compacité ρ en fonction de η à différent niveau de déformation de cisaillement cumulée ε_q.*

Lorsque tout l'échantillon est traversé par des bandes de cisaillement, on peut considérer que le cisaillement est *complètement développé* et que toutes les parties de l'échantillon ont été dilatées. C'est la raison pour laquelle il faut une plus grande déformation pour atteindre la compacité critique que pour atteindre la valeur critique de la contrainte q^*, et même si des bandes apparaissent au cours de ce processus, le matériau dilaté retrouve une compacité relativement homogène dans l'état critique ou pour un cisaillement suffisamment long.

Même si l'information contenue dans la courbe d'évolution de ρ est suffisante, nous avons présenté sur la figure 3.5 l'évolution de la déformation volumique cumulée ε_p en fonction de ε_q pour mieux comparer la variation totale de volume pour les différents degrés de non-convexité. On observe que la non-convexité contribue à augmenter l'expansion volumique des matériaux granulaires et l'échantillon de disques est celui qui se dilate le moins.

Les résultats brièvement discutés dans le chapitre mettent en évidence un fait intéressant : les empilements granulaires qui résistent le mieux au chargement déviatorique sont ceux qui présentent les agrégats les plus non convexes, mais ces empilements ne sont pas nécessairement les plus compacts. Bien au contraire, le matériau à $\eta = 0,7$ est le moins compact à la fois dans l'état de compacité initial (isotrope) et dans l'état critique, mais il présente l'angle de frottement

interne le plus élevé. L'origine de ce comportement est dans la structure du réseau de contacts, qui permet une meilleure connectivité pour les particules les plus non convexes comme nous le verrons plus loin dans ce manuscrit.

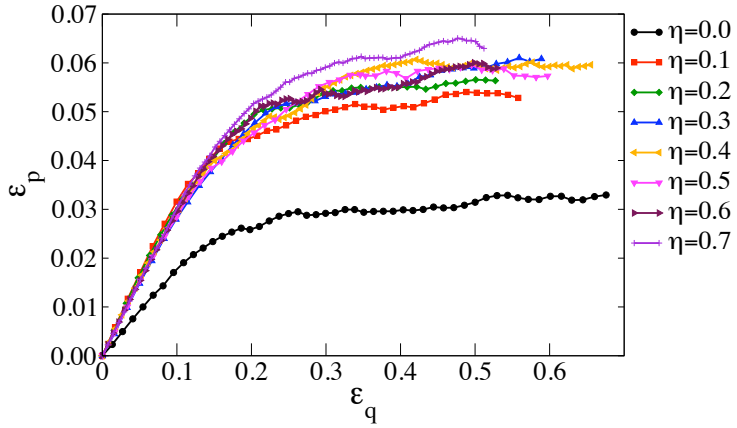


FIGURE 3.5 – *Déformation volumique cumulée en fonction de la déformation de cisaillement pour différents degrés de non-convexité η.*

3.4 Microstructure de l'état critique

Nous nous intéressons ici aux descripteurs de la texture dans l'état critique. Certains descripteurs ont été présentés et appliqués dans le chapitre 2 à l'état isotrope. Nous allons considérer les mêmes grandeurs pour l'état critique afin de caractériser la structure interne de cet état en fonction de η et par rapport à l'état isotrope.

3.4.1 Topologie du réseau de contact

La figure 3.6 montre les proportions k^* des contacts simples, double simples, doubles et triples. La répartition des différents types de contact est très différente par rapport à l'état isostatique (voir figure 2.15). La proportion des contacts simples k_S^* est plus importante par rapport à l'état isotrope (k_S^{iso}) surtout pour de faibles niveaux de non-convexité ($\eta = 0,1; 0,2; 0,3$). Les autres types de contact sont au contraire moins nombreux en proportion. k_S^* diminue lorsque η augmente et tend à saturer à environ 80%. Les autres types de contact augmente en proportion et saturent à partir de $\eta = 0,5$. Remarquons aussi que les contacts doubles sont plus de deux fois plus nombreux que les contacts de type double simple.

La figure 3.7 montre le nombre de coordination Z^* et le nombre de connectivité Z_c^* moyennés dans l'état critique en fonction de η. De manière surprenante, Z^* dépend très peu de la non-convexité η. Quelle que soit η, les particules comptent en moyenne 3 voisins de contact dans l'état critique. Par rapport à l'état isotrope, la dilatance au sein des empilements a entraîné

la perte d'un voisin de contact en moyenne. Le nombre de connectivité Z_c^* augmente avec η et tend à saturer à partir de $\eta = 0,5$. Il passe de 3 pour $\eta = 0$ à 3,7 pour $\eta = 0,7$. Dans l'état critique, la non-convexité conduit à augmenter la connectivité des empilements.

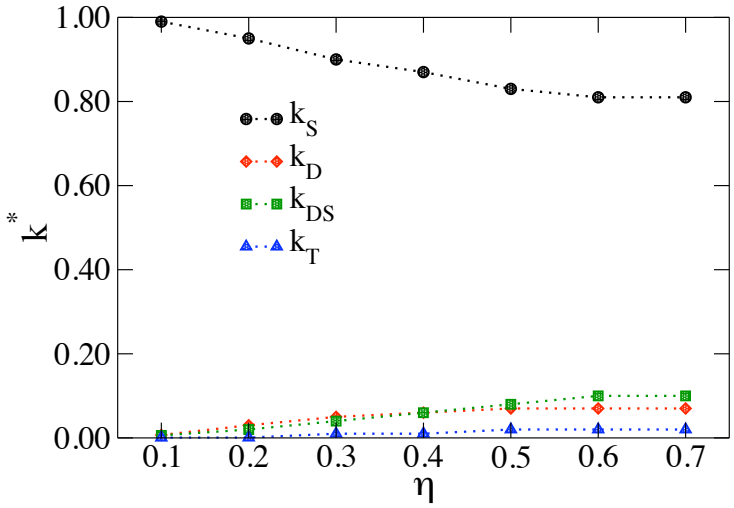


FIGURE 3.6 – *Proportion des différents types de contact en fonction de η dans l'état critique.*

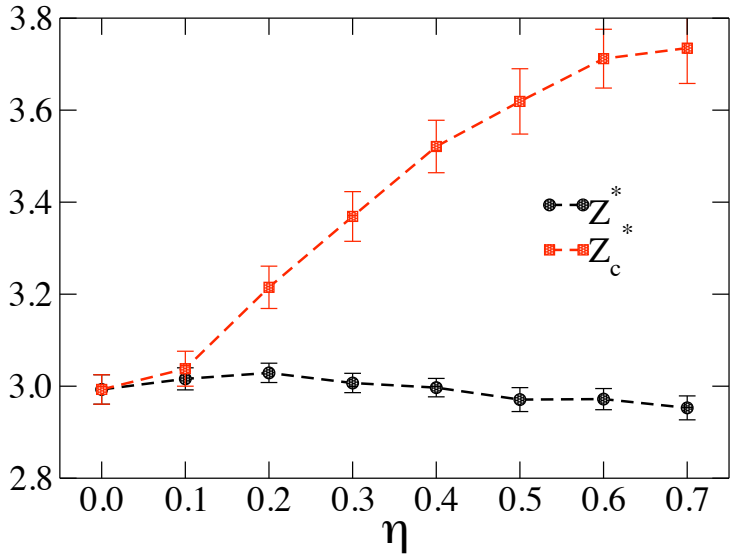


FIGURE 3.7 – *Nombre de coordination Z^* et nombre de connectivité Z_c^* moyennés dans l'état critique en fonction de η. Les barres d'erreur (de faible amplitude) traduisent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne.*

La variation relative de Z et Z_c est donnée par

$$K = \frac{Z_C}{Z} = k_S + 2(k_{DS} + k_D) + 3k_T. \tag{3.12}$$

Ce rapport dans l'état critique K^* augmente de 1 à 1,28 lorsque η varie de 0 à 0,7, comme on peut le voir sur la figure 3.8. Ce résultat indique que, pour une valeur croissante de η, les agrégats tendent à établir un plus grand nombre de contacts avec pratiquement le même nombre de voisins. Cette augmentation de la connectivité va dans le sens de l'augmentation de la résistance au cisaillement à l'état critique avec pratiquement le même effet de saturation aux fortes valeurs de η. Pour une non-convexité croissante au-delà de $\eta = 0,2$, l'état critique est de moins en moins compact, mais de plus en plus connecté et avec une tenue mécanique renforcée.

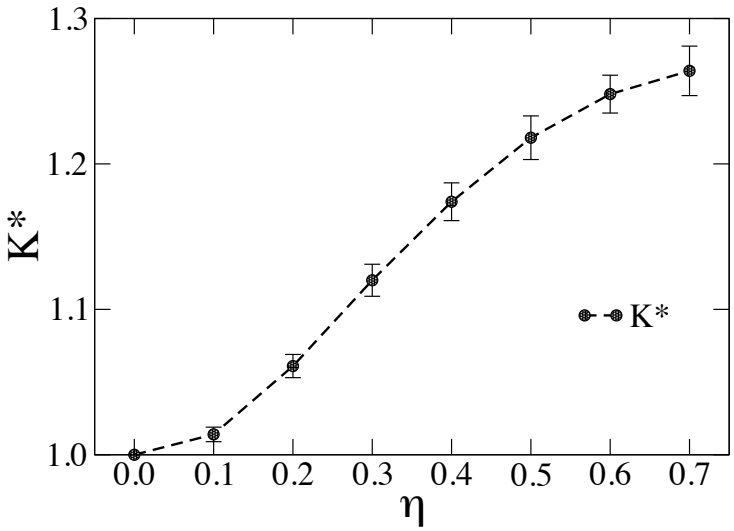


FIGURE 3.8 – *Le rapport K^* dans l'état critique en fonction de η. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne.*

3.4.2 Anisotropie du réseau de contact

Un effet majeur du cisaillement biaxial est d'induire un excès de contacts dans les directions de compression et un manque de contacts dans les directions d'extension. Il en résulte une *anisotropie induite* dans le réseau de contact. La figure 3.9 montre en représentation polaire les distributions $P(\theta)$ des orientations des normales au contact $\vec{n}$ pour $\eta = 0$, $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,5$ dans l'état critique. Les points correspondent au tracé des données brutes tandis que les courbes en trait plein correspondent aux approximations harmoniques (développement en série de Fourier à l'ordre 2) d'après l'équation 2.8. Sur cette figure, nous voyons clairement que le réseau de normales au contact est anisotrope et présente une orientation privilégiée suivant la direction de compression $\pi/2$. L'approximation de Fourier à l'ordre 2 fournit un excellent ajustement des données.

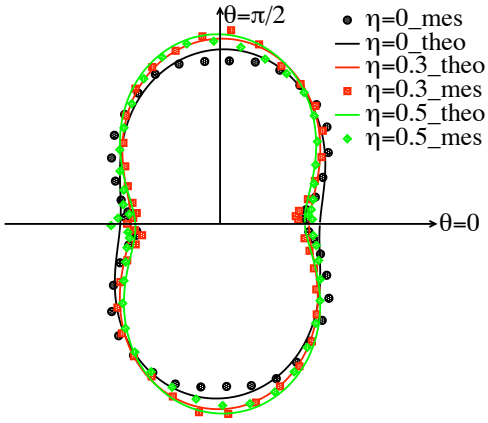


FIGURE *3.9 – Représentation polaire des distributions des orientations des normales aux contacts pour trois valeurs de η, ainsi que des approximations harmoniques (en traits pleins) obtenus par un développement de Fourier à l'ordre 2.*

L'anisotropie d'ordre 2, a_c de ces distributions peut être évaluée à l'aide du tenseur de fabrique (voir équation 2.9). La figure 3.10 montre l'évolution de a_c en fonction de ε_q durant l'essai biaxial pour les différentes valeurs de η. Au cours du cisaillement les anisotropies augmentent, passent par un maximum, puis se stabilisent vers une valeur correspondant à l'état critique. L'évolution de a_c est globalement assez similaire avec celle de q/p (voir figure 4.1) à cette différence près que le pic de a_c est atteint légèrement plus tard que celui de q/p. La figure 3.11 présente l'évolution de l'anisotropie a_c^* moyennée dans l'état critique (entre 30 et 50% de déformation de cisaillement comme pour les autres grandeurs) en fonction de η. Aux fluctuations près, a_c^* augmente rapidement entre $\eta = 0$ et $\eta = 0,3$, puis sature à la valeur $\simeq 0,4$. Cette anisotropie est nettement plus élevée que celle des disques. L'effet de saturation est cohérent avec celui de q^*/p en fonction de η.

3.5 Transmission des forces normales

3.5.1 Distributions des forces normales

La figure 3.12, montre la densité de probabilité des forces normales de contact dans l'état critique pour toutes les valeurs de η. Le nombre des forces fortes (supérieures à la force moyenne) décroît exponentiellement aussi bien pour les disques que pour les agrégats :

$$P(f_n > \langle f_n \rangle) \propto e^{-\alpha_n f_n / \langle f_n \rangle} \tag{3.13}$$

L'exposant α_n décroît de 1,71 à 1 lorsque η augmente de 0 à $0,7$. En d'autres termes, l'hétérogénéité des fortes forces augmente avec la non-convexité et les forces les plus importantes atteintes dans nos échantillons sont environ 4 à 6 fois supérieures à la force moyenne pour η variant de 0 à 0,7. Remarquons que, pour cette même raison, le caractère exponentiel des forces fortes est nettement plus marqué dans l'état critique par rapport à l'état isotrope.

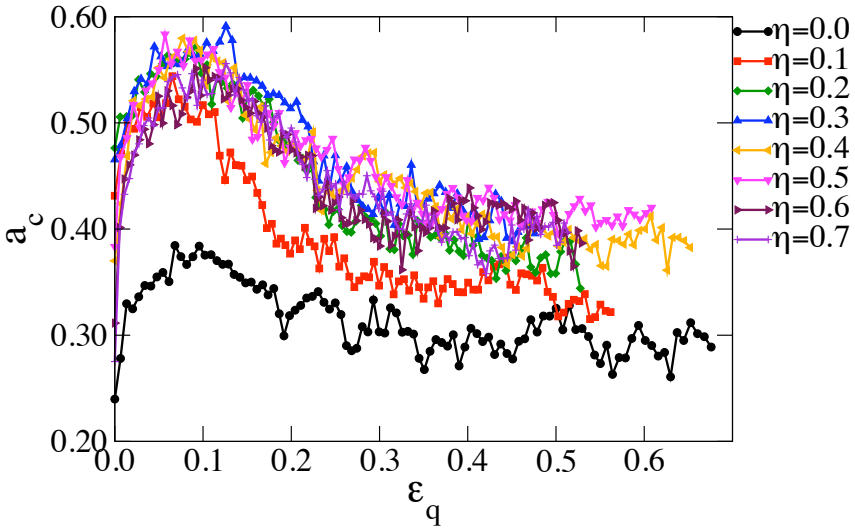


FIGURE ***3.10*** *– Evolution de l'anisotropie des orientations des contacts a_c en fonction de la déformation de cisaillement cumulée.*

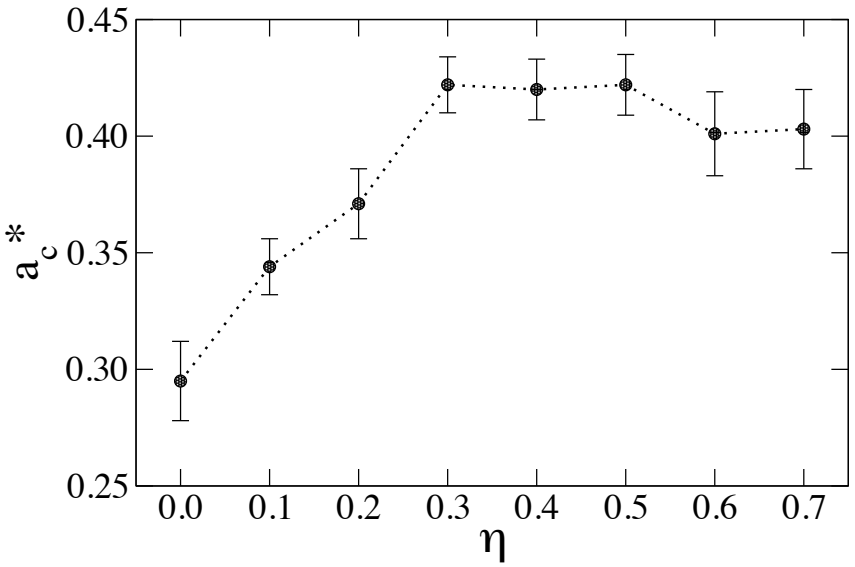


FIGURE ***3.11*** *– Anisotropie de texture a_c moyennée dans l'état critique en fonction de la non-convexité. Les barres d'erreurs représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne dans l'état critique.*

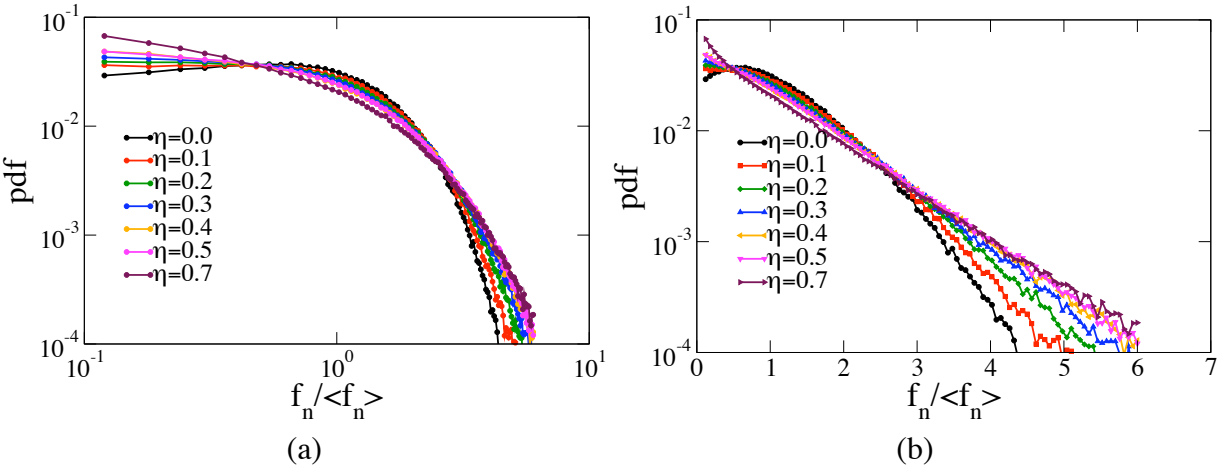


FIGURE 3.12 – *Distribution des forces normales dans l'état critique en échelle logarithmique (a) et en échelle semi-logarithmique (b) pour différentes valeurs de η.*

En ce qui concerne les forces faibles (inférieures à la force moyenne), la non-convexité contribue à augmenter considérablement leur nombre. En écartant les échantillons de disques, la distribution des forces dans cet intervalle est mieux approchée par une loi de puissance décroissante

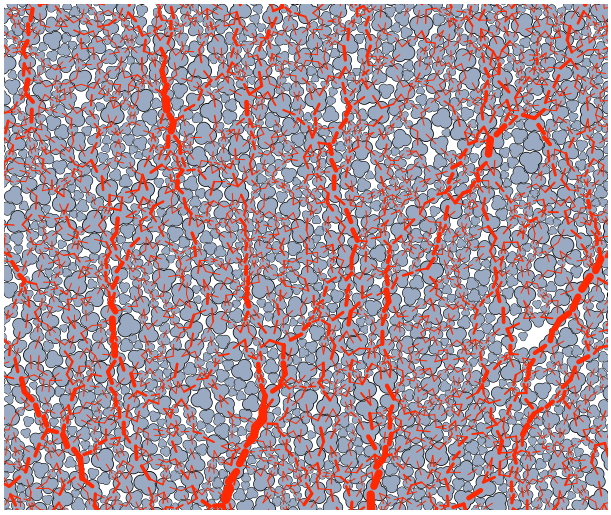
$$P(f_n < \langle f_n \rangle) \propto \left(\frac{f_n}{\langle f_n \rangle} \right)^{-\beta_n}. \tag{3.14}$$

L'exposant β_n augmente de $\simeq -0,16$ pour $\eta = 0$ à $\simeq 0,46$ pour $\eta = 0,7$.

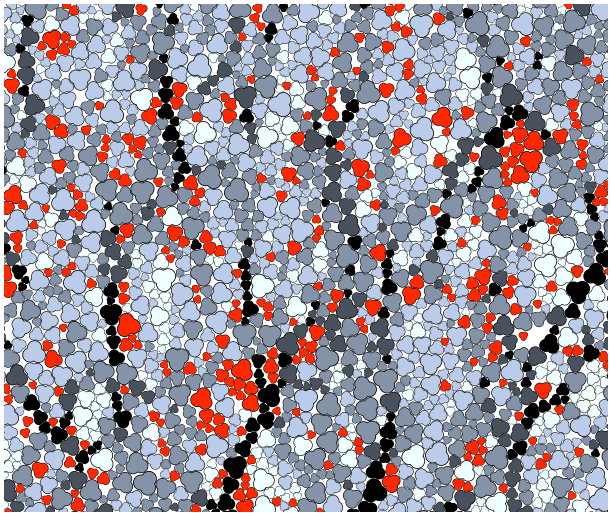
3.5.2 Anisotropie des forces normales

Sous un chargement déviatorique, le réseau de force de contact est influencé par l'anisotropie induite et les contacts orientés dans la direction de compression supportent les forces les plus intenses. Les forces dans toutes les directions s'organisent en un réseau *bimodal* [87, 93]. Cette organisation est générique et on l'observe aussi pour les assemblages d'agrégats non convexes comme on peut le voir sur la figure 3.13 qui montre un exemple des cartes des forces normales et des pressions moyennes sur les particules pour l'échantillon $\eta = 0,3$ dans l'état critique.

La figure 3.14 montre la fonction $\langle f_n \rangle(\theta)$ de la force normale moyenne en fonction de l'orientation des contacts pour les échantillons $\eta = 0$, $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,5$ dans l'état critique ainsi que les courbes d'ajustement par un développement de Fourier d'ordre 2. Comme pour les orientations des contacts, les forces présentent une anisotropie avec une direction privilégiée suivant l'axe de compression $\pi/2$. Le développement de Fourier à l'ordre 2 fournit clairement un très bon fit des données.



(a)



(b)

FIGURE ***3.13*** *– Cartes du réseau de forces normales de contact (a) et du réseau des contraintes moyennes sur les particules (b). Les traits représentent les forces normales et leur épaisseur est proportionnelle à l'intensité de la force. Les particules en rouge ne subissent aucun effort et pour les autres particules le niveau de gris est proportionnel à la contrainte qu'elles supportent.*

L'anisotropie a_{f_n} des forces normales peut être évaluée à partir de l'ajustement de la fonction $\langle f_n \rangle(\theta)$. Mais il est commode d'utiliser le tenseur d'ordre 2 $\underline{\chi}$ [87] défini par

$$\chi^n_{\alpha\beta} = \frac{1}{\langle f \rangle} \sum_{c=1}^{N_c} f_n n^c_\alpha n^c_\beta = \frac{1}{\langle f \rangle} \langle f_n n_\alpha n_\beta \rangle_V \equiv \frac{1}{\langle f \rangle} \int_0^\pi \langle f_n \rangle(\theta) n_\alpha(\theta) n_\beta(\theta) P(\theta) d\theta \tag{3.15}$$

En utilisant les développements de Fourier à l'ordre 2 de $P(\theta)$ et de $\langle f_n \rangle(\theta)$ dans l'expression

intégrale de $\chi^n_{\alpha\beta}$, et en négligeant les produits des anisotropies, on obtient l'expression suivante

$$2\frac{\chi^n_1 - \chi^n_2}{\chi^n_1 + \chi^n_2} = a_c + a_{f_n}, \tag{3.16}$$

où χ^n_1 et χ^n_2 sont les valeurs propres du tenseur χ. Cette relation permet d'évaluer assez facilement la valeur de a_{f_n} à partir du calcul du tenseur χ et de la valeur de a_c obtenue à travers le tenseur de fabrique.

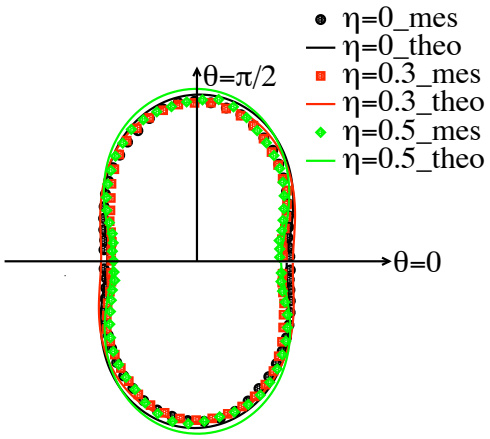


FIGURE 3.14 – *Représentation polaire des distributions angulaires des forces normales moyennes $\langle f_n\rangle(\theta)/\langle f_n\rangle$ ainsi que des approximations harmoniques dans l'état résiduel pour 3 valeurs de η.*

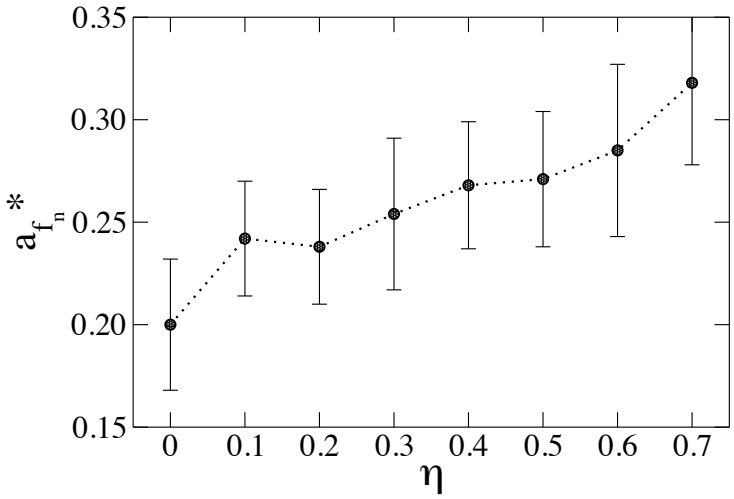


FIGURE 3.15 – *L'anisotropie des forces normales moyennées dans l'état critique en fonction de la non-convexité. Les barres d'erreurs représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne dans l'état critique.*

La figure 3.15 montre la valeur de a_{f_n} moyennées dans l'état critique $a^*_{f_n}$ en fonction de η. Nous observons que cette anisotropie augmente de manière monotone en fonction de η. Il est remarquable que pour toutes les valeurs de η, a^*_c est plus élevée que $a^*_{f_n}$ et l'effet de saturation observée pour a^*_c est moins clair pour $a^*_{f_n}$.

3.6 Mobilisation et anisotropie des forces de frottement

La présence des forces de frottement et leur mobilisation est un mécanisme clé de la résistance au cisaillement des empilements. Nous sommes intéressés ici par l'influence de la non-convexité des agrégats sur ce phénomène, ainsi que par son anisotropie induite par la compression biaxiale.

3.6.1 Mobilisation du frottement

La mobilisation de frottement au niveau d'un contact est caractérisée par la valeur de la force de frottement f_t par rapport à son seuil $\mu_s f_n$ au même contact. Nous définissons donc l'indice de mobilisation I_f par la valeur moyenne du rapport $f_t/(\mu_s f_n)$

$$I_f = \left\langle \frac{|f_t|}{\mu_s f_n} \right\rangle, \tag{3.17}$$

où la moyenne est prise sur l'ensemble des contacts. Il faut remarquer que la force de frottement est complètement mobilisée pour une fraction des contacts. Nous allons donc considérer aussi la proportion S de ces *contacts critiques*.

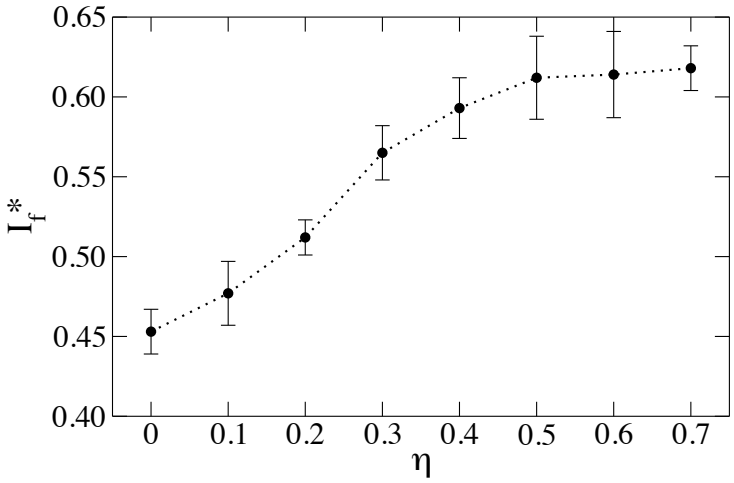
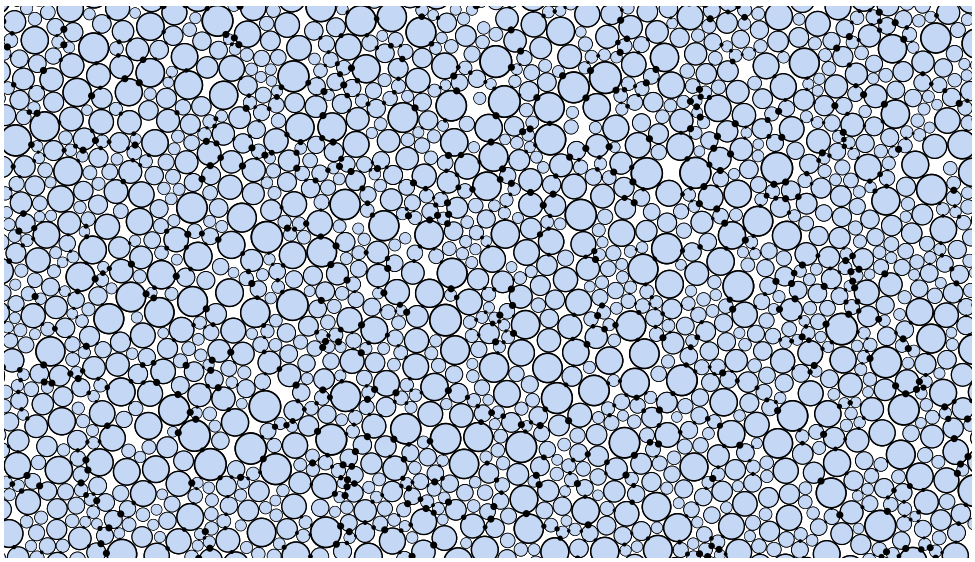


FIGURE ***3.16*** *– Indice de mobilisation des forces de frottement dans l'état critique en fonction de la non-convexité. Les barres d'erreurs représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne.*

La figure 3.16 représente l'indice de mobilisation I_f^* dans l'état critique en fonction de η. On voit que I_f^* augmente avec η à partir de 0,45 pour $\eta = 0$ jusqu'à 0,60 pour $\eta = 0,5$, et tend à saturer pour les valeurs plus grandes de η. L'augmentation de I_f^* signifie une plus forte sollicitation des forces de frottement pendant le cisaillement pour les particules de plus en plus non convexes probablement en raison de l'effet d'engrenage entre particules. La saturation de I_f^* indique une corrélation avec l'angle de frottement interne.

Les figures 3.17 et 3.18 montrent les cartes de mobilisation des forces de frottement pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,4$, dans l'état critique. Les disques situés aux points de contact entre les agrégats ont un rayon proportionnel au rapport $|f_t|/\mu_s f_n$. Les disques les plus gros correspondent aux contacts critiques où un glissement est possible. On observe que les disques sont plus nombreux et plus gros dans l'échantillon d'agrégats par rapport à l'échantillon de référence ($\eta = 0$). Par ailleurs, on voit par une inspection visuelle, pour l'échantillon $\eta = 0,4$, que les disques les plus gros ont une tendance à se regrouper souvent sous la forme d'amas, ce qui peut être une signature de mouvements d'ensemble des agrégats enchevêtrés.



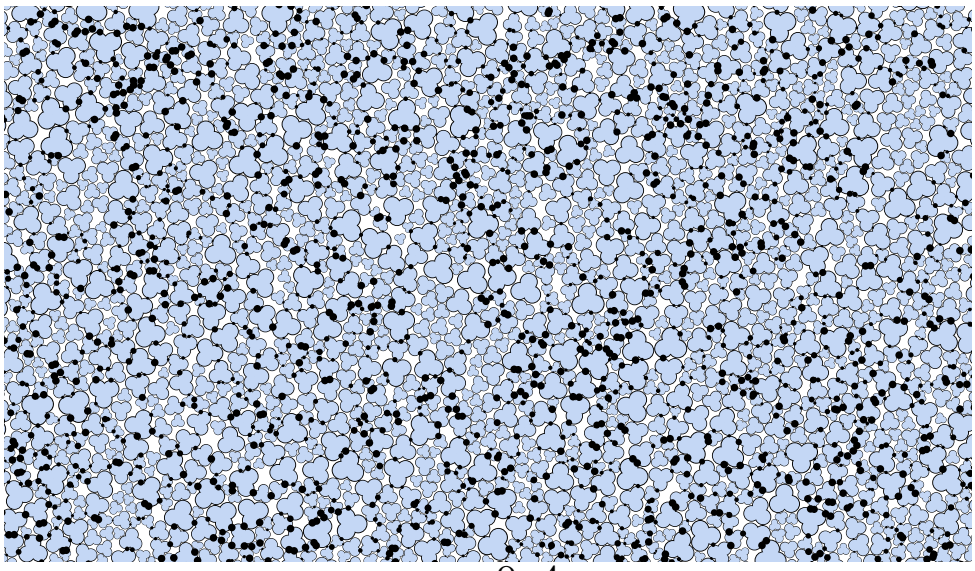
$\eta = 0$

FIGURE 3.17 – *Une carte de la mobilisation du frottement aux contacts entre particules pour $\eta = 0$. Le rayon du disque placé au point de contact entre deux particules est proportionnel à la mobilisation de la force de frottement $|f_t|/\mu_s f_n$.*

La figure 3.19 montre la proportion S^* des contacts critiques moyennée dans l'état critique en fonction de η. S^* suit la même tendance que I_f^*, une augmentation puis un effet de saturation. Elle varie d'environ $0,13$ pour $\eta = 0$ à environ $0,28$ pour $\eta = 0,5$. Il se trouve que la fraction des contacts critiques varie suivant le type de contact comme on peut le voir sur la figure 3.20. Une faible fraction de contacts T et D est critique alors que la proportion de contacts DS critiques augmente considérablement au détriment des contacts simples. Par conséquent, contrairement à S_D^* qui est bien inférieur à S_{DS}^*, la proportion K_D^* des contacts doubles augmente plus rapidement que la proportion K_{DS}^* des contacts double-simples.

Cette différence entre les rôles joués par les contacts D et DS est la meilleure preuve de l'effet d'engrenage entre les agrégats qui conduit à geler le mouvement relatif et le glissement au niveau des contacts D et T. Par conséquent, la dissipation par frottement est localisée de façon préférentielle aux contacts S et DS. Cet effet d'enchevêtrement renforcé aux contacts D et T est similaire à l'effet de la cohésion : les agrégats liés par un contact D ou T tendent à se mouvoir ensemble sous la forme d'amas rigides, ce qui entraîne une dilatance plus importante

et donc des compacités plus faibles.



$\eta = 0,4$

FIGURE *3.18* – *Une carte de la mobilisation du frottement aux contacts entre particules pour* $\eta = 0,4$. *Le rayon du disque placé au point de contact entre deux particules est proportionnel à la mobilisation de la force de frottement* $|f_t|/\mu_s f_n$.

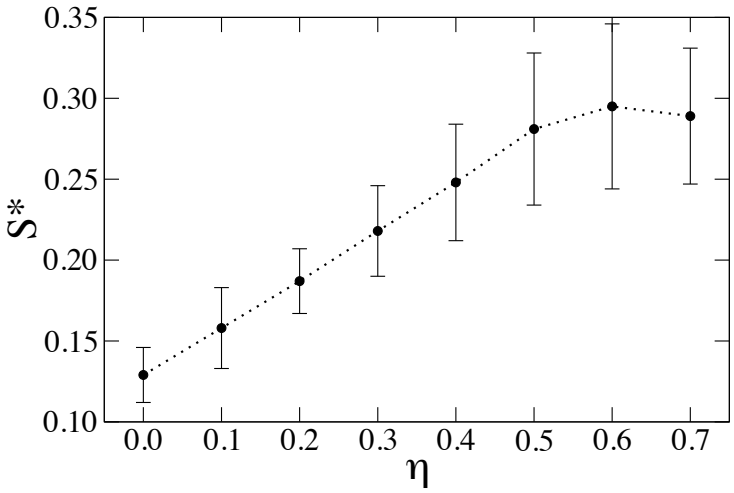


FIGURE *3.19* – *Proportion des contacts critiques en fonction de la non-convexité dans l'état critique. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne.*

3.6.2 Anisotropie des forces de frottement

En raison de l'équilibre des moments des forces sur chaque particule, la force de frottement est en moyenne nulle dans un matériau granulaire. Mais la force de frottement moyenne $\langle f_t \rangle(\theta)$

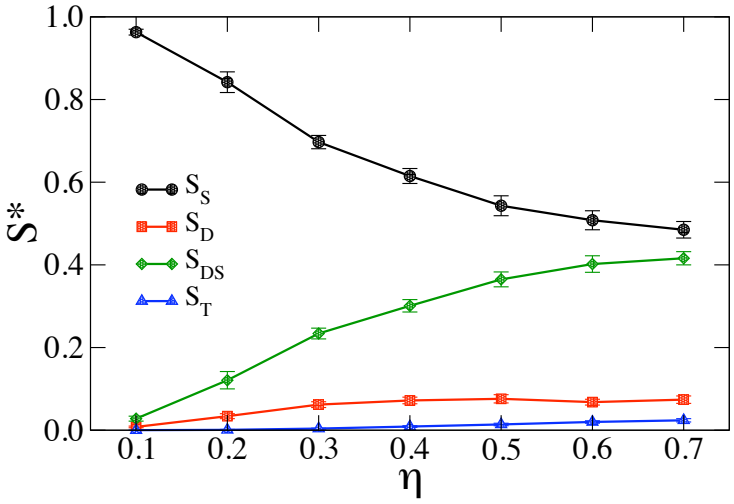


FIGURE 3.20 – *Proportion des contacts critiques de différents types dans l'état critique en fonction de la non-convexité. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des fluctuations autour de la valeur moyenne.*

pour une direction donnée θ des contacts n'est pas nécessairement nulle. Comme pour les forces normales, le développement de Fourier à l'ordre 2 ajuste très bien les données pour toutes les valeurs de η. La figure 3.21 montre la fonction $\langle f_t \rangle(\theta)$ à l'état critique pour les échantillons $\eta = 0, \eta = 0,3$ et $\eta = 0,5$ ainsi qu'une approximation de Fourier de ces fonctions à l'ordre 2 :

$$\langle f_t \rangle(\theta) = \langle f_n \rangle \, a_{f_t} \sin 2(\theta - \theta_t) \tag{3.18}$$

où a_{f_t} représente l'anisotropie des forces tangentielles et θ_t est la direction privilégiée de la mobilisation du frottement. Cette direction sur la figure 3.21 est $\pi/2$ de telle sorte que le maximum est atteint pour $\theta = \pi/4$.

La normalisation par $\langle f_n \rangle$ est imposée par le fait que $\langle f_t \rangle$=0. Cette condition implique

$$0 = \langle f_t \rangle = \int_0^{\pi} \langle f_t \rangle(\theta) P(\theta) \, d\theta. \tag{3.19}$$

Ceci signifie que les fonctions $\langle f_t \rangle(\theta)$ et $P(\theta)$ sont orthonormales, ce qui implique $\theta_t - \theta_c = \pi/4$. Remarquons aussi que le rapport $\langle f_t \rangle(\theta)/\langle f_n \rangle$ peut être considéré comme une autre façon d'exprimer la mobilisation directionnelle du frottement. D'après (3.18), ce rapport est égal à $a_{f_t} \sin 2(\theta - \theta_t)$ dont la valeur maximale est a_{f_t}. Ainsi, l'anisotropie des forces tangentielles correspond à la mobilisation du frottement. Cette mobilisation est simplement modulée par une fonction sinusoïdale en fonction de la direction des contacts.

Pour évaluer a_{f_t}, on introduit un tenseur d'ordre 2 $\underline{\chi}^t$, défini par

$$\chi^t_{\alpha\beta} = \frac{1}{\langle f \rangle} \sum_{c=1}^{N_c} f_t t^c_\alpha n^c_\beta = \frac{1}{\langle f \rangle} \langle f_t t_\alpha n_\beta \rangle_V \equiv \frac{1}{\langle f \rangle} \int_0^{\pi} \langle f_t \rangle(\theta) t_\alpha(\theta) n_\beta(\theta) P(\theta) d\theta \tag{3.20}$$

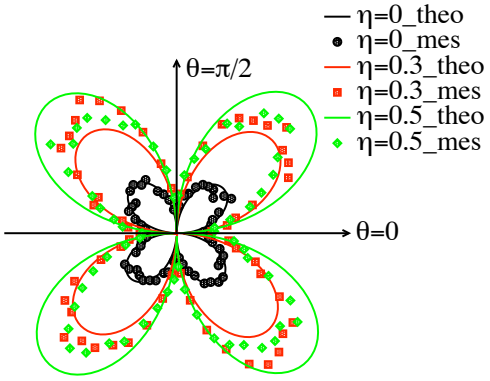


FIGURE 3.21 – *La force de frottement moyenne en fonction de l'orientation θ des contacts dans l'état critique pour $\eta = 0$, $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,5$ en représentation polaire. Les courbes en trait plein correspondent à un développement de Fourier à l'ordre 2.*

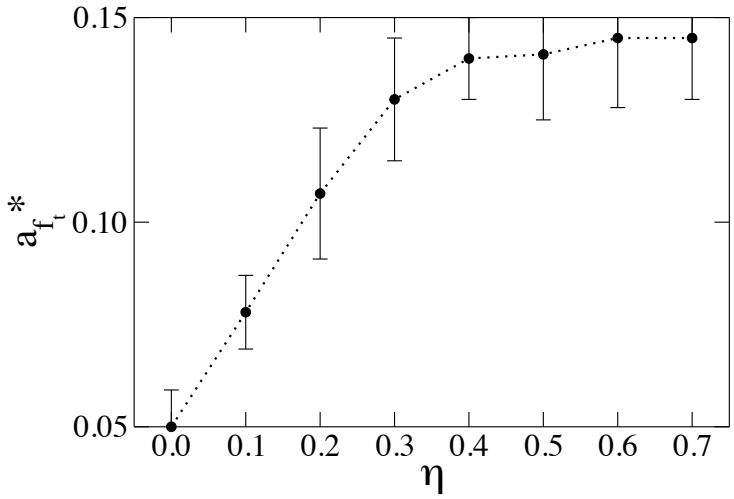


FIGURE 3.22 – *Evolution de l'anisotropie des forces tangentielles moyennées dans l'état résiduel $a^*_{f_t}$ en fonction de η. Les barres d'erreurs représentent les fluctuations autour de la valeur moyenne dans l'état résiduel.*

En posant que $\underline{\boldsymbol{\chi}} = \underline{\boldsymbol{\chi}}^n + \underline{\boldsymbol{\chi}}^t$, il est facile de montrer la relation

$$2\frac{\chi_1 - \chi_2}{\chi_1 + \chi_2} = a_c + a_{f_n} + a_{f_t} \tag{3.21}$$

où χ^1 et χ^2 sont les valeurs propres de $\underline{\boldsymbol{\chi}}$.

La figure 3.22, montre l'évolution de la valeur critique $a^*_{f_t}$ en fonction de η. Comme pour la mobilisation des contacts critiques I^*_f, nous observons une augmentation linéaire de $a^*_{f_t}$ suivie de saturation à partir de $\eta = 0,4$.

3.7 Modélisation micro-mécanique

Nous allons proposer dans cette section une modélisation micro-mécanique du comportement observé de la résistance au cisaillement et de la compacité en fonction de la non-convexité des particules. Cette modélisation micro-mécanique permet de comprendre ces comportements à caractère macroscopique à partir des propriétés statistiques du réseau des contacts et de la distribution des volumes des pores.

3.7.1 Origines de la résistance au cisaillement

Nous avons caractérisé la microstructure des empilements dans l'état critique, en quantifiant par des outils statistiques la géométrie du réseau de contacts et de forces de contact. Les figures 3.11, 3.15 et 3.22 montrent clairement que le déviateur des contraintes s'accompagne du développement d'une anisotropie dans l'orientation des contacts et dans la distribution angulaire des forces de contact.

Cette corrélation peut être mise en évidence sur une base solide en considérant l'expression du tenseur des contraintes (3.3) écrite sous la forme intégrale et en utilisant les développements de Fourier des fonctions $P(\theta)$, $\langle f_n \rangle(\theta)$ et $\langle f_t \rangle(\theta)$ [93]. En faisant l'hypothèse que les forces et les tailles des particules ne sont pas corrélées et en négligeant les produits des anisotropies, l'expression suivante est établie :

$$\sin\varphi^* = \frac{q^*}{p} \simeq \frac{1}{2}(a^*_c + a^*_{f_n} + a^*_{f_t}). \tag{3.22}$$

Cette expression est très bien vérifiée pour les systèmes composés de disques, de particules polyédriques en 3D, des particules polygonales en 2D et pour des systèmes à forte polydispersité de taille. Elle suggère que l'angle de frottement interne résulte du potentiel du système à développer une structure anisotrope ou une transmission anisotrope des forces. Ainsi, lorsque cette relation fonctionne, l'origine de la résistance au cisaillement doit être recherché en considérant ces anisotropies en fonction des paramètres du système. Dans notre cas, ce paramètre est la non-convexité η.

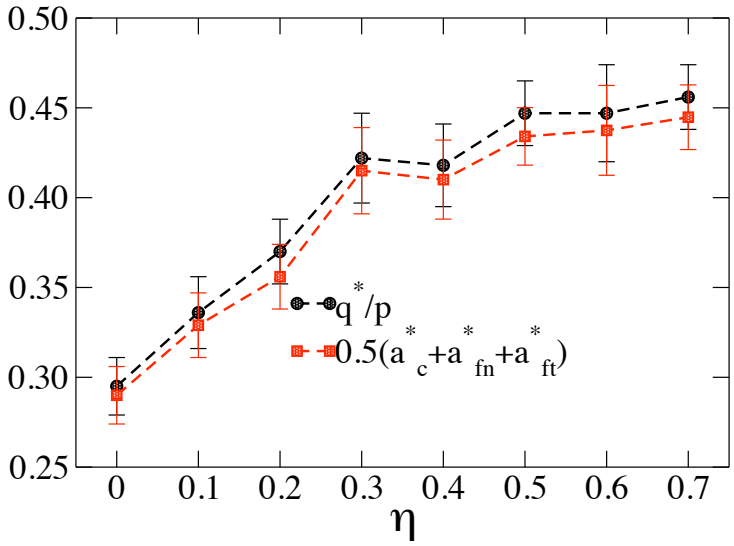


FIGURE 3.23 – *Déviateur de contrainte normalisé q*/p en fonction de η et approximation harmonique donnée par l'équation (3.22). Les barres d'erreurs représentent l'écart type autour de la valeur moyenne.*

La figure 3.23, montre l'évolution de q^*/p en fonction de η ainsi que l'approximation $0,5(a_c^* + a_{f_n}^* + a_{f_t}^*)$ en fonction de η dans l'état critique. Les valeurs des anisotropies sont évaluées à partir des données. On voit que cette approximation est excellente quelle que soit η. Ainsi, l'augmentation et la saturation de q^*/p reflète directement le comportement similaire des trois paramètres d'anisotropie. Comme $a_{f_t}^* < a_{f_n}^* < a_c^*$, l'essentiel de la résistance au cisaillement dans un empilement constitué des particules non convexes provient de l'anisotropie des contacts (texture) et les anisotropies des forces normales (formation des chaînes de force) et des forces de frottement (mobilisation du frottement) viennent en deuxième et en troisième.

3.7.2 Un modèle pour la compacité

Nous avons vu que l'évolution de la compacité en fonction de η est non monotone. Ce résultat n'est pas trivial dans la mesure où, en raison de l'augmentation du degré de non-convexité des particules, on s'attend à ce que la compacité des empilements diminue par enchevêtrements entre agrégats. Pour comprendre l'augmentation de la compacité à partir de la compacité à $\eta = 0$, il est nécessaire de considérer les différentes populations de pores entre agrégats dont un exemple est représenté sur la figure 3.24 pour $\eta = 0,5$. Dans cette section, nous présentons un modèle relativement simple qui permet d'approcher la variation de la compacité dans les états isotrope et cisaillé.

Ce modèle est basé sur la distinction entre deux catégories de pores, comme illustré sur la figure 3.25 : 1) les pores *type I* formés avec uniquement les parties convexes des agrégats et 2) les pores *type II* impliquant au moins une partie non convexe du contour des agrégats.

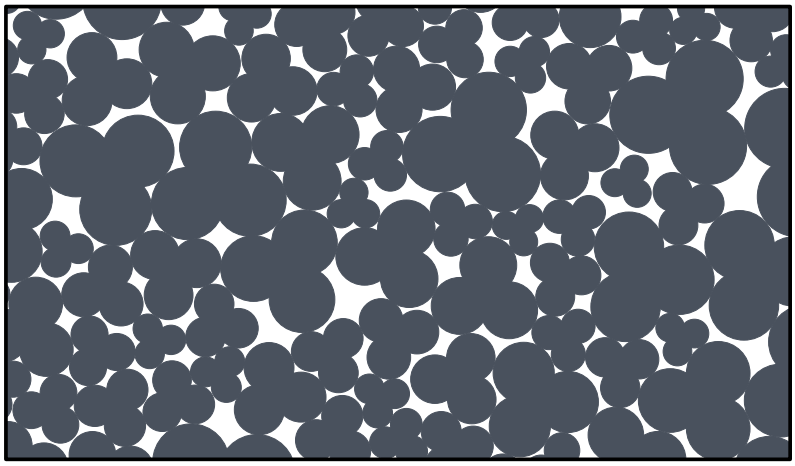


FIGURE ***3.24*** **–** *Visualisation de la structure des pores pour l'échantillon* $\eta = 0,5$ *dans l'état initial.*

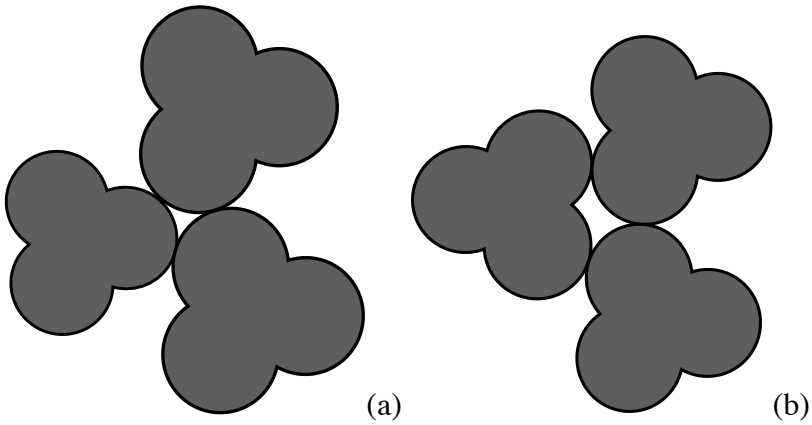


FIGURE ***3.25*** **–** *Pores de type I (a), formés entre des parties convexes des agrégats, de type II (b), impliquant des parties non-convexes.*

A $R = 1$ fixé, c'est-à-dire pour des agrégats tous contenus dans le même cercle circonscrit, le rayon r des disques diminue lorsque η augmente. Par conséquent, le volume des pores de type II diminue comme r^2 et cet effet contribue à un gain de compacité. Au contraire, les pores de type II incorporent des volumes de plus en plus importants de vide dus aux frontières non convexes des agrégats et qui ne peuvent pas être comblés par simple rapprochement entre particules. Le modèle permet de formaliser cette idée et de proposer une expression phénoménologique de la variation de la compacité en fonction de η.

Pour construire ce modèle, nous considérons deux grandeurs volumiques :

1. V_p, le volume moyen d'un agrégat normalisé par le volume πR^2 du cercle circonscrit,
2. V_f, le volume libre moyen par agrégat défini comme étant le volume moyen des pores par agrégat.

Nous supposons que la compacité est distribuée de manière homogène dans les échantillons de telle sorte que les hétérogénéités mésoscopiques liées à la présence des bandes de cisaillement ou parois rigides ne sont pas considérées. En réalité, comme on le verra au chapitre 4 la variabilité de compacité en présence de telles hétérogénéités est globalement plus faible que la variation de la compacité avec la non-convexité des agrégats.

La compacité est par $\rho = V_p/(V_p+V_f)$ et l'indice des vides par $e = V_f/V_p$. La normalisation par πR^2 implique que $V_p = 1$ lorsque $\eta = 0$. Par construction, lorsque η augmente, V_p décroît. Par suite, on peut définir la quantité $1 - V_p$ comme étant la porosité propre de chaque particule (voir figure 3.26) et $V_f - (1 - V_p)$ correspond à la porosité résiduelle de l'espace interstitiel situé entre trois agrégats ou plus.

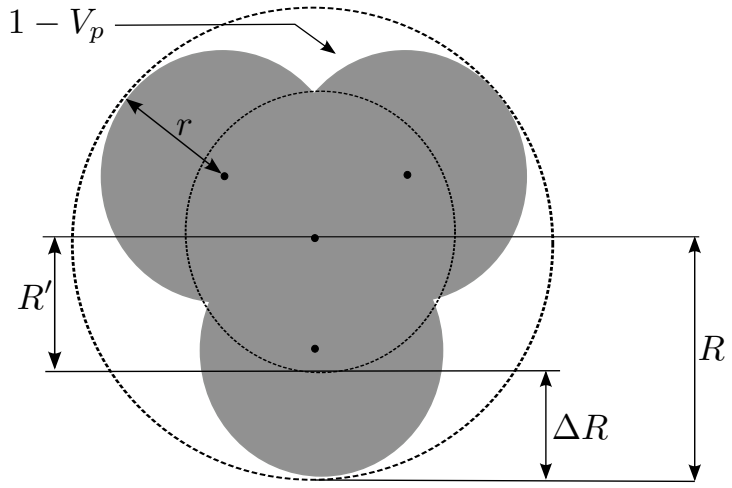


FIGURE 3.26 – *Porosité propre $1 - V_p$ d'un agrégat.*

On peut exprimer le volume V_p de chaque agrégat en fonction de sa géométrie par l'expression (2.3). En ce qui concerne le volume libre V_f, il peut être exprimé en fonction de η par la somme de quatre contributions

$$V_f(\eta) = V_f(0) + \Delta V_f^{(1)}(\eta) - \Delta V_f^{(2)}(\eta) - \Delta V_f^{(3)}(\eta), \tag{3.23}$$

où $V_f(0)$ désigne le volume libre lorsque $\eta = 0$. $\Delta V_f^{(1)}$ correspond à un gain de volume libre par l'augmentation de la porosité propre avec η. On a

$$\Delta V_f^{(1)} = 1 - V_p. \tag{3.24}$$

Le terme $\Delta V_f^{(2)}$ traduit la perte de volume libre en raison de l'enchevêtrement des particules, ce qui implique un chevauchement entre leur porosités propres. La distance entre les agrégats est réduite lorsque l'espace libre dû à la non-convexité d'une particule est partiellement rempli par la partie convexe d'un agrégat voisin, comme le montre la figure 3.27. En première approximation, nous supposons que $\Delta V_f^{(2)}$ varie proportionnellement à la porosité propre

$$\Delta V_f^{(2)} = f(\eta)(1 - V_p), \tag{3.25}$$

où $f(\eta)$ est une fonction de η désignant le taux de remplissage. Le changement de volume effectif dû aux deux premiers termes de l'équation 3.23 est donné par $\Delta V_f^{(1)} - \Delta V_f^{(2)} = \{1 - f(\eta)\}(1 - V_p)$. Il est toujours positif puisque le volume libre augmente en raison des exclusions stériques. La configuration enchevêtrée des agrégats ne compense jamais intégralement l'augmentation de la porosité propre lorsque η évolue. En d'autres termes, l'excès de volume libre créé par l'augmentation de la profondeur de concavité des particules ne peut être rempli par la parties convexes des agrégats voisins, comme le schématise la figure 3.27.

Pour cette raison, la variation de la taille des pores résultant de l'évolution de la porosité propre et de l'enchevêtrement des particules n'explique pas l'augmentation de ρ lorsque η se situe entre $[0; 0,2]$. On s'attend à ce que $f(\eta)$ soit une fonction décroissante de η en raison de la diminution du remplissage du creux formé par la non-convexité des particules qui s'accentue avec η. Nous allons simplement poser que $f(\eta)$ est une fonction linéaire décroissante de η :

$$f(\eta) = \alpha(1 - \gamma\,\eta) \tag{3.26}$$

où γ traduit le taux du phénomène.

Le dernier terme $\Delta V_f^{(3)}$ de la relation 3.23 représente la variation du volume libre due à l'évolution de la taille des pores formés uniquement des bords convexes des agrégats ; voir figure 3.25(a). Le rayon de courbure correspondant au rayon r des disques qui constituent les agrégats diminue lorsque le rayon du cercle circonscrit aux agrégats est fixe $R = 1$. Par conséquent, le volume des pores formés entre les bords convexes de trois agrégats ou plus décroît comme $-r^2$. Dès lors, avec $r(\eta = 0) = R = 1$, nous avons

$$\Delta V_f^{(3)} = \beta(1 - r^2), \tag{3.27}$$

où β est une constante. Contrairement à $\Delta V_f^{(1)} - \Delta V_f^{(2)}$, le terme $\Delta V_f^{(3)}$ est une fonction décroissante de η, et peut donc expliquer l'augmentation de ρ pour $\eta \in [0; 0,2]$.

En insérant l'expression de V_f obtenue par l'équation (3.23) dans l'expression de ρ, et étant données les expressions (3.24), (3.25) et (3.27), nous obtenons l'expression suivante pour la

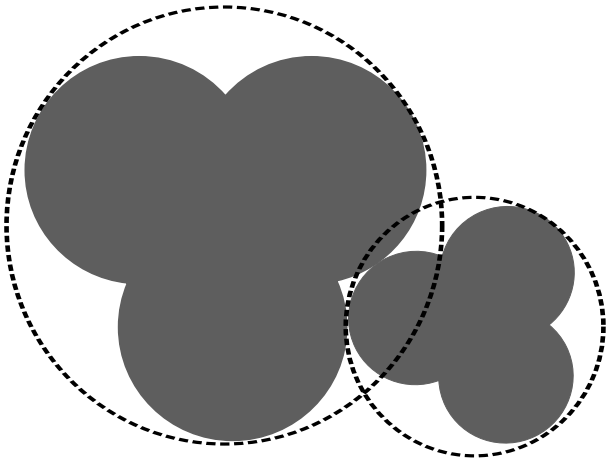


FIGURE 3.27 – *Remplissage partiel de la porosité propre de deux agrégats.*

variation de la compacité :

$$\frac{\rho(\eta)}{\rho(0)} = \frac{V_p}{1 - \alpha\rho(0)(1 - \gamma\,\eta)(1 - V_p) - \beta\rho(0)(1 - r^2)}. \tag{3.28}$$

En exprimant V_p de l'équation (2.3) et r de l'équation (2.4) en fonction de $\lambda(\eta)$ de l'équation (2.2), on a une fonction avec trois paramètres phénoménologiques α, β et γ. Comme le montre la figure 3.28, cette expression donne une excellente approximation des compacités calculées dans l'état initial et dans l'état cisaillé en ajustant ces paramètres pour la valeur maximale de ρ et pour sa valeur à $\eta = 0,7$. Dans l'état isotrope $\varepsilon_q = 0$, la meilleure approximation est obtenue pour $\alpha = 0,87$, $\beta = 0,17$ et $\gamma = 0,17$ et dans l'état cisaillé $\varepsilon_q = 0,5$ avec les valeurs $\alpha = 1$, $\beta = 0,11$ et $\gamma = 0,18$.

3.8 Extensions

Dans cette section, nous abordons brièvement deux séries d'études visant à étendre l'étude des assemblages 2D de particules non convexes. La première série porte sur une comparaison entre les comportements des assemblages d'agrégats non-convexes avec ceux d'assemblages d'autres formes (allongés, angulaires, ...) décrites par le même paramètre de forme η (mais avec chaque fois une interprétation différente de ce paramètre). La deuxième série concerne les agrégats non convexes en dimension 3 pour répondre à la question de savoir dans quelle mesure la phénoménologie observée en dimension 2 est applicable aux matériaux granulaires réels en dimension 3.

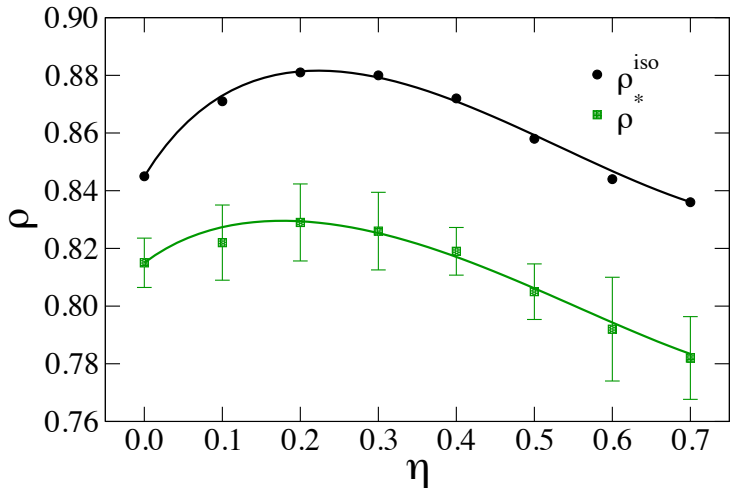


FIGURE 3.28 – *Evolution de la compacité ρ à l'état isotrope et dans l'état cisaillé ($\varepsilon_q = 0,5$) en fonction de η. Les points désignent les données issues des simulations numériques tandis que les lignes correspondent à l'expression (3.28). Les barres d'erreur représentent les écarts-types des valeurs proches de l'état critique.*

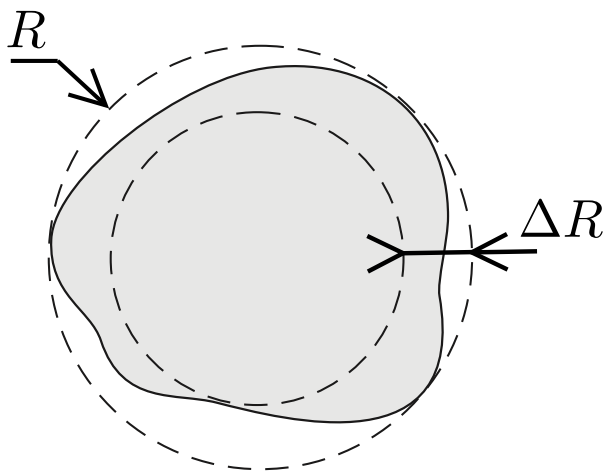


FIGURE 3.29 – *Définition générale du paramètre η.*

3.8.1 Un benchmark pour l'effet de forme

Le caractère générique du paramètre η a inspiré une étude collaborative sur l'influence de la forme des particules sur la rhéologie des matériaux granulaires au sein du réseau CEGEO (Changement d'Echelle dans les GEOmatériaux) regroupant plusieurs laboratoires (voir le site granuloscience.com/CEGEO). Pour chaque valeur de η, un "ensemble" peut être défini en considérant toutes les formes dont les bords sont confinés (en 2D) entre deux cercles concentriques de rayons $R = 1$ et $R' = 1 - \eta$; voir figure 3.29. Ce paramètre perd ici sa définition spécifique comme paramètre de non-convexité tel que nous l'avons présenté dans nos études, pour devenir un paramètre caractérisant toute déviation par rapport à une forme circulaire. Les différentes formes simulées par des membres du groupe sont présentées sur la figure 3.30. Chaque participant a réalisé une simulation de cisaillement biaxial avec des disques ($\eta = 0$) et d'autres simulations avec η variant jusqu'à $0,5$. La forme A est correspond à nos agrégats de trois cercles. Cette forme a été étudiée à la fois par la méthode de dynamique des contacts dans le cadre de cette thèse et par la méthode de dynamique moléculaire par G. Combe et K. Szarf du laboratoire 3S-R de Grenoble et noté A' pour distinguer les simulations correspondantes des notres.

La forme B est un rectangle à deux bouts arrondis (sphéro-ligne) caractérisé par son élongation qui peut s'exprimer également en fonction du paramètre η. Les simulations avec cette forme ont été effectuées par E. Azéma du LMGC par la méthode dynamique des contacts. La forme C est un hexagone régulier tronqué avec trois côtés astreints à toucher le cercle inscrit et tous les sommets astreints à rester sur le cercle circonscrit. Il faut remarquer que cette forme n'est pas définie toutes les valeurs de η. La valeur la plus petite de η pour laquelle cette forme est définie est 0,13. Cette forme a été simulée par les soins de G. Combe en utilisant la méthode de dynamique moléculaire. La forme D est un hexagone allongé irrégulier avec seulement deux côtés astreints à toucher le cercle inscrit et deux sommets astreints à appartenir au cercle circonscrit. Cette forme a fait l'objet de simulations par la méthode de dynamique des contacts par C. Nouguier du laboratoire LTDS de l'Ecole Centrale de Lyon.

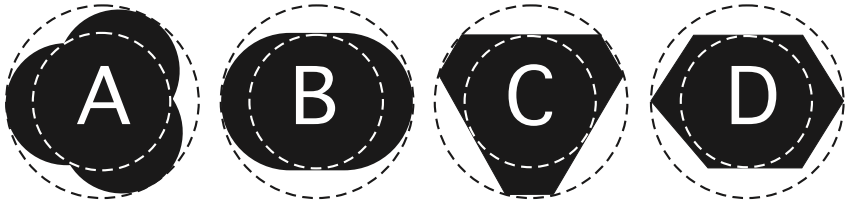


FIGURE 3.30 – *Différentes formes de particules simulées par le groupe CEGEO avec la même valeur du paramètre η.*

Pour pouvoir comparer les données issues des simulations, le benchmark définit précisément l'ensemble des paramètres numériques et physiques du problème (granulométrie, coefficient de frottement, coefficient de restitution entre particules, le nombre d'inertie I ...). Ces paramètres coïncident avec les paramètres que nous avons utilisés pour nos études présentées dans ce chapitre. Tous les échantillons ont été préparés par une compression isotrope avec un coefficient nul de frottement entre particules et ensuite soumis à une compression biaxiale. La

figure 3.31 montre une vue d'une portion de chaque échantillon dans l'état isotrope dense. Les données relatives à la connectivité des particules indiquent que cet état est pratiquement isostatique pour tous les échantillons à condition de comptabiliser chaque contact côté/côté dans le cas des formes B, C et D comme deux contacts.

La figure 3.32 représente la contrainte déviatorique normalisée q^*/p dans l'état cisaillé proche de l'état critique en fonction de η. Il est remarquable que dans la gamme des valeurs étudiées de η (entre 0 et 0,5), q^*/p augmente linéairement avec η pour toutes les formes. Le taux de variation est le même pour toutes les formes et les données coïncident pour les formes A et B, d'une part, et pour les formes C et D, d'autre part. Il faut noter que le caractère commun des formes C et D est leur angularité et ces formes présentent pour cette raison une résistance au cisaillement plus importante à une valeur donnée de η. Ce résultat suggère que le paramètre η représente un bon candidat comme paramètre de forme à l'ordre le plus bas en lien avec le comportement mécanique des empilements. Des paramètres d'ordre supérieur permettent ensuite de raffiner la description de la forme et du comportement mécanique qui en résulte.

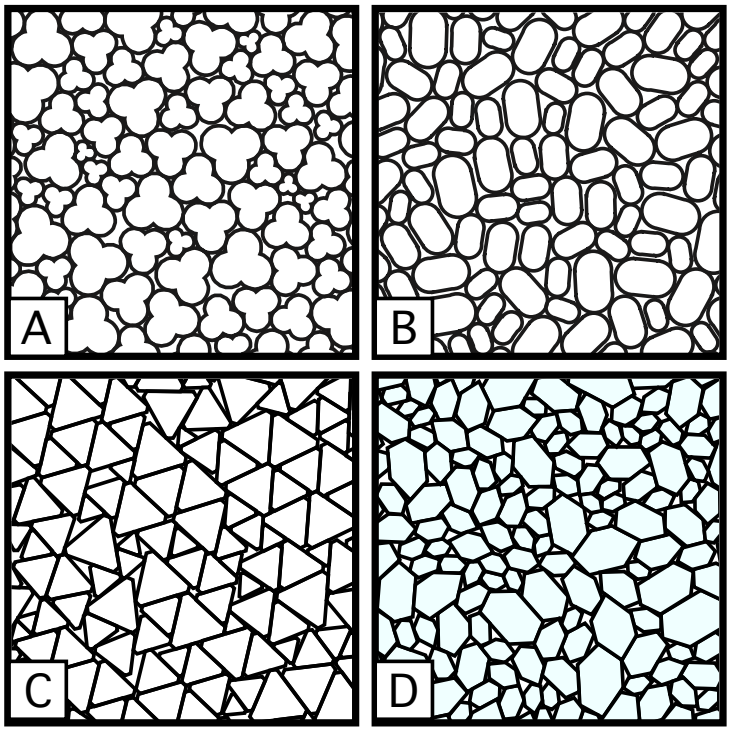


FIGURE 3.31 – *Exemples d'assemblages simulés avec différentes formes de particules dans le cadre du benchmark d'effet de forme du CEGEO.*

La figure 3.33 montre la compacité ρ^{iso} en fonction de η pour toutes les formes dans l'état isotrope. Pour toutes les formes on observe la même dépendance non monotone que pour nos particules non convexes. C'est un résultat d'autant plus marquant qu'il souligne que ce comportement non monotone est une propriété générique des matériaux granulaires et le paramètre η apparaît encore une fois ici comme un paramètre pertinent pour comparer les différentes formes pour leur effet sur la compacité. Ce résultat suggère également que le modèle présenté dans

la section précédente peut éventuellement s'appliquer à toutes ces formes. Ce point et d'autres aspects du comportement ont été étudié ou sont en cours d'étude dans le cadre du groupe collaboratif CEGEO, mais ils ne seront pas présentés dans ce manuscrit qui traite plus spécifiquement des formes non convexes.

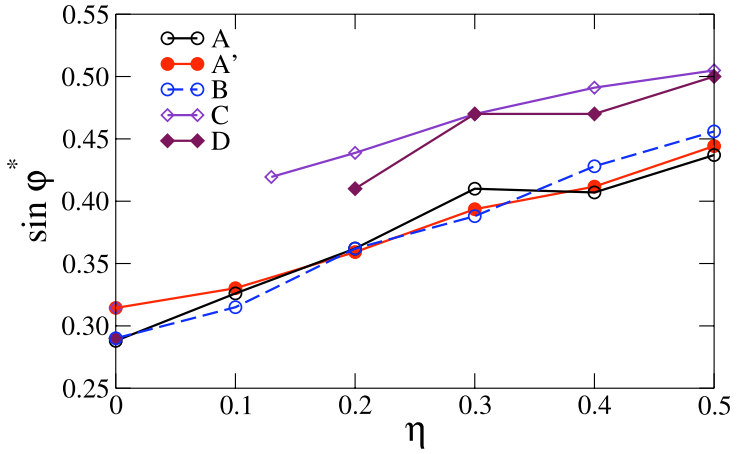


FIGURE *3.32* – *La contrainte déviatorique normalisée $q/p = \sin\varphi^*$ dans l'état cisaillé en fonction du paramètre η.*

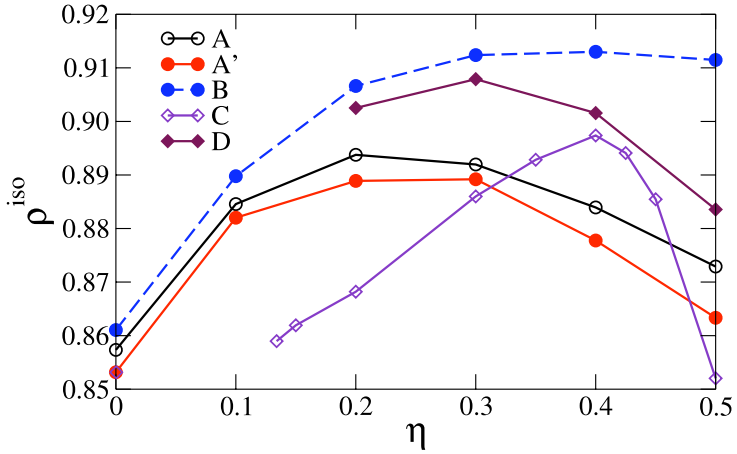


FIGURE *3.33* – *Compacité de l'état isotrope en fonction de η pour les différents assemblages préparés par compression isotrope.*

3.8.2 Agrégats non convexes en dimension 3

La modélisation numérique des poudres à particules non convexes mise en œuvre dans le cadre 2D se généralise sans difficulté au cas 3D en considérant des agrégats de quatre sphères avec un recouvrement variable, comme illustré sur la figure 3.34.

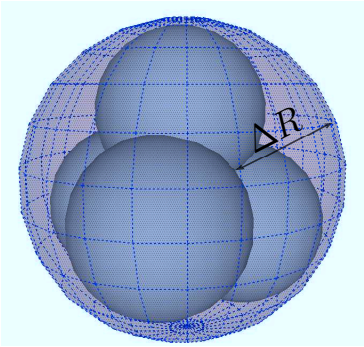


FIGURE ***3.34*** **–** *Géométrie d'un agrégat non-convexe composé de quatre sphères de même taille dont les centres se situent sur les quatre sommets d'un quadrilatère régulier.*

Nous avons opté depuis le début de focaliser les simulations sur les systèmes 2D afin de disposer de plus de temps pour les calculs en utilisant comparativement moins de particules dans les simulations et par la multiplication des études paramétriques sans et avec la cohésion. En fait, les hétérogénéités liées aux parois rigides sont déjà présents en 2D et pour les éviter dans une configuration 3D, il est nécessaire d'introduire beaucoup plus de particules. De même, pour l'analyse de la microstructure le cas 2D procure plus de facilité de traitement que le cas 3D. Néanmoins, le passage au 3D est nécessaire pour rapprocher les analyses réalisées en 2D des matériaux réels. Nous avons donc entamé en dernière année de thèse les études 3D avec l'implication forte de E. Azéma de l'équipe PMMG du LMGC. Les travaux concernant la compression triaxiale des assemblages 3D sont terminés. Nous allons brièvement présenté ici les analyses d'ordre macroscopique essentiellement dans le but de montrer l'applicabilité des analyses 2D au cas 3D.

Les simulations 3D ont été réalisées par la méthode de dynamique des contacts sur la plateforme logicielle LMGC90, qui est un code pluri-fonctionnel pour la simulation numérique des systèmes discrets (voir le site www.lmgc.univ-montp2.fr/ dubois/LMGC90). Les échantillons comportent 12000 agrégats (soit 48000 sphères) compactés initialement par une contrainte isotrope sans frottement et soumis ensuite à une compression triaxiale. Les paramètres utilisés sont les mêmes que dans les simulations 2D. La figure 3.35 montre une vue d'un échantillon isotrope d'agrégats avec $\eta = 0,5$.

Les figures 3.36 et 3.37 montrent respectivement l'évolution de la contrainte déviatorique normalisée et de la compacité en fonction du cisaillement cumulé pour différentes valeurs de η. Les tendances sont les mêmes qu'en 2D avec un pic de contrainte atteint très vite au début du cisaillement et une dilatance continue. L'état critique est très bien défini, on le voit au caractère stationnaire de la contrainte de cisaillement et de la compacité en fonction de la déformation de cisaillement.

La figure 3.38 présente la contrainte déviatorique normalisée et l'angle de frottement interne correspondant $\sin\varphi = 3q/(q+2p)$ en fonction de η dans l'état critique. La résistance au cisaillement augmente d'une manière assez similaire au cas 2D avec une augmentation quasi-

linéaire et une tendance à saturer à partir de $\eta = 0,5$. L'angle de frottement interne pour toutes les valeurs de η est légèrement supérieur par rapport au cas 2D.

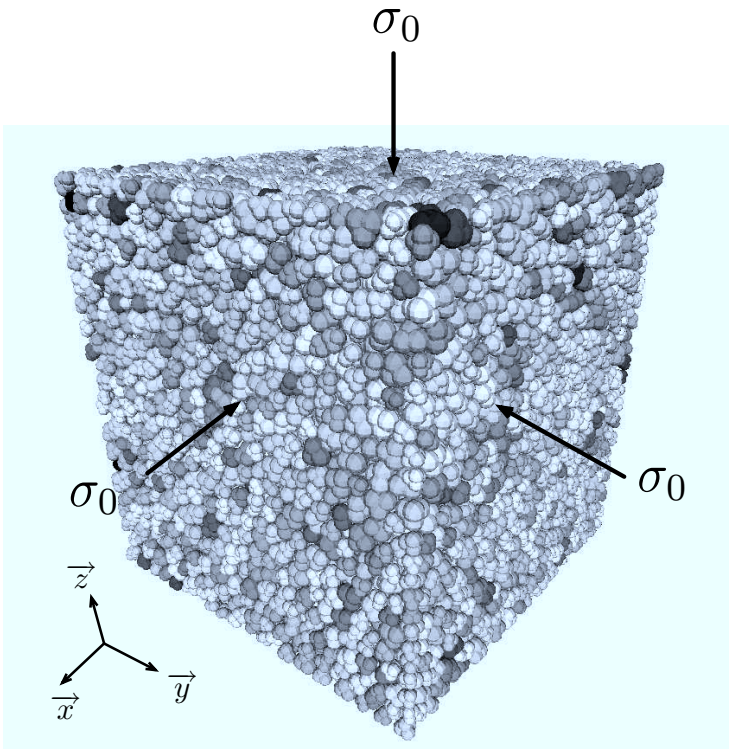


FIGURE 3.35 – *Un échantillon de 12000 agrégats non convexes soumis à une compression isotrope. Le niveau de gris est proportionnel à la contrainte moyenne sur les agrégats.*

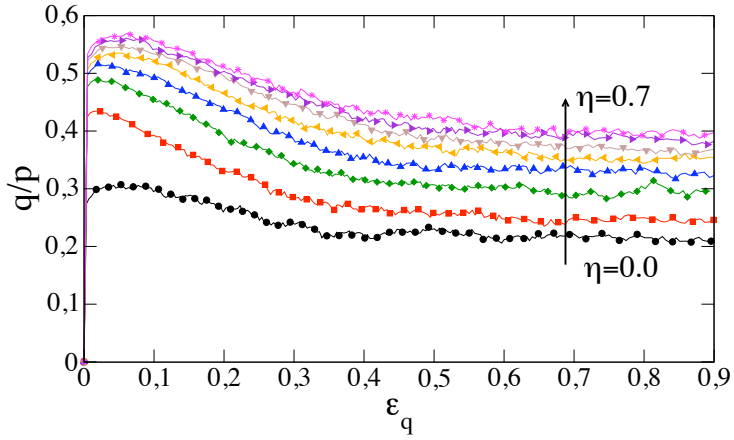


FIGURE 3.36 – *La contrainte déviatorique normalisée en fonction de la déformation de cisaillement cumulée des échantillons 3D pour différentes valeurs de η.*

Les compacités dans les états isotrope et critique sont présentées sur la figure 3.39 en fonction de η. Dans ces résultats 3D, il est intéressant d'observer la même dépendance non monotone

par rapport à η qu'en 2D. La valeur la plus élevée de ρ^{iso} est atteinte pour $\eta \simeq 0,3$. La compacité pour cet échantillon est presque 0,7, une valeur très proche de la compacité 0,74 d'une structure hexagonale compact de sphères de même taille. Par contre, pour des valeurs élevées de η, la compacité tend vers une valeur de 0,64. Ces résultats 3D sont très rassurants en ce qui concerne la pertinence des simulations 2D pour la compréhension du comportement des poudres. Les résultats préliminaires indiquent que les contacts doubles et triples dominent largement en 3D bien que d'autres types de contacts multiples soient possibles entre agrégats.

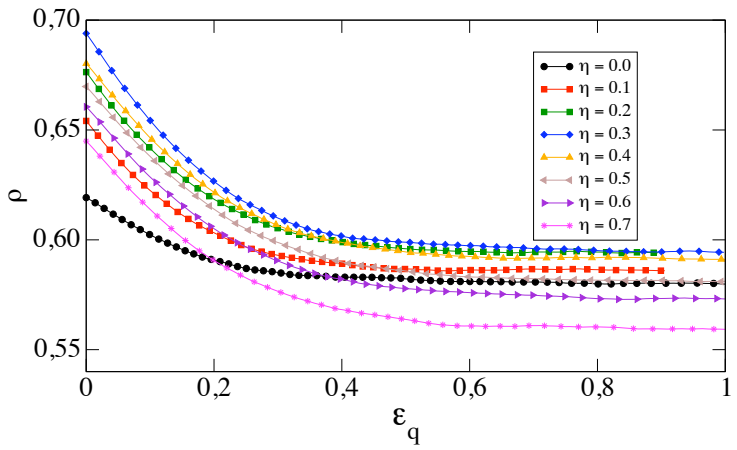


FIGURE 3.37 – *La compacité en fonction de la déformation de cisaillement cumulée des échantillons 3D pour différentes valeurs de η.*

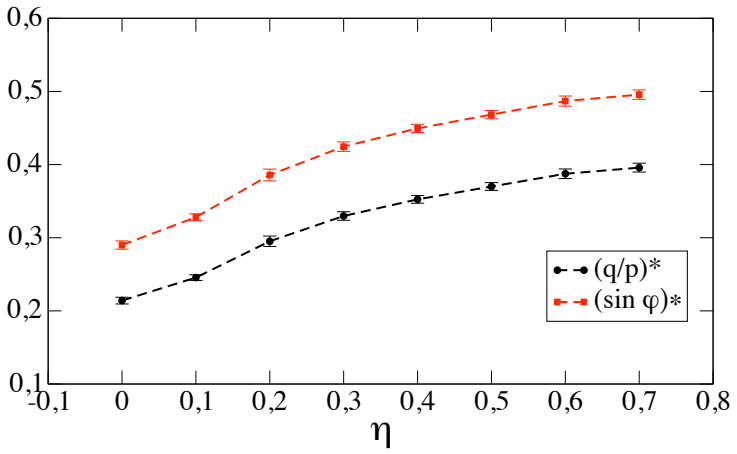


FIGURE 3.38 – *La contrainte déviatorique normalisée q^*/p et l'angle de frottement interne φ^* à l'état critique en fonction de la non-convexité des agrégats 3D.*

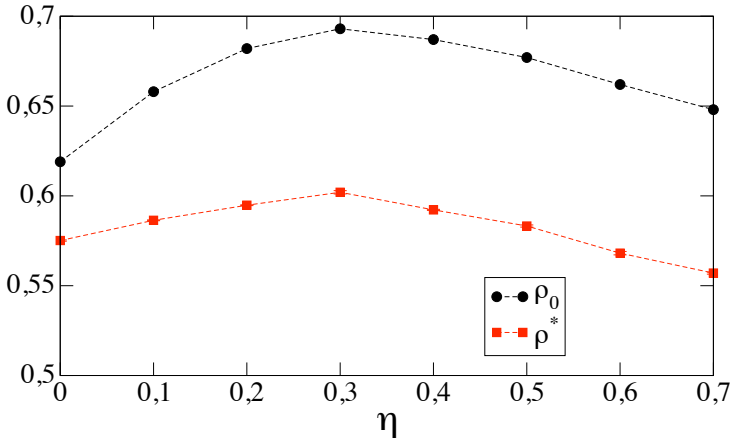


FIGURE 3.39 – *Les compacités ρ_0 et ρ^* respectivement dans les états isotropes et cisaillés en fonction de la non-convexité.*

3.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la rhéologie quasi-statique et la microstructure de systèmes constitués d'agrégats non convexes en l'absence de cohésion à l'aide des simulations numériques d'essais de compression biaxiale menées par la méthode de dynamique des contacts. Nous avons montré que la non-convexité contribuait à augmenter la résistance au cisaillement des empilements dans l'état critique. L'évolution non monotone de la compacité en fonction de la non-convexité apparaît comme une propriété robuste qui se conserve tout au long de la déformation de cisaillement. La compacité maximale est atteinte pour un degré de non-convexité intermédiaire. Ces propriétés résultant de l'effet de forme ont été étudiées également par une étude comparative entre différentes formes et par des simulations 3D. Ces études montrent clairement la robustesse des tendances observées et la pertinence du paramètre utilisé pour caractériser le caractère non convexe des particules.

L'étude de la microstructure nous a montré que, contrairement à ce que l'on pourrait penser, l'augmentation du degré de non-convexité ne contribue pas à mobiliser de manière croissante le frottement de glissement dans l'état critique. En effet, des indicateurs tels que la mobilisation du frottement et la proportion des contacts critiques augmentent avec le degré de non-convexité, puis saturent. Ces résultats ont été confirmés par la tendance des paramètres d'anisotropie dans l'état résiduel en fonction de η. Enfin, nous avons montré que l'augmentation de l'angle de frottement interne est due à l'aptitude pour les particules de plus en plus non convexes à développer un réseau stable anisotrope avec des paramètres d'anisotropie qui décrivent le réseau de contact, les chaînes de force et la mobilisation du frottement.

Dans le chapitre suivant, nous allons considérer un autre paramètre de résistance au cisaillement dans les matériaux granulaires : la cohésion.

CHAPITRE 4

Cohésion et rupture

Sommaire

4.1 Introduction **110**
4.2 Comportement macroscopique en cisaillement **110**
4.2.1 Tenue mécanique 110
4.2.2 Compacité et variation de volume 115
4.3 Compacités locales **119**
4.3.1 Outils d'analyse 119
4.3.2 Systèmes non-cohésifs 122
4.3.3 Systèmes cohésifs 123
4.4 Texture cohésive et efforts de contact **126**
4.5 Compression œdométrique **134**
4.5.1 Comportement macroscopique 134
4.5.2 Microstructure 136
4.5.3 Etat de compacité hétérogène 138
4.6 Compression uniaxiale **140**
4.7 Conclusion **148**

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude de la résistance au cisaillement, la compaction et la rupture des systèmes composés d'agrégats non convexes en tenant compte de la cohésion entre agrégats. Nous avons caractérisé dans le chapitre précédent la résistance au cisaillement en considérant l'angle de frottement interne φ en fonction du degré de non-convexité. Dans ce chapitre, il s'agit de mettre en évidence l'influence de la non-convexité des agrégats sur la cohésion de Coulomb c, qui constitue une propriété mécanique majeure des poudres fines. Comme dans le chapitre 3, nous allons aussi étudier la microstructure au travers de l'évolution de la texture et du réseau de force. Une conséquence de l'adhésion entre particules est la localisation des déformations plastiques pour des temps de cisaillement long sous la forme de bandes d'épaisseur importante. Nous allons donc consacrer une section à l'étude de ces hétérogénéités au sein de différents échantillons par une analyse des compacités locales. Une section sera dédiée à une discussion de l'effet de ces hétérogénéités sur l'évaluation de la cohésion à différents instants d'évolution du système. Nous allons ensuite considérer la loi de compaction d'empilements cohésifs dans des conditions de chargement uniaxial ainsi que leur tenue mécanique en l'absence de confinement.

4.2 Comportement macroscopique en cisaillement

Nous considérons ici le comportement mécanique des différents assemblages par le biais d'essais numériques de compression biaxiale.

4.2.1 Tenue mécanique

Nous avons vu au chapitre 1, que la résistance mécanique au cisaillement des empilements granulaires peut être évaluée par le critère de Mohr-Coulomb. En présence de cohésion, ce critère représenté par la droite d'équation $q = p \sin\varphi + c\cos\varphi$, appelée enveloppe de Mohr-Coulomb dans l'espace (p, q) des contraintes hydrostatique et déviatorique, permet d'évaluer la cohésion macroscopique c et l'angle de frottement interne φ des empilements.

Afin d'évaluer ces deux paramètres de résistance mécanique, nous avons réalisé trois essais de compression biaxiale avec trois pressions de confinement différentes pour chacun des échantillons caractérisé par le degré de non-convexité de leurs agrégats. Ces trois essais ont permis de récupérer trois couples de points (p, q). Pour chaque échantillon, les trois essais ont été réalisés à partir des mêmes états initiaux isostatiques caractérisés au chapitre 2. Les conditions aux limites de vitesse de déformation verticale imposée et de contrainte de confinement latéral sont identiques pour chaque série d'empilements caractérisé par η. Enfin, dans toutes les séries, le seuil de cohésion $-f_c$ est identique afin de focaliser l'étude sur l'effet de la forme des agrégats. Etant donnée l'indéformabilité des particules, la valeur absolue de ce seuil n'est pas importante.

C'est plutôt le rapport

$$c_e = \frac{f_c}{pd} \tag{4.1}$$

qui détermine le comportement dans la mesure où pd représente l'ordre de grandeur de la force compressive moyenne qui agit sur les particules. Le rapport f_c/pd donne l'ordre de grandeur de la cohésion c, même si la valeur exacte de celle-ci dépend de l'arrangement spatial et varie avec l'état mécanique du système. Mais, comme nous n'avons généralement pas accès directement à la valeur de c, il est plus commode d'employer c_e qui caractérise la *cohésion effective* du système.

La figure 4.1 montre q/p en fonction de ε_q pour une valeur fixée de la pression de confinement $\sigma_{xx} = 7,5$ MPa. La cohésion effective c_e pour ces simulations est 2,66. Ces courbes présentent une évolution identique à celles obtenues avec des échantillons non-cohésifs. La valeur élevée de la contrainte déviatorique normalisée q/p est liée à l'état de compacité maximale des empilements initiaux. Comme dans le cas du cisaillement des empilements non-cohésifs, elle tend vers un état stationnaire. Le niveau de q/p qui correspond à la mobilisation du frottement interne au sens de Coulomb, lors du cisaillement est bien plus élevé pour les empilements cohésifs en comparaison aux empilements non-cohésifs (voir figure 3.1). Par exemple avec les données des figures 3.1 et 4.1, lorsque $\varepsilon_q = 0,5$, on a un rapport d'environ 1,5 entre q/p cohésif et q/p non-cohésif pour $\eta = 0$. Pour $\eta = 0,7$ nous remarquons qu'il est pratiquement identique. Ce résultat est attendu dans le sens où la cohésion contribue à l'augmentation de la surface de charge de Coulomb.

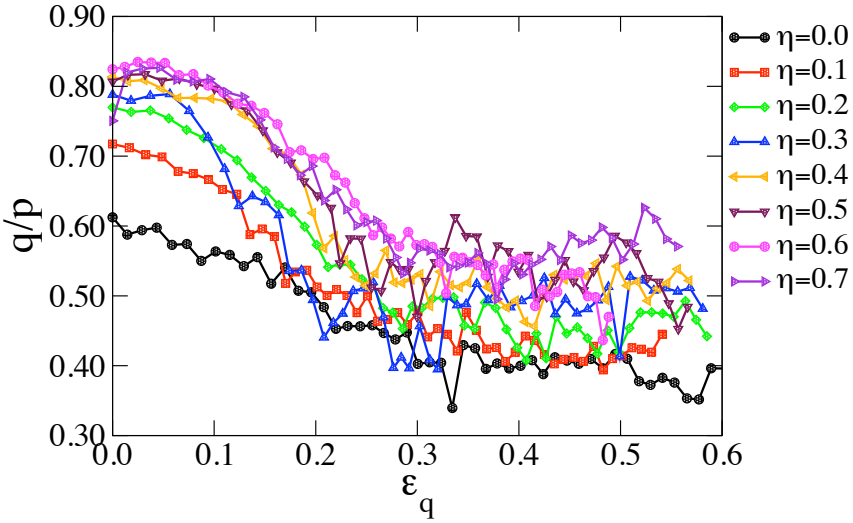


FIGURE 4.1 – *Evolution du déviateur de contrainte normalisé q/p en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour les différents degrés de non-convexité η, en présence de cohésion.*

Au cours du cisaillement l'état mécanique d'un système granulaire évolue et les valeurs du coefficient de frottement interne et de la cohésion caractérisent en toute rigueur un état mécanique donné du système. Dans le chapitre 1 nous avons caractérisé deux états de références

dans l'évolution de comportement des milieux granulaires denses, à savoir l'initiation du glissement au pic du déviateur de contrainte et l'état de plasticité complètement développé dans l'état critique. Ici aussi nous allons caractériser nos différents échantillons granulaires constitués de particules non convexes et cohésives en évaluant la cohésion macroscopique c et l'angle de frottement interne φ au pic du déviateur de contrainte et dans l'état cisaillé proche de l'état critique. Dans la suite de ce chapitre nous emploierons le terme d'état cisaillé pour désigner l'état cisaillé proche de l'état critique.

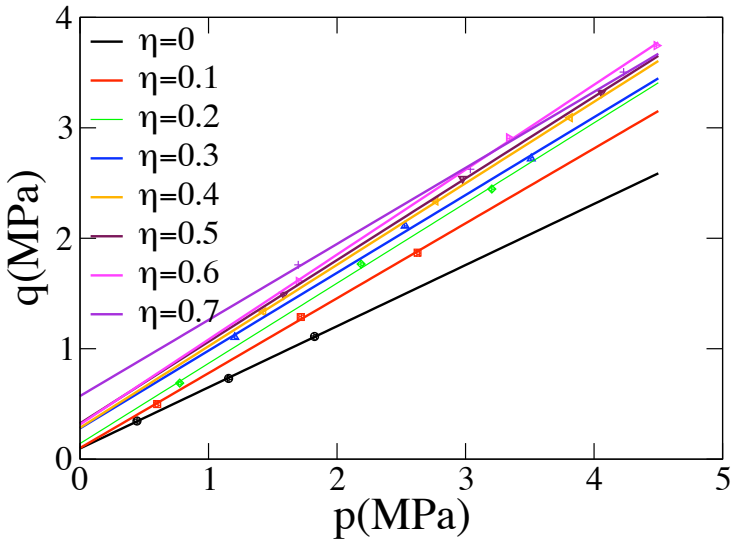


FIGURE 4.2 – *Enveloppes de Mohr-Coulomb évaluées au pic du déviateur de contrainte pour différentes valeurs de η.*

Sur la figure 4.2 sont présentées les enveloppes de Mohr-Coulomb dans l'espace (p, q) à partir de trois couples de points (p, q) évalués au pic du déviateur de contrainte pour différentes valeurs de η. La figure 4.3 montre les enveloppes tracées cette fois à partir des couples de points (p, q) moyennés dans l'état cisaillé. Les points de mesures (p, q) sont très bien approchés par les droites de tendances, les coefficients de corrélation linéaire étant de l'ordre de $\simeq 0,99$.

Les figures 4.4, 4.5 et 4.7 donnent l'évolution de la cohésion macroscopique au pic c^{pic} et dans l'état cisaillé développé c^* en fonction de η. L'évolution de c^{pic} est croissante et régulière entre $\eta = 0$ et $\eta = 0,6$. La valeur obtenue pour $\eta = 0,7$ est discutable, il faudrait éventuellement la confirmer par d'autres simulations dans des configurations d'empilements différentes. Entre $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$, c^{pic} est multipliée par environ 5.

Dans l'état cisaillé, au contraire, la cohésion macroscopique fluctue en fonction de η. Son évolution n'est pas monotone comme dans l'état de pic. Elle diminue entre $\eta = 0$ et $\eta = 0,2$, puis augmente de ce dernier point jusqu'à $\eta = 0,6$, enfin on observe une légère diminution au point $\eta = 0,7$. Une telle évolution de la cohésion interne dans l'état cisaillé ne donne aucune indication précise sur l'effet de la non-convexité de la forme des agrégats cohésifs à ce niveau de déformation.

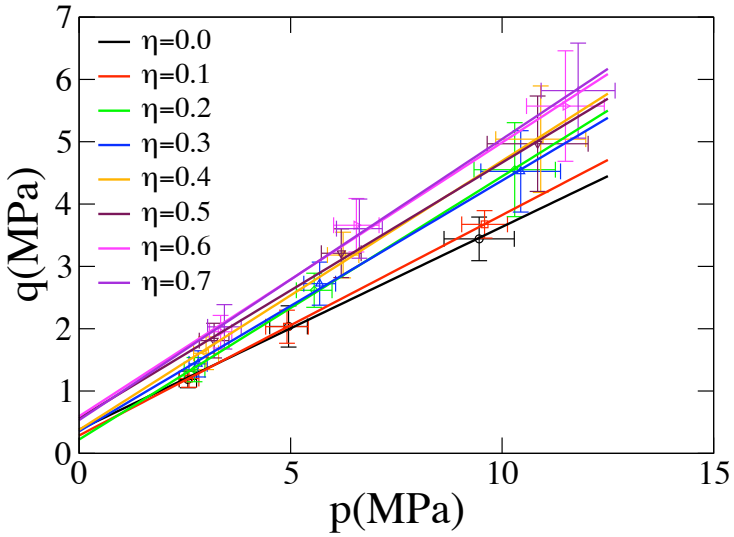


FIGURE ***4.3*** **–** *Enveloppes de Mohr-Coulomb évaluées dans l'état cisaillé proche de l'état critique en fonction de η avec des barres d'erreur correspondant aux fluctuations autour des valeurs moyennes de p et de q.*

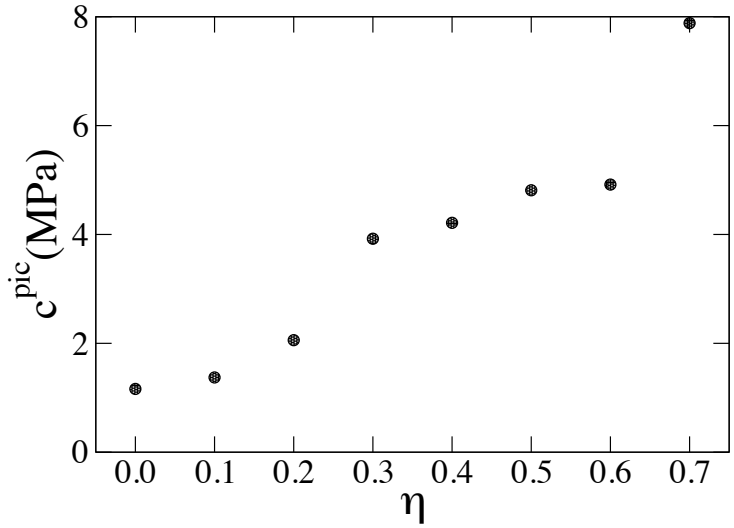


FIGURE ***4.4*** **–** *Cohésion macroscopique c^{pic} au pic du déviateur de contrainte en fonction de η.*

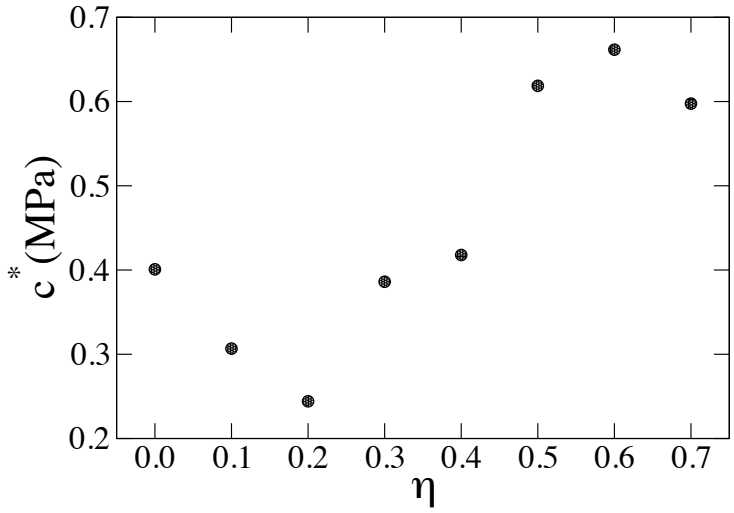


FIGURE *4.5* – *Cohésion macroscopique dans l'état cisaillé en fonction de* η.

Une origine possible de ces fluctuations est la localisation des déformations plastiques dans des bandes de cisaillement qui ne reflètent une structure granulaire fortement hétérogène. En effet comme le montre la figure 4.6 pour l'empilement granulaire $\eta = 0,3$ dans l'état cisaillé, on voit des zones très dilatées qui traversent le système granulaire pratiquement suivant sa diagonale. Ces hétérogénéités de compacités semblent être fortement liées aux fluctuations enregistrées dans l'évaluation de la cohésion interne. Cette hypothèse sera discutée et ces hétérogénéités seront analysées à l'échelle mésoscopique dans la suite du chapitre.

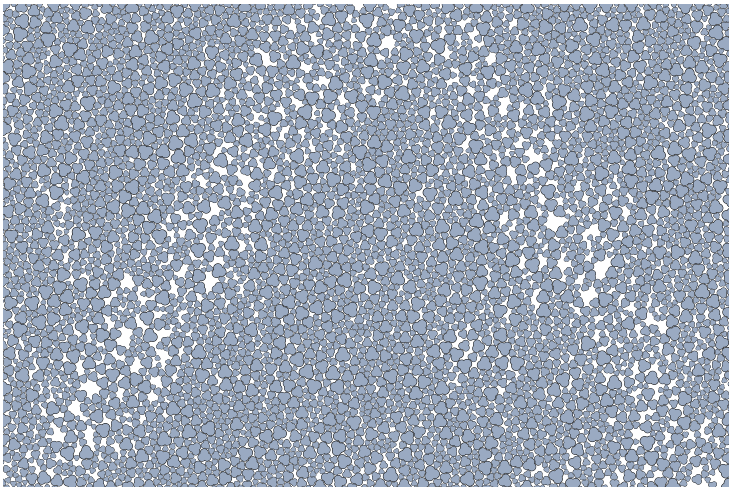


FIGURE *4.6* – *Image instantanée d'un échantillon cohésif avec* $\eta = 0,3$ *au cours du cisaillement proche de l'état critique.*

Concernant la résistance au cisaillement, l'angle de frottement interne φ est évalué au pic du déviateur de contrainte normalisée et dans l'état cisaillé où il atteint une valeur stationnaire à des fluctuations près (voir figure 4.1). Sur la figure 4.7 on voit qu'il augmente de manière

monotone avec η dans ces deux états. On peut noter que la valeur de φ^{pic} pour $\eta = 0,7$ ne suit pas la tendance, nous n'avons pas de justification pour cette situation. On peut noter qu'entre $\eta = 0,1$ et $\eta = 0,6$, l'écart entre φ^* et φ^{pic} est presque constant, de plus, il est supérieur à celui évalué pour $\eta = 0$. Cette remarque souligne qualitativement l'effet stabilisateur de la non-convexité des agrégats à l'état de pic ou encore la tendance au glissement pour les particules convexes, circulaires.

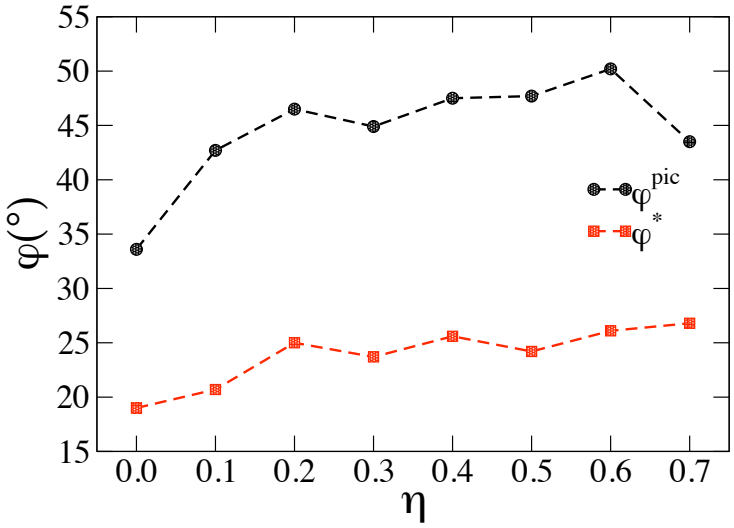


FIGURE ***4.7*** *– Angle de frottement φ au pic et dans l'état cisaillé proche de l'état critique en fonction de η.*

Sur la figure 4.8 on compare les valeurs φ^* obtenues avec les empilements cohésifs et non-cohésifs dans l'état cisaillé. Il est intéressant de noter que ces valeurs sont très proches aux fluctuations près sachant que les structures granulaires sont fortement hétérogènes pour les empilements cohésifs. Comme pour la cohésion interne, les fluctuations de φ^* pour les empilements cohésifs semblent fortement liées aux hétérogénéités de compacités. Globalement, que cela soit au pic du déviateur de contrainte ou dans l'état cisaillé, la cohésion macroscopique et l'angle de frottement interne augmentent avec le degré de non-convexité. L'augmentation de la cohésion pour une valeur fixe du seuil de rupture de l'adhésion $-f_c$ entre agrégats signifie que la non-convexité amplifie l'effet de l'adhésion. Cependant, dans l'état critique, la cohésion intergranulaire n'a pas d'effet sur l'angle de frottement interne des empilements, avec des plages de variation de φ^* quasiment identiques pour les empilements non-cohésifs et cohésifs.

4.2.2 Compacité et variation de volume

La figure 4.9 montre l'évolution de la compacité ρ en fonction de ε_q pour les différents empilements η. ρ décroît de manière monotone jusqu'à atteindre un régime proche d'un état stationnaire aux environs de 30%. Ce changement de régime puisque ρ continue à diminuer au-delà de 30% avec un taux nettement plus faible qu'avant 30%, dépend peu de η.

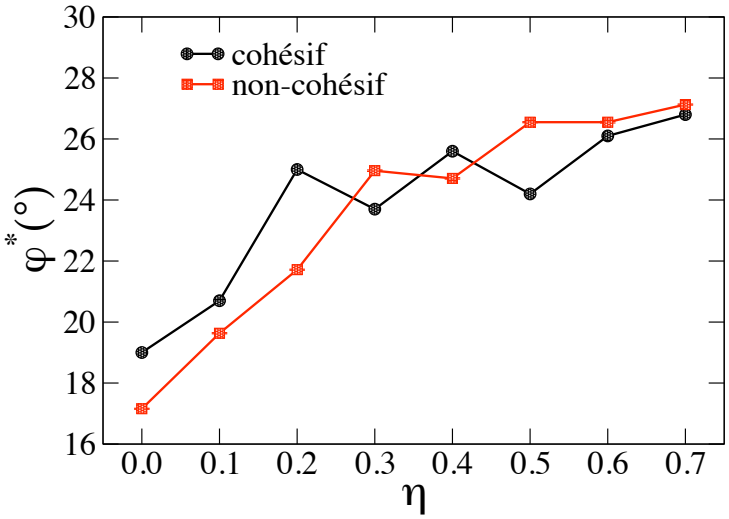


FIGURE *4.8* – *Angle de frottement interne φ^* dans l'état cisaillé proche de l'état critique en fonction de η évalué à partir des échantillons cohésifs et non-cohésifs.*

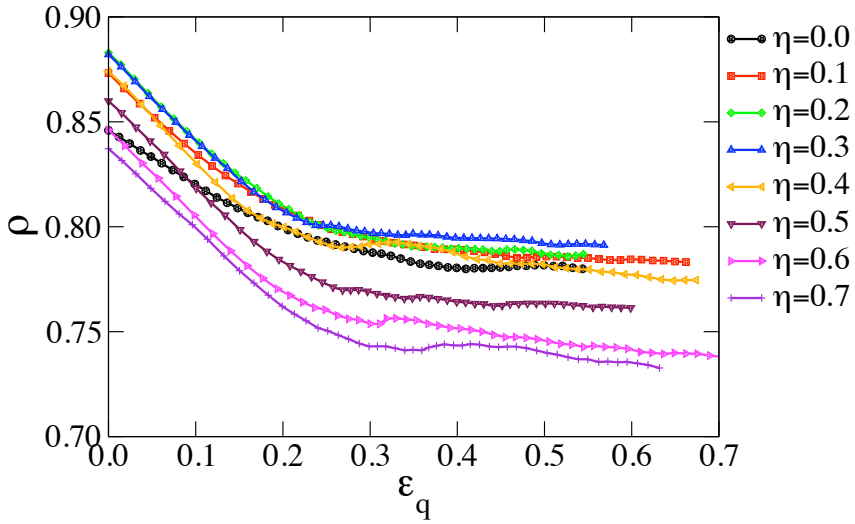


FIGURE *4.9* – *Evolution de la compacité ρ en fonction de la déformation de cisaillement ε_q pour les différentes valeurs de η en présence de cohésion.*

Nous avons reporté sur la figure 4.10, en fonction de η, les valeurs de ρ à 0%, 5% et 10% de déformation ainsi qu'une valeur ρ^* obtenue pour plus de 30% de déformation. On voit que la présence d'une cohésion intergranulaire ne change pas l'évolution de la compacité pour les faibles niveaux de déformation. On retrouve le même effet que dans le cas non-cohésif : la compacité maximale est atteinte pour une valeur intermédiaire de η. De même comme pour les empilements non-cohésifs, la valeur la plus faible de ρ^* est atteinte pour $\eta = 0,7$ et vaut moins de $0,74$.

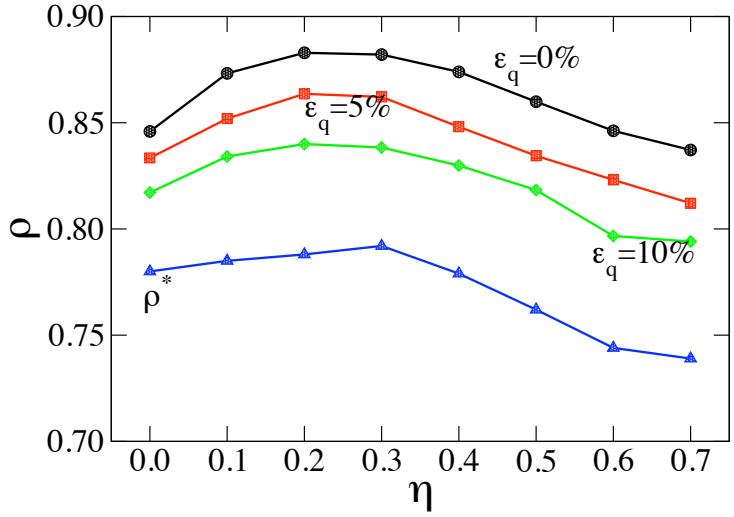


FIGURE *4.10* – *Compacité ρ à différent niveaux de cisaillement au voisinage du pic ($\varepsilon_q = 5, 10$ et 15%) et proche de l'état critique ρ^* en fonction de η en présence de cohésion.*

La figure 4.11 présente la déformation volumique cumulée $-\varepsilon_p$ (avec la convention qu'une valeur négative de ε_p correspond à une dilatation) au cours du cisaillement pour les différents échantillons en fonction de ε_q. La dilatation initiale (pour $\varepsilon_q < 0,15$) est la même pour tous les échantillons sauf pour les disques. L'angle de dilatance sécant ψ (défini par $\sin\psi = -\varepsilon_p/\varepsilon_q$) au pic vaut 24°pour $\eta \neq 0$ contre 16,5°pour $\eta = 0$. Cette première phase de dilatation est relativement homogène et régulière. Ensuite, elle est suivie d'une phase de déformation localisée où l'angle de dilatance oscille autour de quelques degrés sauf pour les disques où la déformation semble être isochore.

Mis à part les empilements de disques, il est surprenant que, même si le niveau de déformation volumique dans la première phase (c'est-à-dire $\varepsilon_q < 0,15$) augmente avec η, le taux de variation de déformation volumique donné par l'angle ψ n'en dépend pas. Intuitivement, on pourrait penser que plus les particules présentent des concavités profondes plus la variation de volume local qui s'opère lors de leur désenchevêtrement est importante et par conséquent conduit à une expansion volumique macroscopique plus importante. N'ayant pas étudié ce phénomène précisément, il se pourrait que la cohésion retarde ce phénomène de désenchevêtrement en maintenant les agrégats en contact fixes ou sans glissement.

Par contre on peut noter qu'au delà de 15% de déformation, la cohésion entraîne un effet de dilatance beaucoup plus marqué pour l'ensemble des empilements considérés. Les angles de

dilatance mesurés au voisinage du pic dans le cas cohésif, à savoir 16,5°et 24°respectivement pour $\eta = 0$ et $\eta \neq 0$ sont supérieurs à ceux mesurés dans le cas non-cohésif, soit 11°et 18,5°pour respectivement $\eta = 0$ et $\eta \neq 0$.

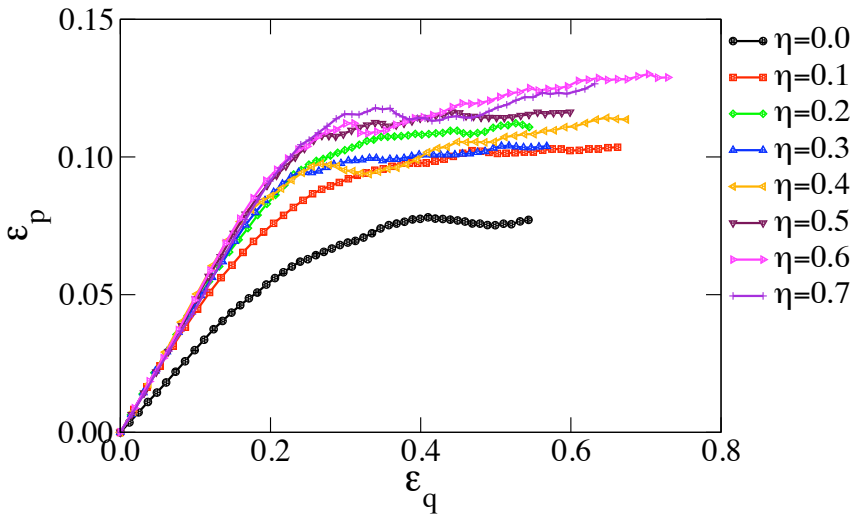


FIGURE *4.11* – *Evolution de la déformation volumique $-\varepsilon_p$ en fonction de ε_q pour les différentes valeurs de η en présence de cohésion.*

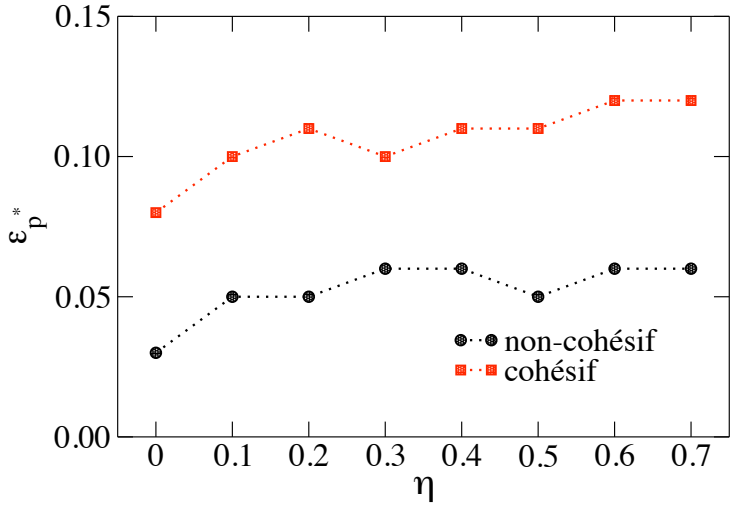


FIGURE *4.12* – *Comparaison entre la valeur cumulée finale de ε_p dans les cas cohésif et non-cohésif en fonction de η.*

Ces valeurs élevées des angles de dilatance en fonction de η pour les empilements cohésifs contribuent à augmenter leur expansion de volume cumulée de l'ordre de 2 fois celui obtenu par les empilements non-cohésifs, lorsque le cisaillement est complètement développé, voir figure 4.12.

Dans cette section, nous avons décrit de manière assez détaillée le comportement mécanique et les propriétés volumiques des empilements cohésifs en fonction du degré de non-convexité

des agrégats. Nous retiendrons pour la suite deux aspects qui méritent une étude plus approfondie par rapport aux objectifs fixés : les fluctuations de la cohésion interne dans l'état cisaillé en fonction de η, et le développement de structure granulaire hétérogène dans cett e configuration de sollicitation biaxiale. La suite de ce chapitre concerne, une étude la microstructure.

4.3 Compacités locales

Les fluctuations observées pour l'évaluation de la cohésion interne par rapport au degré de non-convexité des agrégats (voir figure 4.5) dans l'état cisaillé nous a conduit à considérer l'étude plus détaillée des compacités locales aussi bien dans le cas des empilements non-cohésifs que dans les cas cohésifs. En effet, la cohésion évaluée à partir de l'enveloppe de Coulomb ne semble pas refléter la mobilisation des forces d'adhésion dans les zones de forte localisation de cisaillement. Les fluctuations de son évolution avec η peuvent ainsi correspondre au caractère singulier de ces structures au sein de chaque empilement.

L'étude des compacités locales est également importante pour la métallurgie des poudres et plus particulièrement dans le processus de fabrication du combustible nucléaire, où les hétérogénéités de densité résultant de l'étape de mise en forme influent sur la cinétique de densification locale lors du frittage. Les zones les plus denses se consolident plus vite et mieux que les zones les moins compactes. Par ailleurs, lors de la compaction, des gradients de densité apparaissent en raison du frottement intergranulaire, du frottement entre les particules et les parois de la matrice de presse, mais aussi en raison de l'hétérogénéité de la transmission des forces de contacts. Ces hétérogénéités de densité sont la source de problèmes comme le clivage ou le délaminage du comprimé pendant la décharge et l'éjection.

4.3.1 Outils d'analyse

Le post-traitement que nous avons mis en place repose sur une routine écrite en python. Elle permet de calculer les compacités à des échelles mésoscopiques (de l'ordre d'une dizaine à une vingtaine de diamètre moyen d'agrégats) à partir d'images pixélisées en noir et blanc des échantillons. Les images pixélisées sont des fichiers binaires de type pgm (portable graymap) dont les pixels sont codés en deux niveaux de couleurs (noir et blanc ou 0 et 255). Elles sont obtenues à partir d'images vectorielles de type postscript des échantillons. La transformation des images postscript en images binaires s'effectue avec la bibliothèque de traitement d'image "GraphicsMagick".

Dans les images pixélisées, les pixels noirs constituent la phase solide et les pixels blancs le vide interstitiel. On peut alors subdiviser l'image pixélisée en cellules contenant chacune le même nombre de pixels. La compacité peut être alors calculée sur chaque cellule en considérant tout simplement le ratio entre la quantité de pixels noirs sur l'ensemble des pixels contenus dans la cellule. Au final, nous aurons accès à une distribution des compacités locales à l'échelle

de la taille des cellules. On peut aussi fixer la taille des cellules en fonction de la taille des particules (diamètre minimal, diamètre moyen, diamètre maximal). Il faut souligner que cette méthode présente l'avantage d'être applicable à des systèmes granulaires constitués de particules de formes quelconques, ou encore à des images issues d'observations expérimentales.

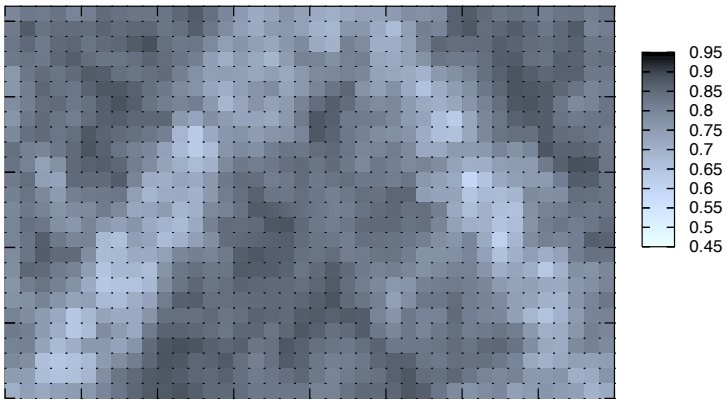


FIGURE *4.13* – *Carte des compacités locales pour l'image de la figure 4.6. La largeur des cellules est de 100 pixels, soit un peu plus d'un diamètre minimal d'agrégats.*

A titre illustratif, la figure 4.13 montre la carte des compacités locales de l'image d'un échantillon d'agrégats cohésifs ($\eta = 0,3$) dans l'état critique représentée sur la figure 4.6. Les zones de localisation des déformations plastiques sont caractérisées par une compacité plus faible que dans le reste de l'échantillon en raison du mouvement de cisaillement intense dans ces zones.

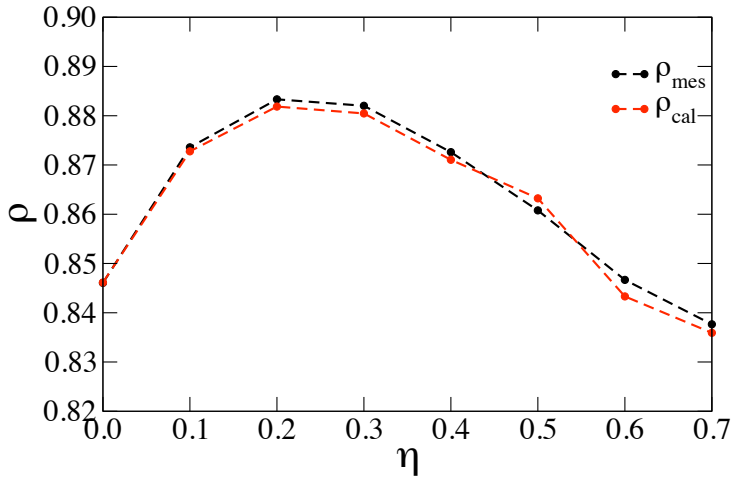


FIGURE *4.14* – *Evaluation de la compacité en fonction de η obtenue à l'état isotrope par un calcul explicite de la surface occupée par les particules (en noir) et par l'analyse d'image (en rouge).*

La figure 4.14 montre que les compacités calculées par analyse d'image et évaluées par le rapport du volume 2D des particules au volume total pour les états isotropes sont très proches.

Pour obtenir ce résultat, nous avons considéré différentes résolutions d'images mesurées en point par pouce (ppp). Bien entendu, une résolution de l'image élevée donne une meilleure approximation de la compacité exacte. Par contre cela augmente la taille et la durée de traitement de l'image pixélisée. Il faut donc trouver un compromis et évaluer l'erreur systématique par rapport à la valeur exacte. Toutes les images pixélisées utilisées ont une résolution de 1000 ppp.

Les compacités locales et leur dépendance par rapport à l'échelle (la largeur des cellules) est une méthode pour distinguer les différentes sources d'hétérogénéité. De manière générale, les matériaux granulaires sont des milieux désordonnés mais la complexité de la morphologie des agrégats peut amplifier les hétérogénéités. Il peut s'agir d'un effet purement géométrique tel que les effets de volume exclu ou encore d'effets mécaniques tels que la cohésion et le frottement intergranulaire qui limitent la mobilité des particules. Une forte polydispersité de tailles des agrégats peut induire une hétérogénéité dont la signature peut se trouver sur les compacités locales. Les bandes de cisaillement présentent leur propre échelle au-dessus de celle des particules et il faut s'attendre à les observer effectivement sur la répartition des compacités locales. Cet aspect de la microstructure des empilements ne peut être décrit de façon satisfaisante en considérant uniquement l'échelle de la particule ou des pores.

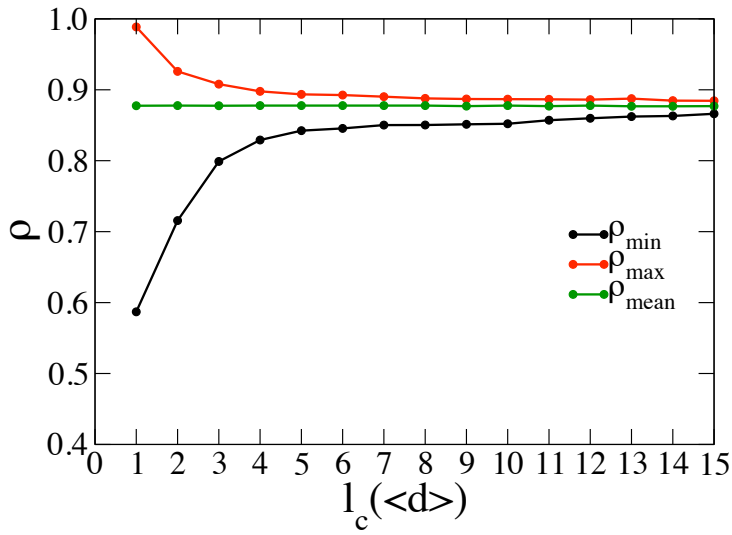


FIGURE *4.15* – *Evolution des compacités extrêmes ρ_{min} et ρ_{max} en fonction de l'échelle l_c dans l'état isotrope pour $\eta = 0,4$*

Pour une largeur de cellule l_c fixée, on peut tracer la distribution des compacités associées aux différentes cellules, et récupérer les compacités maximale et minimale. Nous allons nous contenter ici de l'évolution des compacités maximale ρ_{max} et minimale ρ_{min} en fonction de l_c. Nous avons fixé l_c comme un multiple du diamètre moyen $\langle d \rangle$ des agrégats. Ce diamètre moyen donné en pixels correspond au diamètre moyen en pixel des disques de l'échantillon $\eta = 0$. Par construction, chaque agrégat s'inscrit dans un disque qui constitue l'échantillon de référence $\eta = 0$. Nous allons analyser ci-dessous les compacités locales pour les échantillons non-cohésifs et cohésifs.

4.3.2 Systèmes non-cohésifs

La figure 4.15 montre l'évolution de ρ_{max} et ρ_{min} en fonction de l_c pour $\eta = 0,4$ dans l'état isostatique. La compacité $\rho = 1$ correspond à la compacité d'une cellule entièrement incluse dans une grosse particule (il y a un facteur 3 entre les plus grosses et petites particules). La compacité la plus faible ρ_{min} à l'échelle $l_c = \langle d \rangle$ est 0,58.

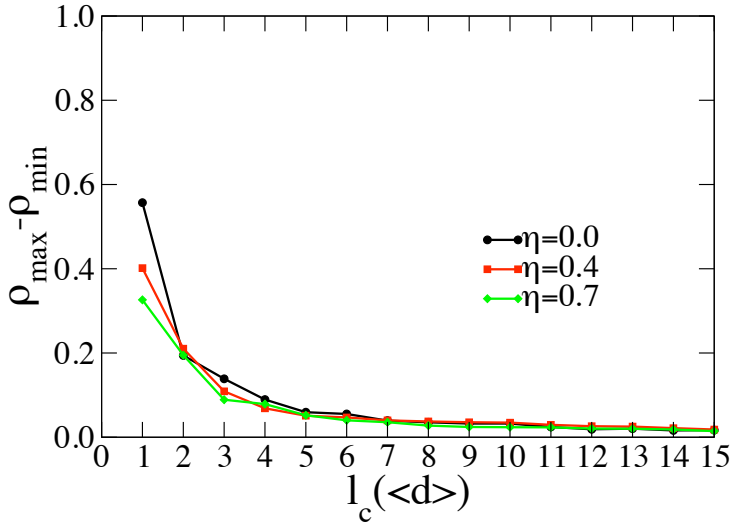


FIGURE *4.16* – *La gamme $\Delta\rho$ des valeurs de la compacité en fonction de l'échelle l_c pour trois valeurs de η à l'état dense isotrope.*

Lorsque l_c augmente, ρ_{min} augmente et ρ_{max} diminue et les deux valeurs converge vers la compacité moyenne. La figure 4.16 montre $\Delta\rho = \rho_{max} - \rho_{min}$ en fonction de l_c pour $\eta = 0, \eta = 0,4$ et $\eta = 0,7$. On peut distinguer deux régimes sur cette évolution : 1) jusqu'à $l_c \simeq 5\langle d \rangle$, on observe un resserrement rapide autour de la compacité moyenne et une forte diminution de $\Delta\rho$, 2) ensuite, $\Delta\rho$ continue à diminuer mais beaucoup plus lentement. Ces deux échelles semblent correspondre respectivement à l'échelle des hétérogénéités intrinsèques du milieu (échelle des particules), d'une part, et à l'échelle des hétérogénéités dues probablement à l'effet de parois rigides, d'autre part. En effet, pour ces systèmes très denses à la compacité maximale il n'y a pas de localisation de cisaillement lors de la compaction. Mais la présence des parois introduit une différence de compacité entre les zones à proximité des parois et au centre de l'échantillon. Pour $l_c \simeq 10 l_c(\langle d \rangle)$, $\Delta\rho$ est de 3%. Ce resserrement entre les valeurs maximale et minimale de la compacité montre que la compacité est assez homogène dès $l_c \simeq 5\langle d \rangle$ et très homogène à partir de $l_c \simeq 10\langle d \rangle$.

La figure 4.17 montre la gamme $\Delta\rho$ des compacités en fonction de la largeur l_c dans l'état cisaillé proche de l'état critique, où les bandes de cisaillement sont très développées. Le comportement observé est très proche de celui des configurations isotropes. On observe un resserrement progressif des valeurs de ρ_{min} et ρ_{max} autour de la compacité moyenne et donc une diminution de $\Delta\rho$. L'hétérogénéité des compacités, estimée par la différence $\Delta\rho$, persiste jusqu'à l'échelle $l_c \simeq 15\langle d \rangle$, ce qui montre clairement la présence des corrélations de compacité à grande échelle

sous la forme de bandes de cisaillement. Mais les valeurs de ρ_{min} sont plus faibles et la convergence vers la compacité moyenne est un peu plus lente. La figure 4.18 montre une carte des compacités pour $l_c \simeq 3\langle d\rangle$ à l'état cisaillé pour $\eta = 0,7$. On voit clairement des hétérogénéités de compacité avec des corrélations à la taille du système.

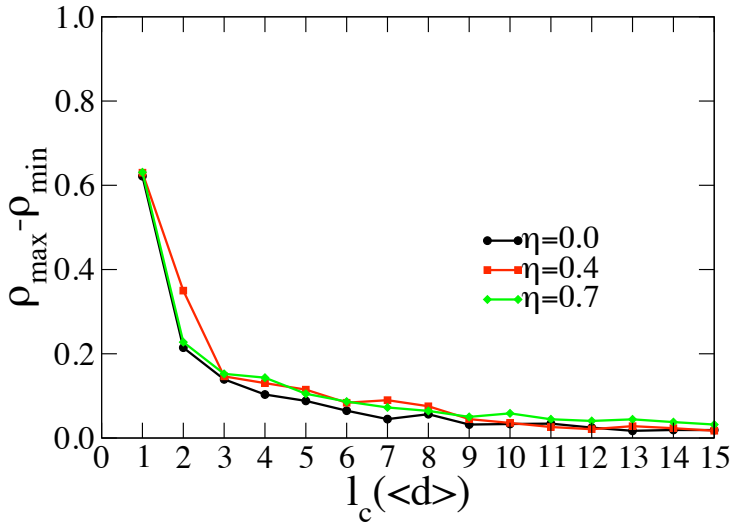


FIGURE *4.17* – *La gamme $\Delta\rho$ des valeurs de la compacité en fonction de l'échelle l_c pour trois valeurs de η à l'état cisaillé proche de l'état critique.*

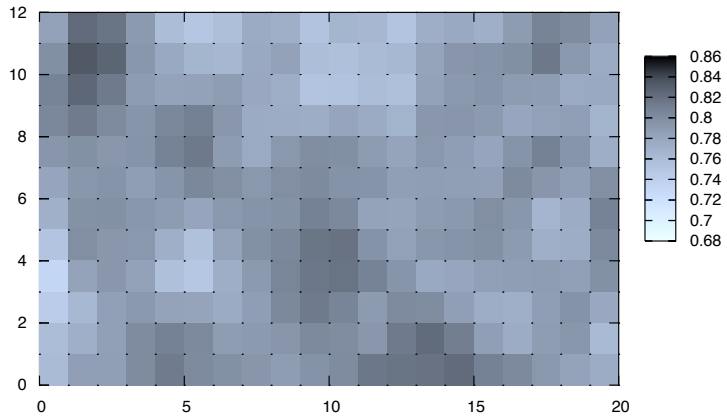


FIGURE *4.18* – *Carte des compacités locales pour $l_c \simeq 3\langle d\rangle$ à l'état cisaillé de l'échantillon $\eta = 0,7$ non-cohésif.*

4.3.3 Systèmes cohésifs

Les bandes de cisaillement sont nettement plus marquées dans le cas des échantillons cohésifs comme on peut l'observer sur les figures 4.19 et 4.20 qui montrent les cartes de compacité pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$ à 40% de déformation de cisaillement pour $l_c = 3\langle d\rangle$.

On remarque que les zones de cisaillement sont beaucoup plus marquées pour $\eta = 0,7$ que pour $\eta = 0$ et les contrastes sont plus importants que dans les échantillons non-cohésifs. D'après les cartes, on peut estimer l'épaisseur de ces zones à environ $15\langle d \rangle$ avec une compacité moyenne de l'ordre de 0,6 à 0,65.

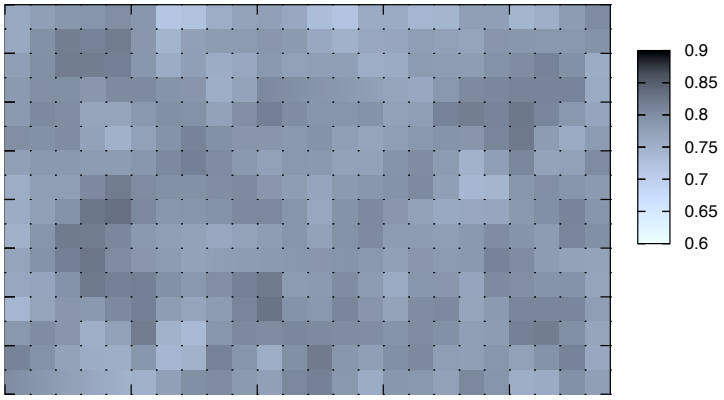


FIGURE *4.19* – *Carte des compacités locales avec $l_c = 3\langle d \rangle$ pour l'échantillon cohésif $\eta = 0$ à 40% de déformation de cisaillement.*

La figure 4.21 montre l'évolution de $\Delta\rho$ en fonction de l_c pour trois valeurs de η à 40% de cisaillement. Les valeurs de ρ_{min} sont nettement plus faibles que dans les échantillons non-cohésifs. La différence $\Delta\rho$ diminue, mais garde une valeur finie même à grandes échelles. Cette différence est de 0,04 pour $\eta = 0$, de 0,1 pour $\eta = 0,4$ et $\eta = 0,7$, ce qui indique une hétérogénéité beaucoup plus forte dans ces échantillons cohésifs par rapport aux échantillons non-cohésifs.

Comme dans le cas non-cohésif, le développement des bandes de cisaillement explique l'évolution de ρ par paliers comme observé sur la figure 4.9. Il est clair que la cohésion conduit à des corrélations à longue distance qui ont pour conséquence d'amplifier l'effet de taille finie du système et l'effet de paroi par rapport au cas non-cohésif. Pour les fortes valeurs de c/p, il est donc nécessaire d'utiliser des échantillons d'une plus grande taille. Avec nos échantillons, les hétérogénéités persistent même pour des déformations de l'ordre de 40%. Avec ces hétérogénéités, la cohésion interne du matériau, au sens des forces de traction sollicitées au sein de l'empilement, est mobilisée d'une manière inégale dans les différentes parties du matériau. Par conséquent, la cohésion mesurée ne reflète pas une propriété intrinsèque du matériau mais dans une certaine mesure la répartition de ces hétérogénéités qui est influencée par les parois. Au pic de contrainte les premières bandes apparaissent de telle sorte que la cohésion au pic reflète la cohésion dans ces bandes et donc elle varie de façon plus régulière avec η. Les bandes à l'état critique résultent d'une évolution complexe et donnent ainsi lieu à une cohésion globale qui d'après nos résultats est contrôlée davantage par les hétérogénéités que par la non-convexité des particules.

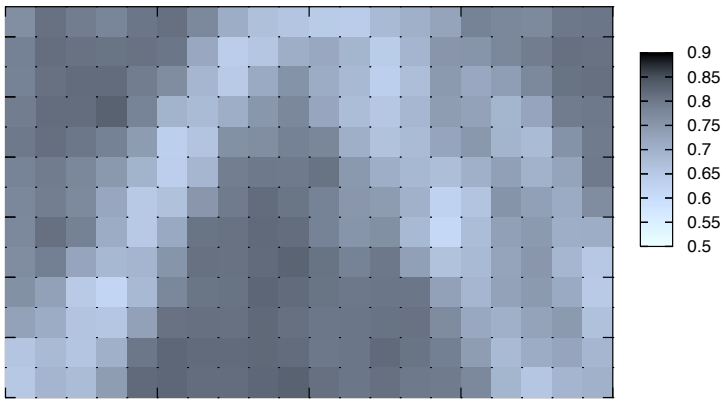


FIGURE *4.20* – *Carte des compacités locales avec $l_c = 3\langle d \rangle$ pour l'échantillon cohésif $\eta = 0,7$ à 40% de déformation de cisaillement.*

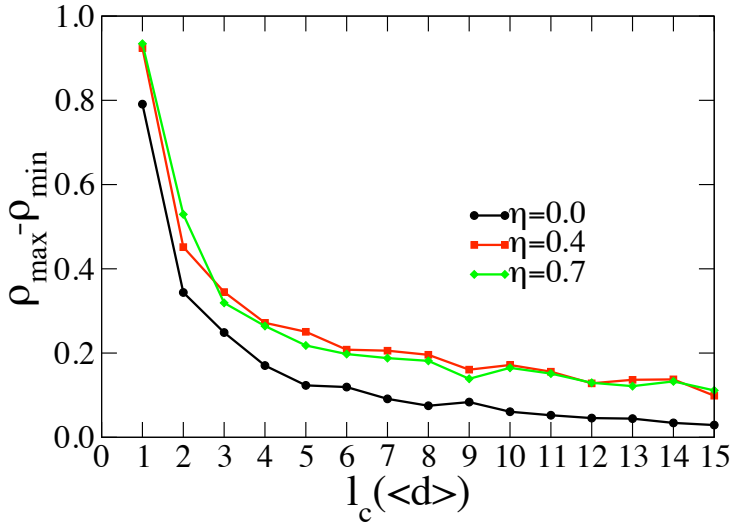


FIGURE *4.21* – *La gamme $\Delta\rho$ des valeurs de la compacité en fonction de l'échelle l_c pour trois valeurs de η à 40% de cisaillement pour les échantillons cohésifs.*

Pour mieux cerner ces effets, nous avons étudié la cohésion des empilements cohésifs dans une série d'essais de compression à contrainte contrôlée et sans parois latérales. L'avantage de ces conditions aux limites est de permettre d'accéder à une cohésion qui représente la contrainte juste nécessaire pour l'initiation de la déformation sur une bande de cisaillement qui n'est pas perturbée par la présence des parois latérales. Cette résistance représente ainsi, la cohésion d'un matériau homogène avec une compacité qui correspond à celle créée au sein de la bande de cisaillement. Par ailleurs, une question que soulève la présence des hétérogénéités de compacité d'une manière générale est de savoir si une compression isotrope ou œdométrique peut les éliminer. C'est une question que nous étudierons également plus loin dans ce chapitre à l'aide d'essais de compression œdométrique.

4.4 Texture cohésive et efforts de contact

Dans cette section, nous analysons l'impact simultané de la cohésion et de la non-convexité de la forme des particules sur le réseau de contact et la transmission des forces dans un état de cisaillement développé.

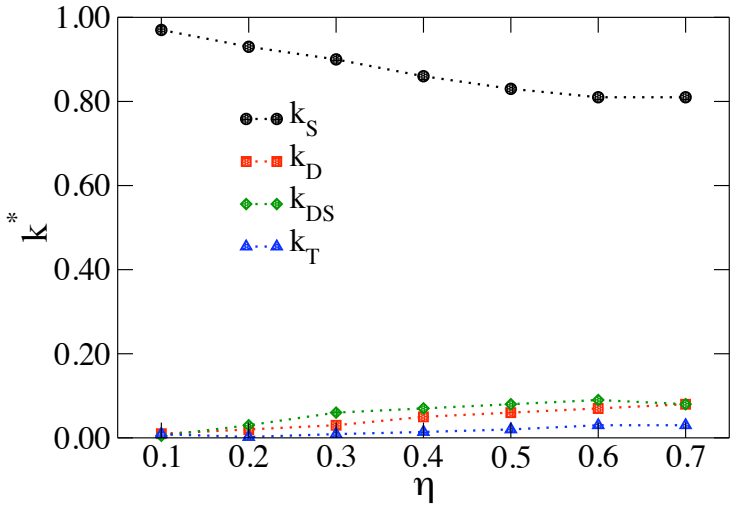


FIGURE 4.22 – *Proportion des différents types de contact dans l'état critique en présence de cohésion.*

La figure 4.22, montre les proportions k^* des contacts simples, doubles, doubles-simples et triples en fonction de η dans l'état critique. On se rend compte de manière assez surprenante que la cohésion n'a pas d'effet sur la proportion des différents types de contacts dans un état cisaillé. En effet, on retrouve sensiblement les mêmes proportions des différents types de contacts que dans les empilements cisaillés du chapitre 3. Par exemple, les contacts simples représentent jusqu'à 80% des contacts pour $\eta = 0,7$. On observe aussi une saturation des valeurs pour $\eta > 0,4$. Ce résultat signifie que les contacts doubles, qui comportent les plus forts enchevêtrements entre les particules non convexes et qui sont fortement présents dans l'état isotrope, ne sont pas stabilisés par la cohésion et s'ouvrent sous l'effet de cisaillement comme en l'absence de cohésion.

La figure 4.23 montre l'évolution du nombre de coordination Z au cours du cisaillement, pour les différentes valeurs de η. On peut voir que Z décroît de manière graduelle en fonction de η quel que soit le niveau de déformation atteint. Z atteint une valeur stationnaire après un niveau de déformation d'autant plus petit que η est faible. La figure 4.24, montre les valeurs dans l'état cisaillé Z^* en fonction de η. Plus les particules sont non convexes moins elles ont de voisins de contact en moyenne dans l'état critique. Ce résultat peut sembler paradoxal parce que l'on pourrait penser que la présence de cohésion pourrait contribuer à former plus d'agrégats surtout lorsque η augmente. Mais en réalité l'effet de la cohésion au cours d'un cisaillement continu est plutôt de favoriser la formation des structures locales lâches par une dilatance progressive. Notons aussi une différence de tendance nette de l'évolution de Z^* dans ce cas cohésif par

rapport au cas non-cohésif où Z^* est quasiment constant en fonction de η.

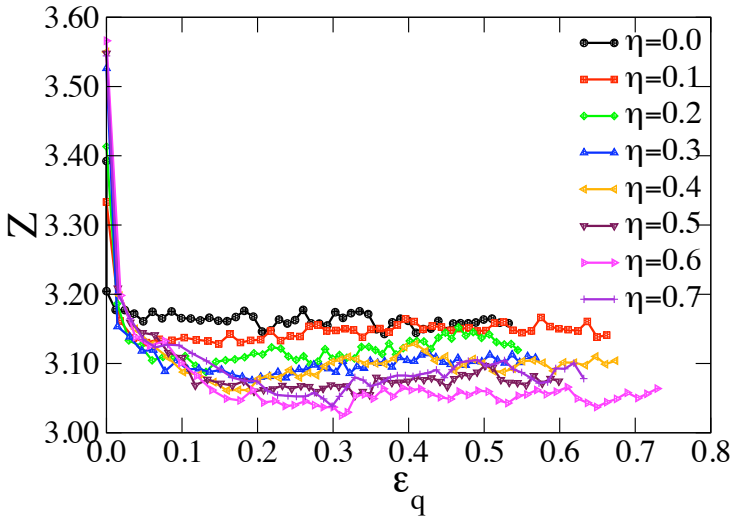


FIGURE *4.23* – *Evolution du nombre de coordination Z au cours du cisaillement dans le cas des échantillons cohésifs.*

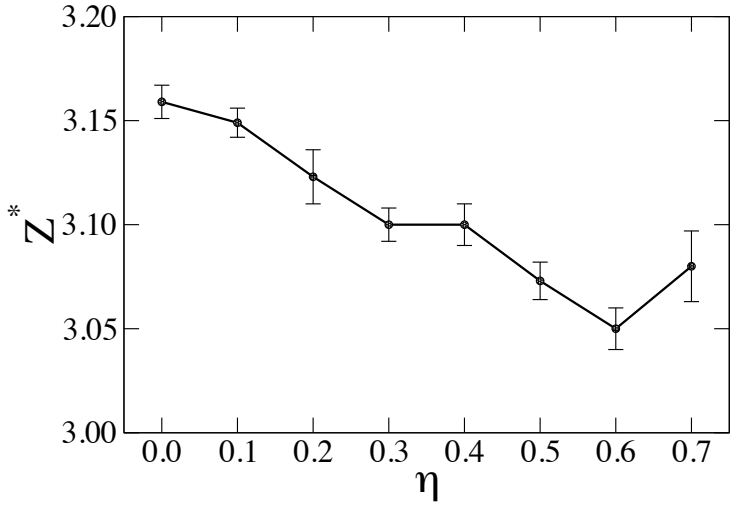


FIGURE *4.24* – *Valeur moyenne de Z dans l'état cisaillé en fonction de η pour les échantillons cohésifs. Les barres d'erreur désignent les écart-types autour des valeurs moyennes.*

Sur la figure 4.25 on voit que pour les échantillons cohésifs le nombre de connectivité Z_c atteint sa valeur stationnaire Z_c^* dès 10% de déformation. La figure 4.26 montre que Z_c^* augmente graduellement avec la non-convexité. Z_c^* passe de 3,15 pour $\eta = 0$ à 3,85 pour $\eta = 0,7$. L'évolution de Z^* et Z_c^* est assez paradoxale dans la mesure où Z diminue alors que Z_c augmente avec η. En d'autres termes, lorsque le degré de non-convexité augmente, en moyenne un agrégat établit plus de contacts avec moins de voisins. La figure 4.27 montre l'évolution du rapport $K^* = Z_c^*/Z^*$ dans l'état critique en fonction de η. Cette évolution est similaire à celle des échantillons non-cohésifs.

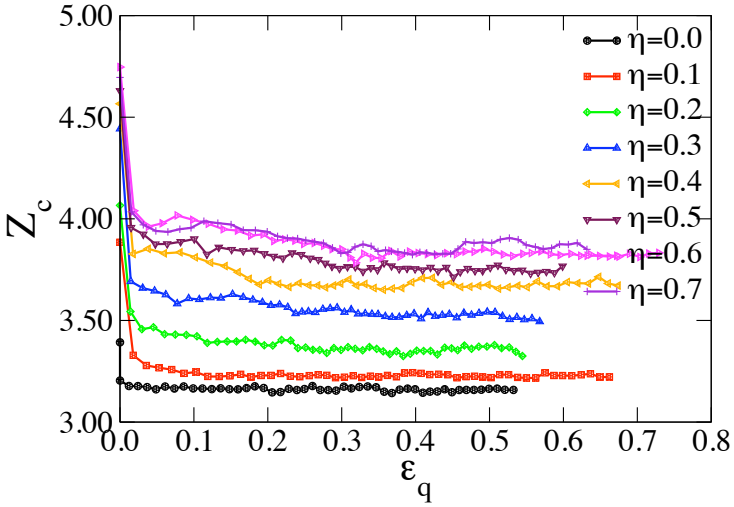


FIGURE *4.25* – *Evolution du nombre de connectivité Z_c au cours du cisaillement en fonction de η pour les empilements cohésifs.*

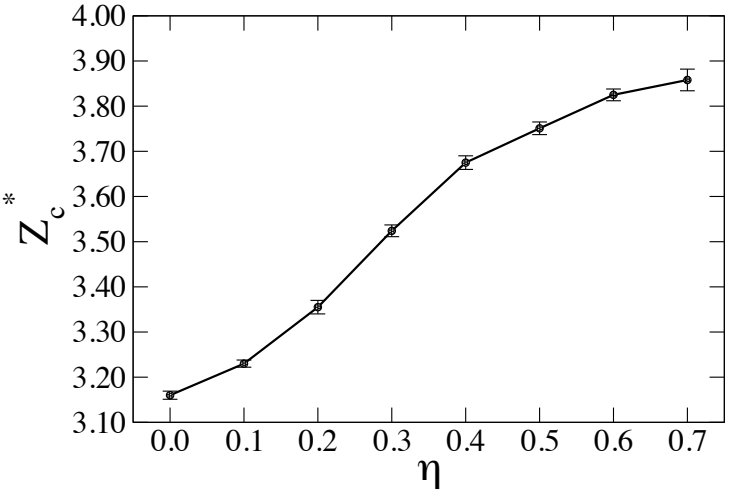


FIGURE *4.26* – *Evolution de la valeur moyenne du nombre de connectivité Z_c dans l'état critique en fonction de η pour les empilements cohésifs. Les barres d'erreur désignent les fluctuations autour des valeurs moyennes dans l'état critique.*

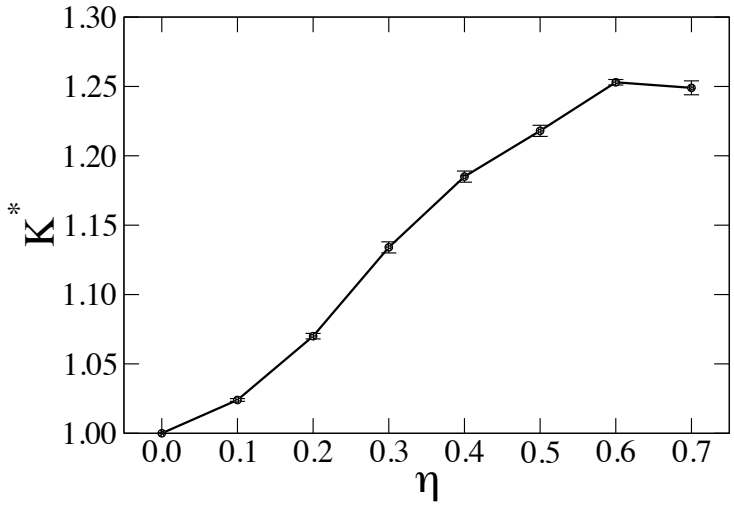
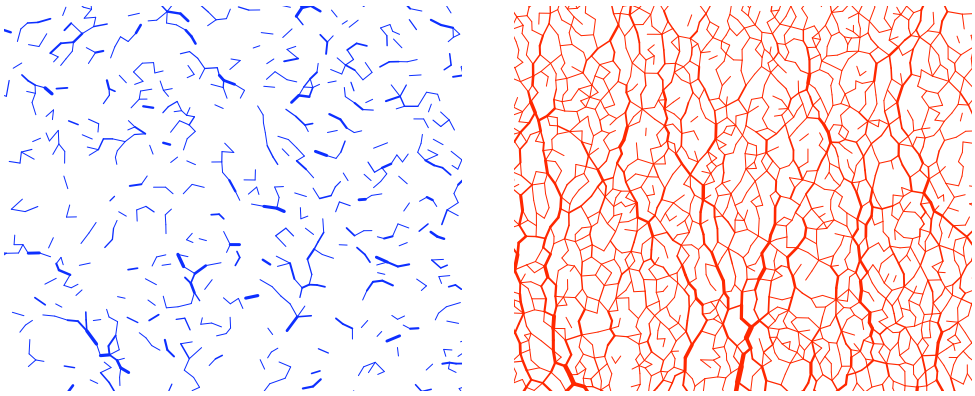


FIGURE ***4.27*** **–** *Evolution du rapport K^* moyenné dans l'état critique en fonction de η pour les empilements cohésifs. Les barres d'erreur désignent les fluctuations autour des valeurs moyennes.*

Pour comprendre la texture des échantillons cohésifs, il est nécessaire de distinguer les contacts en traction des contacts en compression. Même si les échantillons sont soumis à des contraintes compressives dans toutes les directions d'espace, des contacts en traction apparaissent naturellement notamment dans les directions d'extension au cours de la compression biaxiale. Ces contacts caractérisent ainsi l'état mécanique du système. Deux exemples des réseaux des forces de traction et de compression sont présentés sur les figures 4.28 et 4.29 au début du cisaillement pour les échantillons $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$.



(a) (b)

FIGURE ***4.28*** **–** *Visualisation des réseaux de forces normales en traction (a) et en compression (b) au début du cisaillement pour l'échantillon de disques ($\eta = 0$). Les forces sont représentées par des segments dont la largeur est proportionnelle à l'intensité de la force normale f_n.*

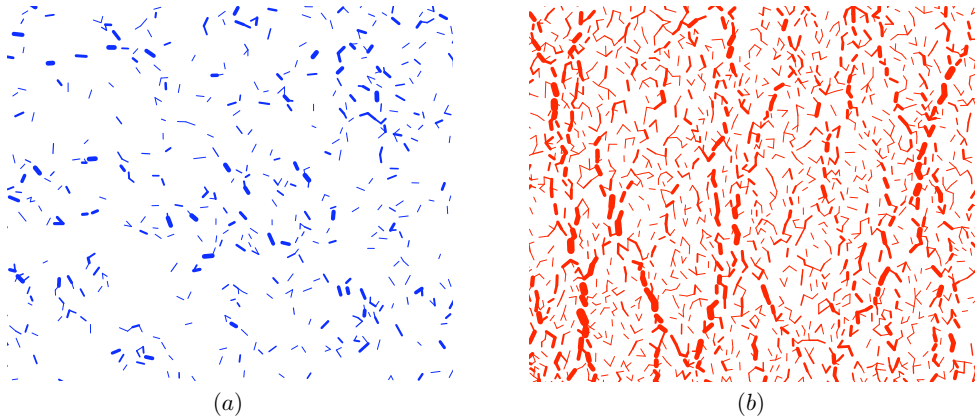


FIGURE *4.29* – *Visualisation des réseaux de forces normales en traction (a) et en compression (b) au début du cisaillement pour l'échantillon d'agrégats avec $\eta = 0,7$. Les forces sont représentées par des segments dont la largeur est proportionnelle à l'intensité de la force normale f_n.*

La figure 4.30 montre les nombres de connectivité Z_c^+ et Z_c^- définis séparément pour les contacts en compression et en traction en fonction de ε_q. En partant des systèmes initialement très denses, à la fois Z_c^+ et Z_c^- diminuent rapidement avec ε_q par perte de contacts mais Z_c^- augmente de nouveau par la suite au détriment des contacts en compression. Les deux nombres Z_c^+ et Z_c^- augmentent avec la non-convexité, mais dans tous les cas Z_c^+ est supérieur à Z_c^- au moins d'un facteur 2.

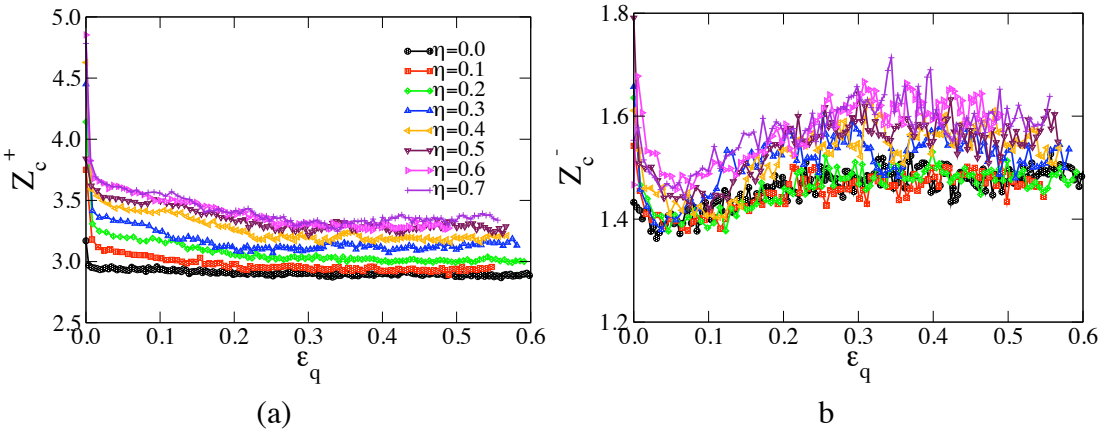


FIGURE *4.30* – *Le nombre de connectivité (nombre de contacts par particule) pour les contacts en compression (a) et en traction (b) en fonction de la déformation de cisaillement cumulée pour toutes les valeurs de η.*

L'état de cohésion peut être caractérisé en comparant les valeurs moyennes $\langle f_n^+ \rangle$ et $\langle f_n^- \rangle$ des forces compressives et des forces en traction dans le système. Nous considérons le paramètre α défini par

$$\alpha = \frac{-\langle f_n^- \rangle}{\langle f_n^+ \rangle + \langle f_n^- \rangle} \tag{4.2}$$

Remarquons que $\langle f_n^- \rangle$ est négatif, mais la somme $\langle f_n^+ \rangle + \langle f_n^- \rangle$ reste positive au cours du cisaillement en raison de la pression moyenne compressive appliquée sur le système. La figure 4.31 montre l'évolution de α avec ε_q pour tous les échantillons. D'une manière générale, α présente une valeur très élevée au début du cisaillement avant la perte de contacts. Ensuite, il diminue rapidement et augmente de nouveau pour tendre vers une valeur stationnaire lorsque le système se rapproche de l'état critique. La valeur de α fluctue mais augmente globalement avec la non-convexité en accord avec la cohésion.

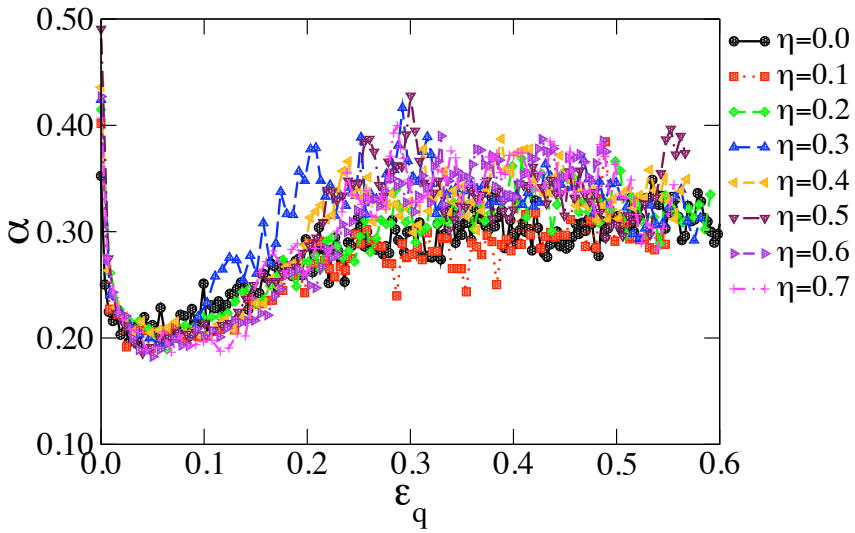


FIGURE *4.31* – *Le paramètre α décrivant l'état de cohésion en fonction de la déformation de cisaillement cumulée pour différentes valeurs de η.*

Pour une interprétation plus claire du rôle du réseau des contacts en traction, il faut considérer les orientations des contacts en définissant séparément les anisotropies a_c^+ et a_c^- des contacts en compression et en traction, respectivement. La figure 4.32 montre l'évolution de ces anisotropies en fonction du cisaillement. Ces anisotropies ont été pondérées par les facteurs de phase $\cos 2(\pi/2 - \theta_c^+)$ et $\cos 2(\pi/2 - \theta_c^-)$, où θ_c^+ et θ_c^- sont les directions privilégiées des contacts compressifs et en traction, respectivement.

Ainsi, une valeur positive indique que la direction privilégiée coïncide avec l'axe de la compression ($\pi/2$) tandis qu'une valeur négative indique que la direction privilégiée est orthogonale à l'axe de compression. Comme on peut le voir sur la figure, a_c^+ est toujours positive tandis que a_c^- commence par des valeurs négatives et ne devient positif qu'après le pic. Dans l'état cisaillé, sa valeur est en moyenne nulle pour les disques et augmente avec η. En d'autres termes, pour les disques, les contacts négatifs sont orientés de façon uniforme dans toutes les directions et la direction d'extension n'est pas privilégiée. Ceci suggère que les contacts en traction reflètent principalement les champs de vitesses dans le voisinage des particules plutôt que le champ des vitesses affines. Pour $\eta \neq 0$, la direction privilégiée des contacts est verticale à la fois pour les contacts compressifs et en traction. Il semble donc que la contraction verticale de l'échantillon donne lieu à des configurations d'équilibre qui impliquent dans certains cas des contacts en traction comme illustré sur la figure 4.33.

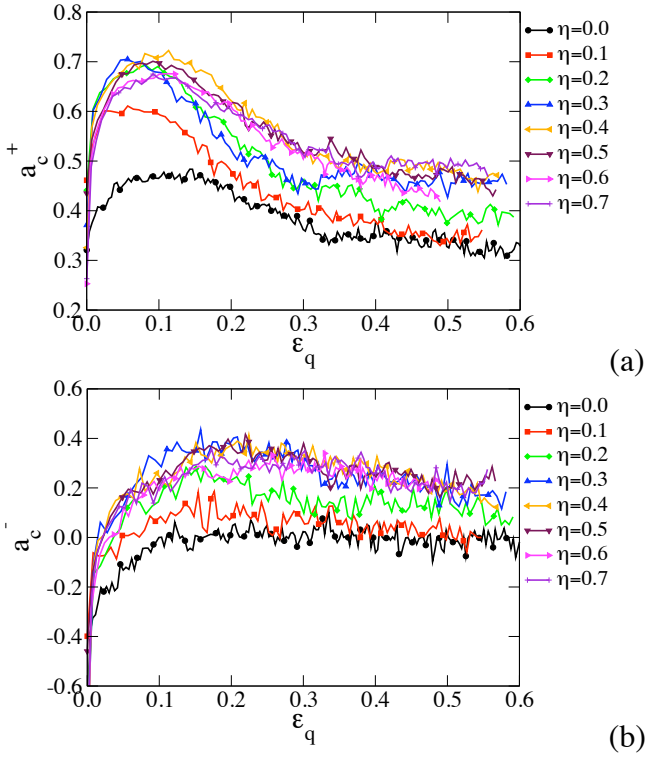


FIGURE ***4.32*** – *L'anisotropie des réseaux des contacts en compression (a) et en traction (b) en fonction de la déformation de cisaillement cumulée pour les empilements cohésifs.*

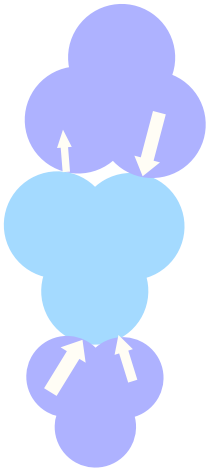


FIGURE ***4.33*** – *Equilibre d'un agrégat sous l'effet des forces en compression et en traction orientées dans la même direction.*

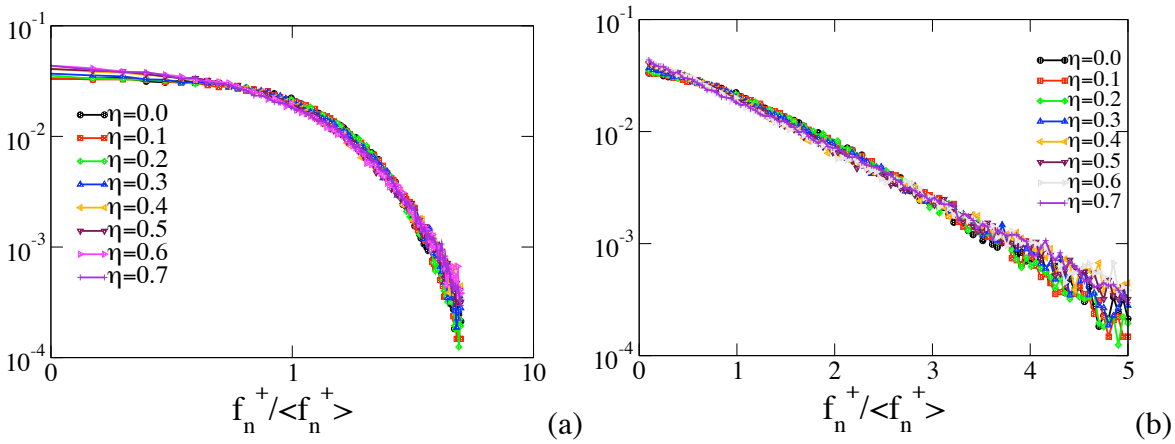


FIGURE *4.34* – *Distribution des forces normales de compression au pic du déviateur de contrainte en échelle logarithmique (a) et semi-logarithmique (b) pour les différentes valeurs de η. Les forces sont normalisées par la moyenne $\langle f_n^+ \rangle$ des forces de compression.*

Les distributions des forces normales de compression et de traction de l'état critique sont présentées respectivement sur les figures 4.34 et 4.35. Les distributions des forces de compression, normalisées par la moyenne $\langle f_n^+ \rangle$ de toutes les forces en compression, ont globalement la même forme que celles observées dans l'état critique pour des empilements, dépourvu de cohésion avec un léger élargissement en fonction de η. En l'absence de cohésion cet élargissement est plus fort, ce qui indique que le degré de non-convexité des particules est moins important pour la distribution des forces de compression en présence de la cohésion.

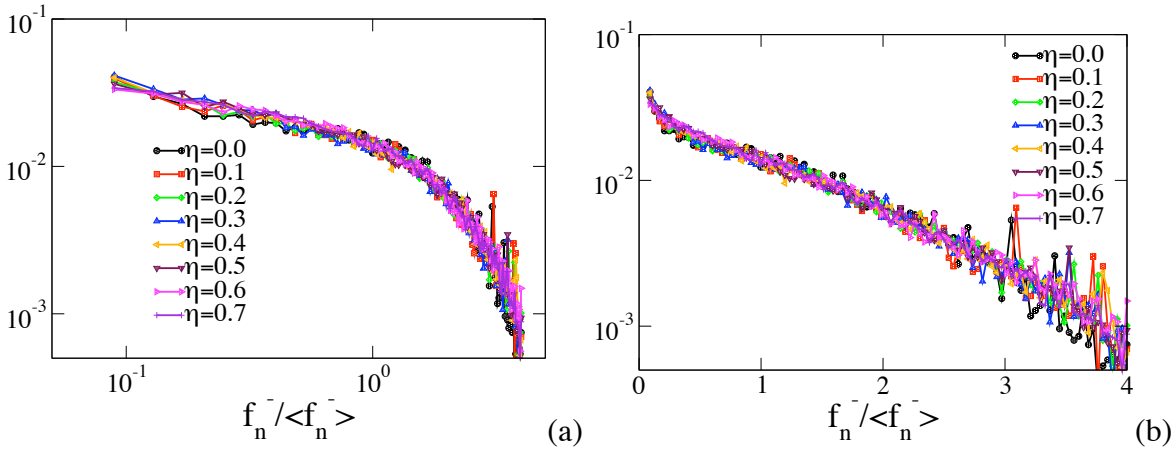


FIGURE *4.35* – *Distribution des forces normales de traction au pic du déviateur de contrainte en échelle logarithmique (a) et semi-logarithmique (b) pour les différentes valeurs de η. Les forces sont normalisées par la moyenne $\langle f_n^- \rangle$ des forces de traction.*

On peut néanmoins considérer que la distribution des forces est plus large avec la cohésion dans la mesure où la distribution comporte également la classe des forces en traction. Cette distribution (figure 4.35) a globalement une forme exponentielle décroissante pour les grandes

forces de compression et une forme en loi de puissance pour les faibles forces en traction. Il faut remarquer que ces forces ont été normalisées par la moyenne $\langle f_n^- \rangle$ de toutes les forces en traction. Dans le système considéré ici, nous avons $\langle f_n^+ \rangle = -4\langle f_n^- \rangle$.

4.5 Compression œdométrique

Lors de leur mise en forme par pressage uniaxial, les poudres d'UO_2 se densifient essentiellement par le réarrangement des agrégats de cristallites. Ce mécanisme de densification s'accompagne de différents phénomènes qui modifient la microstructure du point de vue de la distribution hétérogène des compacités. Dans cette section, nous allons étudier la compaction des milieux cohésifs par compression œdométrique dans une boîte rectangulaire. Les simulations permettent de déterminer les effets de la non-convexité de forme et de la cohésion sur l'évolution de l'indice des vides en fonction de la contrainte appliquée. Nous allons nous intéresser également à l'hétérogénéité des compacités et à la connectivité des particules et la distribution des forces lors de la compression. Deux séries de simulations seront analysées : une première série en partant des échantillons cohésifs préparés par consolidation et une seconde série en partant des échantillons cohésifs préalablement cisaillés qui comportent des bandes de cisaillement. L'objectif dans ce dernier cas est de voir l'effet de la compaction sur le devenir de ces zones de faible compacité. Les simulations étant en 2D, nous analysons l'évolution des tendances. Les grandeurs tels que la compacité, l'indice des vides et les contraintes ne sont pas directement comparables aux données expérimentales.

4.5.1 Comportement macroscopique

Protocole numérique

Les simulations de compression œdométrique se déroulent en deux étapes. La première étape consiste à générer un échantillon poreux par pré-compression. Cette étape est réalisée par l'application d'une contrainte constante σ_{yy}^0=1 MPa sur la paroi supérieure de l'enceinte de simulation, les trois autres parois restant fixes et les particules étant disposées sur un réseau triangulaire sans se toucher. Dans chaque échantillon à η donné, les particules sont affectées d'un coefficient de frottement et d'une adhésion identiques. Cette première phase est réalisée jusqu'à l'atteinte d'un état d'équilibre stable. La cohésion effective des échantillons ainsi obtenus est $c_e = 18,9$. La deuxième étape consiste à récupérer ces états faiblement consolidés afin de leur appliquer des incréments de contrainte successifs au cours du temps. L'incrément de contrainte imposé est de 0,5σ_{yy}^0 par pas de temps δt.

Indice des vides vs. contrainte appliquée

La figure 4.36, présente l'évolution de l'indice des vides e en fonction de la contrainte appliquée σ_{yy} pour les différentes valeurs de η. Tout d'abord, remarquons que l'indice des vides initial e_{max}, qui résulte de l'application de la pré-contrainte σ_{yy}^0 est la valeur la plus élevée pour

la pré-contrainte donnée. Sa dépendance vis-à-vis de η est similaire à celle dans les échantillons cisaillés : il est plus faible pour $\eta = 0,1$ que pour $\eta = 0$, mais à partir de $\eta = 0,2$ il est d'autant plus élevé que η est plus grand. Ce constat est le même en fin de compaction pour $\sigma_{yy} = 100$ MPa. On voit que les courbes ont globalement la même allure caractérisées par un plateau entre 0 et 25 MPa, puis une décroissance entre 25 et 60 MPa et enfin un nouveau plateau entre 60 et 100 MPa. Plus η est élevé, plus la valeur de e diminue entre 25 et 60 MPa. La valeur finale e_{min} correspond à l'indice des vides le plus faible pour chaque échantillon dans cette configuration uniaxiale. Les valeurs de e_{min} sont très proches de celles obtenues à la fin du cisaillement (figure 4.10).

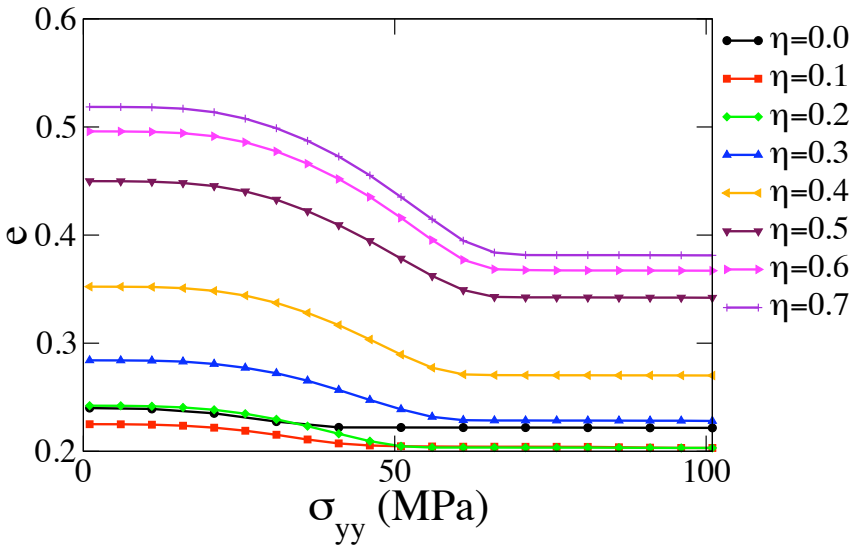


FIGURE 4.36 – *Evolution de l'indice des vides e en fonction de la contrainte imposée σ_{yy}.*

La figure 4.37, présente une mise à l'échelle des courbes montrées dans la figure 4.36. Cette mise à l'échelle est effectuée en considérant pour chaque échantillon η l'indice des vides relatif $e_r = (e - e_{min})/(e_{max} - e_{min})$ en fonction de la pression de mise en forme normalisée $\sigma'_{yy} = \sigma_{yy}/\sigma^0_{yy}$. Cette normalisation nous permet de mieux apprécier l'effet de la non-convexité et de la cohésion sur la compressibilité des assemblages. Toutes les courbes de compaction présentent la même allure. L'indice des vides relatif diminue pour une valeur de contrainte normalisée de l'ordre de 10 pour toutes les valeur de η. Mais e_{min} est atteint pour une contrainte d'autant plus élevée que η est grand, ce qui suggère une compressibilité plus faible pour les systèmes à particules non convexes. Comme on peut voir sur la figure 4.37, la loi de la compaction peut être approchée par une forme semi-logarithmique :

$$e_r = 1 - C_c \ln(\sigma') \tag{4.3}$$

où le coefficient $C_c \simeq 0,6$ est un coefficient de compression qui dépend peu de η. Cette dépendance approximativement logarithmique signifie que toute variation $-\delta e$ du volume des vides est proportionnelle à la variation relative $\delta\sigma'/\sigma'$ de la contrainte.

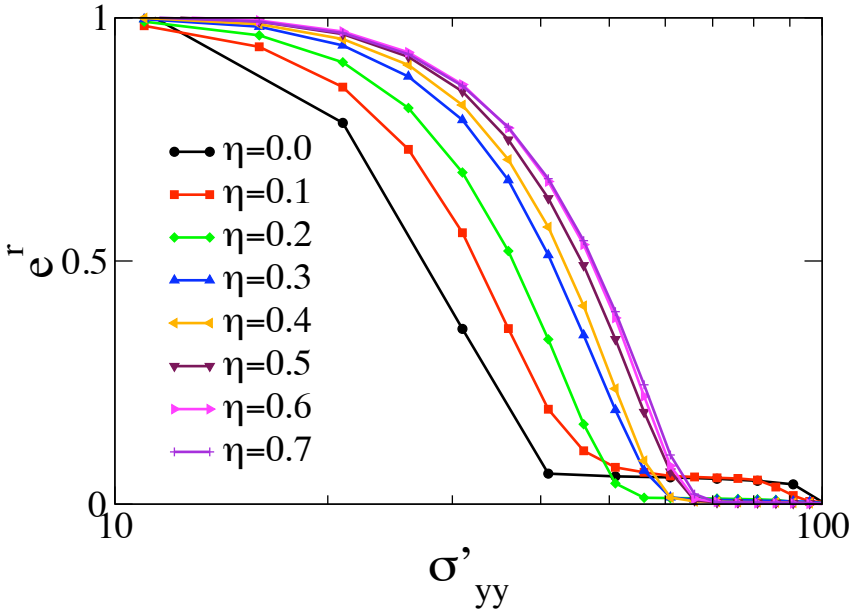


FIGURE *4.37* – *Evolution de l'indice des vides relatif e_r en fonction de la pression normalisée σ'_{yy}.*

En l'absence de la cohésion et pour des particules indéformables, une variation de la contrainte dans une configuration uniaxiale a peu de chance de perturber l'état d'équilibre dans la mesure où toutes les forces se mettent à l'échelle avec la contrainte appliquée. En théorie, un matériau non-cohésif composé de particules indéformables ne peut donc pas se compacter par une compression œdométrique. La compression ne peut résulter alors que des perturbations. Dans un matériau cohésif, au contraire, l'état des contraintes évolue dans la mesure où la cohésion effective $c_e = f_c/(pd)$ diminue en proportion inverse de la pression. En d'autres termes, au fur et à mesure que la contrainte de compression augmente, le matériau devient de moins en moins cohésif et donc se compacte progressivement par réarrangements. Aux grandes valeurs de la contrainte σ', le matériau perd pratiquement sa cohésion effective et donc il ne se compacte plus par incréments de contrainte.

4.5.2 Microstructure

La compression œdométrique réalisée sur les échantillons préconsolidés conduit à une augmentation du nombre de contacts entre les agrégats. La figure 4.38 montre que globalement le nombre de coordination augmente en fonction de la pression de mise en forme. Après un palier (sauf pour les disques qui subissent d'abord une diminution de Z), la compaction s'accompagne d'une augmentation de Z. Le nombre de coordination varie peu en fonction de η contrairement à l'indice des vides normalisé qui diminue fortement (voir figure 4.37) lorsque la pression de mise en forme augmente. Nous voyons que les variations de Z et de e^r correspondent bien. Entre 0 et environ 75 MPa, à une forte diminution de l'indice de vides e^r est associé une forte augmentation de Z. Puis au delà de 75 MPa, e^r est pratiquement constant tandis que Z continue

à croître faiblement. Cette augmentation est quasi-linéaire en fonction de σ_{yy}.

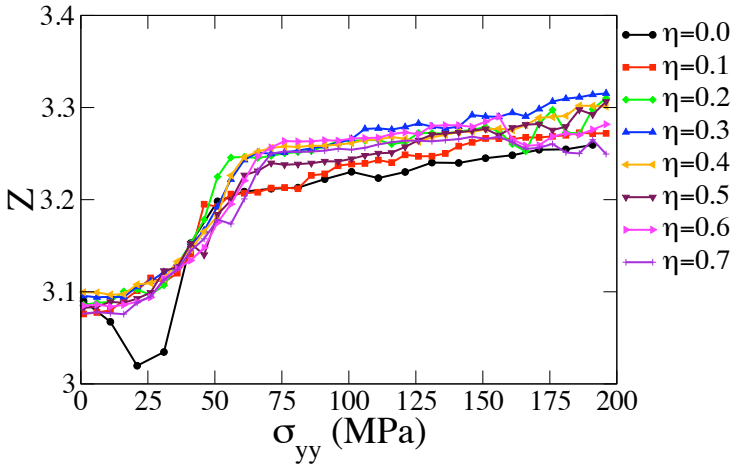


FIGURE *4.38* – *Evolution du nombre de coordination Z en fonction de la contrainte de mise en forme imposée σ_{yy}.*

La figure 4.39 montre l'évolution du nombre de connectivité Z_c en fonction de la contrainte appliquée pour les différentes valeurs de η. Globalement, les courbes montrent la même tendance que Z. Il est intéressant de voir qu'entre 25 et 50 MPa le gain moyen de contacts par particule augmente avec η. Cet effet conduit à une dispersion plus forte des valeurs de Z_c atteintes par rapport à celles du début de la compaction. Il est intéressant de remarquer que sur la totalité de l'essai de compression œdométrique, la variation de Z_c en fonction de η est beaucoup plus importante que celle de Z.

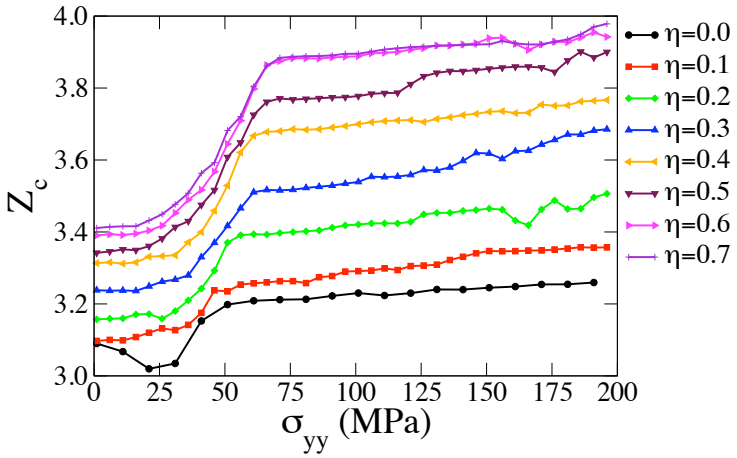


FIGURE *4.39* – *Evolution du nombre de connectivité Z_c en fonction de la contrainte de mise en forme imposée σ_{yy}.*

4.5.3 Etat de compacité hétérogène

Dans ce paragraphe nous nous intéressons à l'évolution de la densité d'empilements granulaires présentant initialement une forte hétérogènéité de compacité. L'objectif de cette étude est de connaître l'évolution de ces hétérogénéités au cours de la compaction. Nous considérons l'échantillon $\eta = 0,7$ à l'état cisaillé obtenu par compression biaxiale. Comme le montre la figure 4.40, l'état de compacité est non-uniforme et présente des bandes de cisaillement où la compacité est nettement plus faible dans les autres parties de l'échantillon.

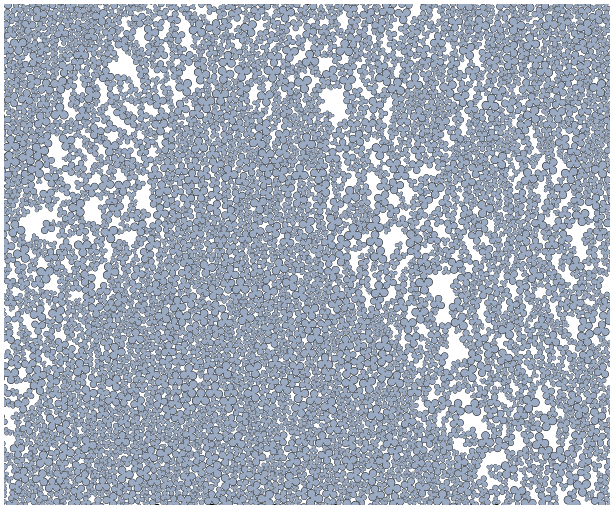


FIGURE *4.40* – *Visualisation d'une partie de l'échantillon $\eta = 0,7$ avec des particules cohésives en début de compaction soumis à une contrainte initiale σ^0_{yy}.*

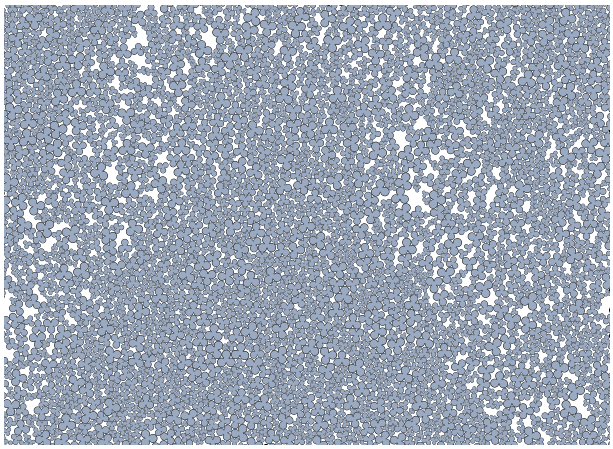


FIGURE *4.41* – *Visualisation d'une partie de l'échantillon $\eta = 0,7$ avec des particules cohésives sous une contrainte 330σ^0_{yy}=330 MPa.*

Les figures 4.40, 4.41 et 4.42 montrent le même échantillon à trois étapes de compaction. On voit clairement que l'échantillon garde des traces visibles des hétérogénéités de compacité

de l'état initial même si la cohésion effective c_e dans le dernier échantillon est nulle. Ce résultat suggère donc que la compression œdométrique ne permet pas d'effacer complètement les bandes de cisaillement et atteindre un état complètement uniforme.

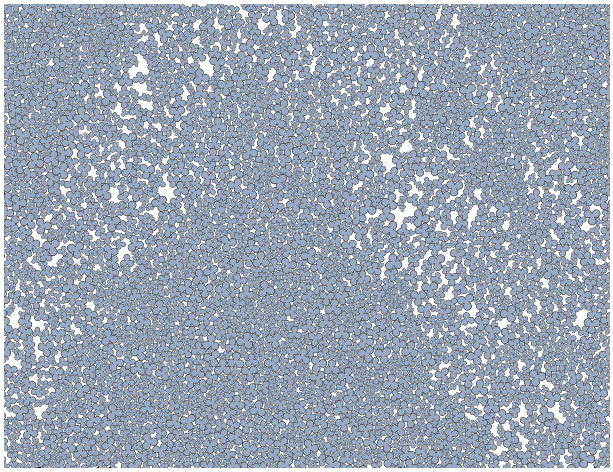


FIGURE *4.42* – *Visualisation d'une partie de l'échantillon $\eta = 0,7$ avec des particules cohésives en fin de compaction, la contrainte de mise en forme est de 1000σ^0_{yy}=1000 MPa.*

Pour quantifier cette évolution, nous nous proposons de suivre l'évolution du degré d'homogénéité $\Delta\rho = \rho_{max} - \rho_{min}$ de trois échantillons $\eta = 0$,$\eta = 0,4$ et $\eta = 0,7$ à différents niveaux de contraintes appliquées. Les figures 4.43 et 4.44 montrent l'évolution de ces trois échantillons, pour les échelles $l_c = 5\langle d\rangle$ et $l_c = 10\langle d\rangle$.

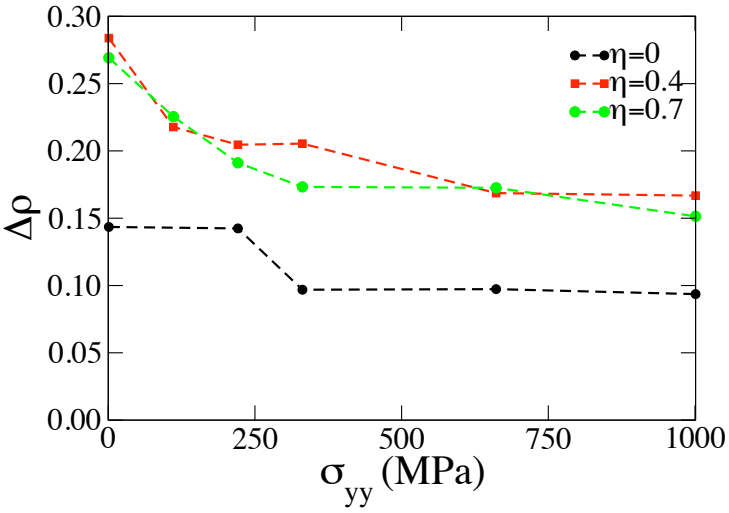


FIGURE *4.43* – *Evolution du degré d'hétérogénéité de compacité $\Delta\rho$ en fonction de la contrainte appliquée σ_{yy} pour les échantillons $\eta = 0$, $\eta = 0,4$ et $\eta = 0,7$. L'échelle d'analyse est de $l_c = 5\langle d\rangle$.*

Les hétérogénéités de compacité sont plus visibles pour une échelle de $5\langle d\rangle$ avec des niveaux atteints par $\Delta\rho$ sur les 3 échantillons plus élevés que pour $l_c = 10\langle d\rangle$, $\Delta\rho$ pour $l_c = 10\langle d\rangle$ vaut

environ 2 fois $l_c = 5\langle d \rangle$. Lorsque $l_c = 10\langle d \rangle$, l'échantillon $\eta = 0$ est le seul à résorber son degré d'hétérogénéité initiale. En effet, aux environs de 330 MPa, $\Delta\rho$ devient stationnaire. Lorsque $l_c = 10\langle d \rangle$, on note qu'il n'y a plus de trace de l'hétérogénéité initiale dans les trois échantillons. Ce constat prend aux environs de 330 MPa pour $\eta = 0$ et $\eta = 0,7$ et plus tôt pour $\eta = 0,4$ c'est-à-dire aux environs de 220 MPa. Il est à noter par ailleurs qu'à cette échelle le degré d'hétérogénéité de compacité pour les particules non convexes est environs deux fois supérieur à celui des disques. Au final, les échantillons de particules non convexes gardent les traces des hétérogénéités de compacités même pour une contrainte 1000 fois supérieure à la contrainte initiale.

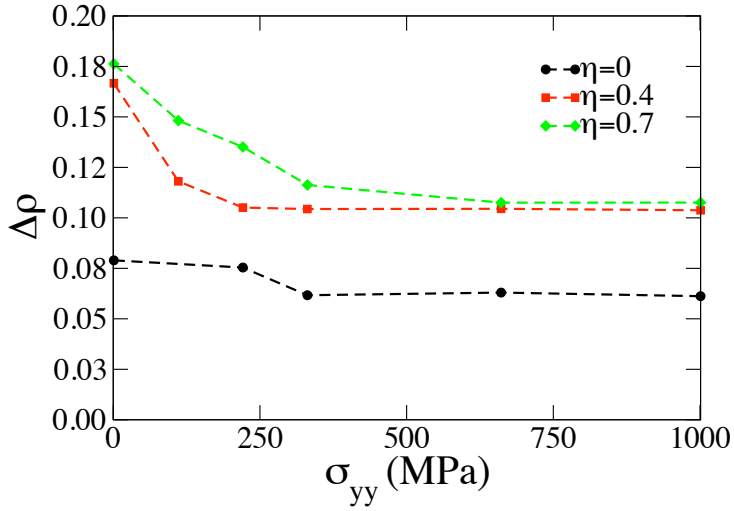


FIGURE *4.44* – *Evolution du degré d'hétérogénéité de compacité $\Delta\rho$ en fonction de la contrainte appliquée σ_{yy} pour les échantillons $\eta = 0$, $\eta = 0,4$ et $\eta = 0,7$. L'échelle d'analyse est de $l_c = 10\langle d \rangle$.*

4.6 Compression uniaxiale

Dans la première section de ce chapitre nous avons évalué la cohésion macroscopique au pic et dans l'état cisaillé en fonction de η par des essais de compression biaxiale. Dans l'état cisaillé, nous avons observé que la cohésion macroscopique fluctue en fonction de η contrairement à celle évaluée au pic qui croît de manière monotone. Nous avons argumenté que cette différence était liée à la répartition hétérogène des compacités qui, comme nous l'avons vu dans la section précédente, subsistent même au cours d'une compression œdométrique. On a pu remarquer, par ailleurs, que d'un échantillon à l'autre la géométrie des bandes de cisaillement est différente, qu'elles se réfléchissent sur les parois et peuvent atteindre des tailles comparables à celle de l'échantillon. Ces aspects liés en partie aux conditions aux limites montrent clairement que la cohésion de Coulomb est très sensible à l'état de compacité et nuancent l'interprétation que l'on peut faire de l'évolution de la cohésion macroscopique et l'influence du paramètre de non-convexité η dans l'état cisaillé.

Afin d'examiner l'influence des conditions aux limites, nous avons donc réalisé une autre série de simulations cette fois dans une géométrie de compression simple en considérant uniquement les échantillons cohésifs et en ôtant les parois latérales. Les échantillons sont ceux obtenus par compression isotrope sous une contrainte de 10 MPa avec frottement nul. Ces échantillons sont à une compacité maximale et initialement très homogène. En ôtant les deux parois latérales et en appliquant une contrainte verticale $\sigma_{yy}^0 = 10$ MPa sur la paroi supérieure, l'échantillon s'équilibre sans subir aucune déformation. L'indice de cohésion effective est $c_e = 1,89$ pour tous les échantillons.

Contrairement aux simulations de compression isotrope et compression biaxiale où le coefficient de frottement μ_w avec les parois est posé égal à zéro pour minimiser l'effet de paroi, dans ces essais de compression simple μ_w avec les deux parois inférieure et supérieure est posé égal à 1 pour empêcher le glissement de l'échantillon qui peut se produire par la moindre dissymétrie autour de l'axe vertical de l'échantillon. La compression est contrôlée en contrainte : la contrainte verticale σ_{yy} est incrémentée à chaque pas de temps de $10^{-4}\sigma_{yy}^0$.

Initialement, l'échantillon dans un état statistiquement homogène en contrainte (à l'échelle mésoscopique). La figure 4.45 montre l'état initial de l'échantillon à $\eta = 0,5$ avec le réseau des forces en compression et en traction. Les contacts en compression sont en moyenne orientés dans la direction verticale tandis que les contacts en traction sont majoritairement dans la direction horizontale bien que la contrainte latérale σ_{xx} soit nulle.

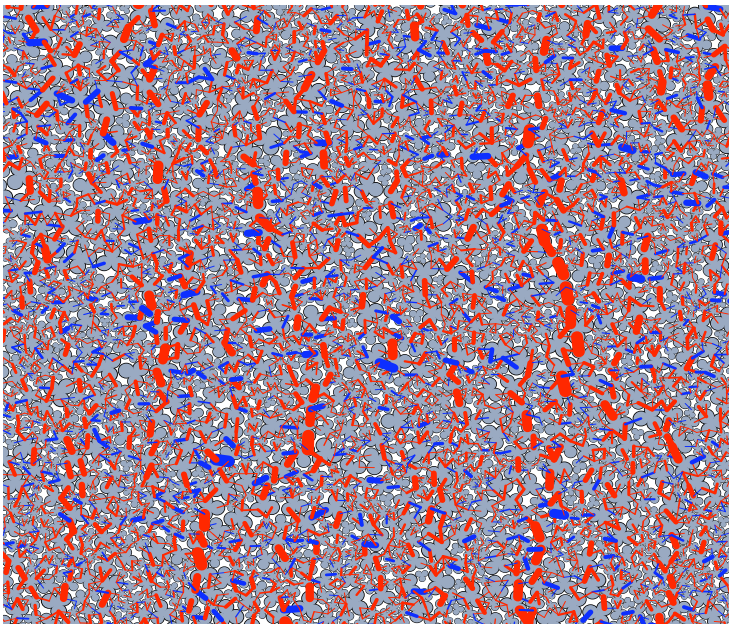


FIGURE *4.45* – *Visualisation des forces de compression (en rouge) et des forces de traction (en bleu) pour $\eta = 0,5$ à l'état initial de la compression simple. L'épaisseur des traits est proportionnelle à l'intensité de la force qu'ils représentent.*

Avec l'augmentation progressive de σ_{yy}, l'échantillon se ré-équilibre sans se déformer, mais un gradient de force apparaît des bords, où la contrainte est nulle, vers le centre où les chaînes

de force les plus intenses se concentrent, comme on peut le voir sur la figure 4.46. De même, les contacts en traction semblent s'orienter d'une manière de plus en plus isotrope. Ce gradient de contrainte traduit la mobilisation du frottement avec les parois. En effet, sous l'action de la contrainte croissante verticale, l'équilibre est assuré non seulement par un renforcement des chaînes de force verticales mais aussi par la mobilisation croissante des forces de frottement. Par symétrie, la mobilisation est nulle au centre et elle augmente vers les bords libres de l'échantillon.

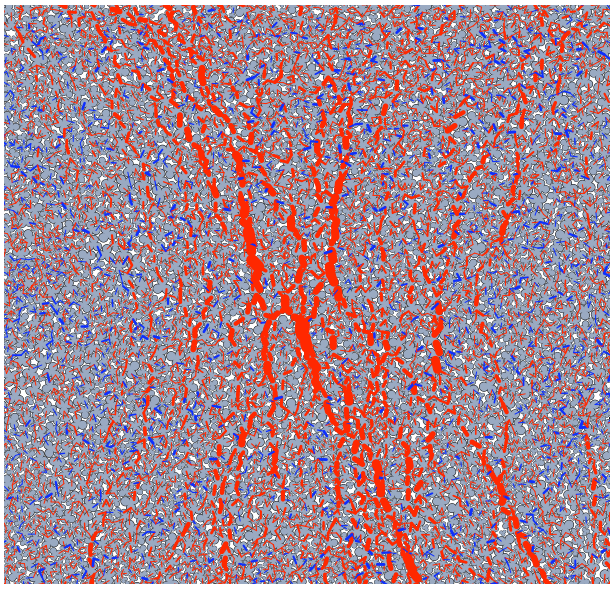


FIGURE *4.46* – *Visualisation de la localisation des forces normales de compression (en rouge) pour* $\eta = 0,5$. *Les traits bleus représentent les forces de traction, leur épaissseur est à l'intensité de la force qu'ils représentent.*

Cet effet de gradient est similaire à l'effet de Janssen dans une géométrie de silo. En appliquant un modèle simplifié de Janssen (avec des hypothèses telles que l'uniformité des contraintes dans une section vertical de l'échantillon), on peut montrer que la contrainte décroît exponentiellement du centre vers le bord. Mais, comme on l'a vu sur la figure 4.46, l'état de contrainte est très hétérogène à l'échelle mésoscopique et la mobilisation du frottement n'est pas connue. L'échantillon cède pour une contrainte seuil et subit d'abord une déformation homogène qui se transforme ensuite rapidement en rupture en mode I, c'est à dire en traction, comme on peut le voir sur la figure 4.47, et prend enfin la forme d'une rupture en mode II, c'est à dire par cisaillement, avec l'apparition de deux bandes de cisaillement qui passent par les coins de l'échantillon. L'échantillon se divise ainsi en quatre morceaux triangulaires compacts. Le raccourcissement vertical rapproche les deux triangles verticaux qui s'écrasent progressivement l'un contre l'autre alors que les deux triangles horizontaux se désintègrent par couches successives.

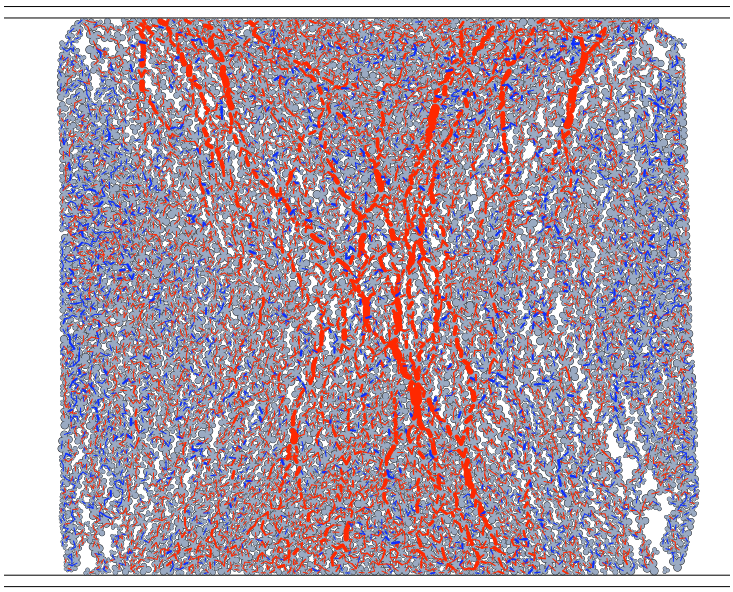


FIGURE 4.47 – *Rupture de l'échantillon $\eta = 0,5$ en compression simple. Les traits rouges et bleus correspondent respectivement aux forces de compression et de traction. L'épaisseur des traits est proportionnelle à l'intensité de la force qu'ils représentent.*

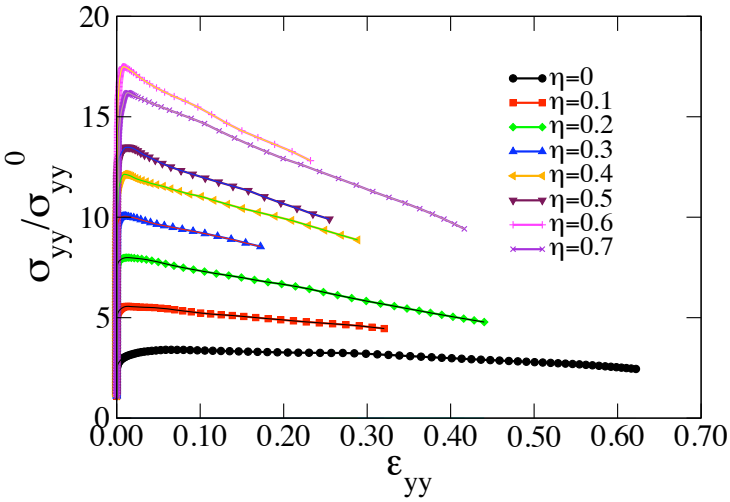


FIGURE 4.48 – *Evolution de la contrainte σ_{yy} en fonction de la déformation axiale ε_{yy}.*

La figure 4.48 montre $\sigma_{yy}/\sigma^0_{yy}$ en fonction de la déformation ε_{yy} pour les différentes valeurs de η. Toutes les courbes présentent un saut de la contrainte axiale sans déformation, suivi d'un pic de contrainte atteint après une faible déformation homogène et enfin une chute progressive pendant la rupture. Le seuil et le pic de contrainte augmentent avec η jusqu'à $\eta = 0,6$. Mais, pour une raison qui n'a pas pu être analysée, le pic pour $\eta = 0,7$ se situe en dessous de celui pour $\eta = 0,6$.

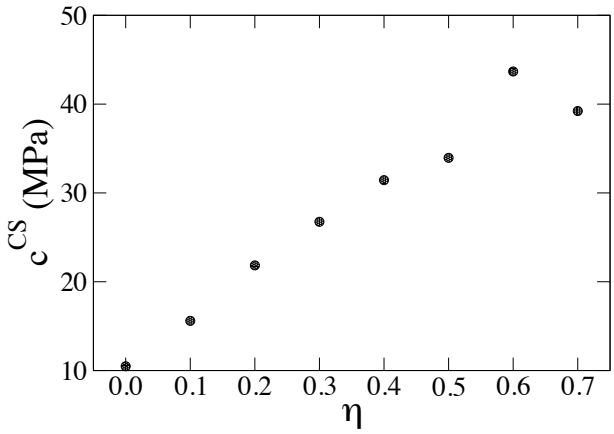


FIGURE *4.49* – *Evolution de la cohésion macroscopique c^{CS} obtenue par des essais de compression simple sur les différents échantillons η.*

Connaissant la contrainte à rupture, il est possible d'estimer la cohésion de Coulomb c dans la phase initiale de la déformation et avant que la déformation ne deviennent hétérogène. Bien que le frottement avec les parois du haut et du bas joue un rôle majeur dans l'équilibre du système, la cohésion interne du matériau domine dans une bonne partie (la partie centrale) de l'échantillon. En supposant que la direction principale majeure des contraintes coïncide avec l'axe de l'échantillon, les valeurs propres sont $\sigma_1 = \sigma_{yy}$ et $\sigma_2 = 0$. Par conséquent, nous avons $q/p = 1$, et donc d'après le critères de Mohr-Coulomb, c^{CS} dans une géométrie de compression simple (CS) est donnée par

$$c^{CS} = \frac{1}{2}\sigma_{yy}^{rupt}\frac{1-\sin\varphi}{\cos\varphi}. \tag{4.4}$$

Pour calculer cette cohésion, nous avons pris les valeurs de φ obtenu au pic de q/p par compression biaxiale sur les matériaux non-cohésifs. La figure 4.49 montre c^{CS} en fonction de η. On voit que la cohésion augmente presque linéairement avec η sauf pour le dernier point. Il est remarquable que cette cohésion est pratiquement 10 fois plus élevée que la cohésion obtenue par cisaillement simple au pic de contrainte. Ces valeurs élevées de la cohésion reflètent probablement la grande compacité initiale des échantillons. Mais elle peut également surestimer la cohésion dans la mesure ou le frottement avec les parois n'a pas été pris en compte dans son calcul. Il est clair que les hétérogénéités de contrainte sont autant gênantes dans la géométrie de compression simple que les hétérogénéités de cisaillement interne dans la géométrie de compression biaxiale.

Pour illustrer ici l'organisation complexe des forces, nous avons présenté sur la figure 4.50 l'évolution de l'anisotropie de texture a_c^- restreinte aux seuls efforts de traction en fonction de la déformation axiale ε_{yy} pour les différents échantillons. La valeur négative et élevée en valeur absolue de a_c^- correspond aux contacts en traction et orientés préférentiellement suivant la direction d'extension. Mais elle diminue rapidement en valeur absolue et s'annule lorsque l'échantillon commence à se déformer, conformément à l'impression visuelle des figures 4.51 et 4.52.

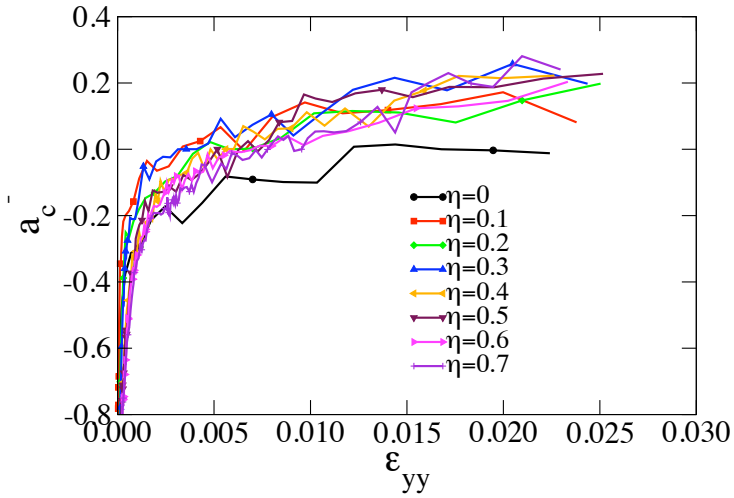


FIGURE *4.50* – *L'anisotropie des contacts en traction en fonction de la déformation axiale pour différents degrés de non-convexité.*

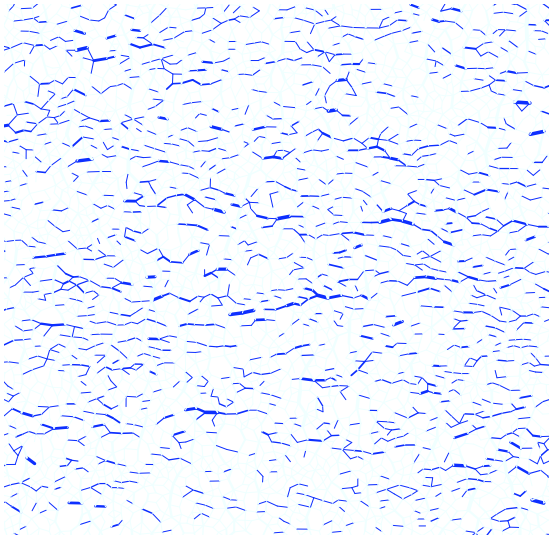


FIGURE *4.51* – *Réseau de forces en traction au début de l'essai de compression simple* ($\varepsilon_{yy} < 0,001$) *pour l'échantillon* $\eta = 0,1$.

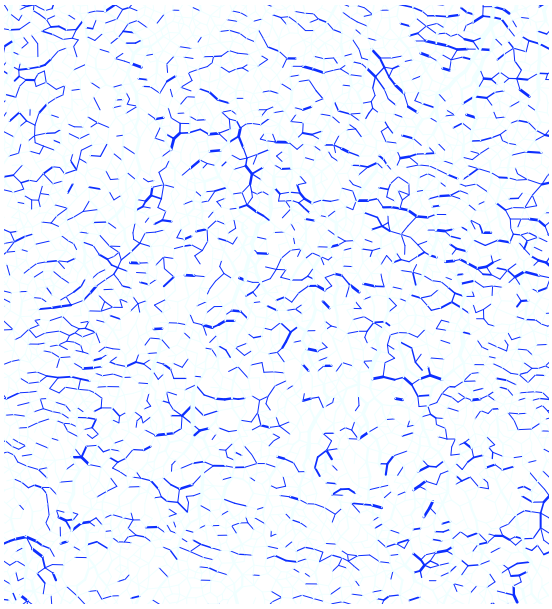


FIGURE *4.52* – *Réseau de forces en traction de l'échantillon* $\eta = 0,1$ *pour* $\varepsilon_{yy} = 0,005$.

Il est aussi remarquable que a_c^- devient positive et, sauf pour $\eta = 0$, augmente avec la déformation. En d'autres termes, l'orientation privilégiée des contacts en traction s'aligne sur celle des contacts en compression. Ce comportement reflète la déformation complexe des échantillons et la localisation du cisaillement dans des bandes symétriques par rapport à l'axe des échantillons. Remarquons aussi que les valeurs de a_c^- sont assez proches pour toutes les valeurs de $\eta > 0$.

Les figures 4.53 et 4.54 montrent respectivement la proportion de contacts en traction k^- et le nombre de connectivité correspondant Z_c^- entre 0 et 2,5% de déformation axiale. En dépit des fluctuations, il n'y a pas d'évolution notable de ces deux quantités sur la plage de déformation considérée. Il est intéressant de noter que plus les particules sont non convexes, moins la proportion des contacts en traction au sein des empilements est élevée. Cette observation est cohérente avec le rôle des contacts en traction qui assurent la cohésion du matériau. L'équilibre des particules non convexes étant assurée en grande partie par leur connectivité plus importante, la mobilisation de la cohésion est moins cruciale. D'ailleurs, on voit que la connectivité augmente avec η.

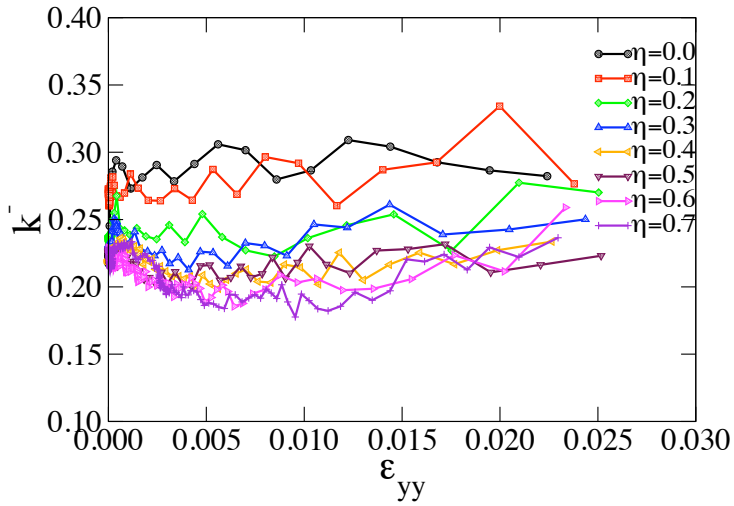


FIGURE *4.53* – *Evolution de la proportion des contacts en traction k^- avec la déformation axiale ε_{yy}.*

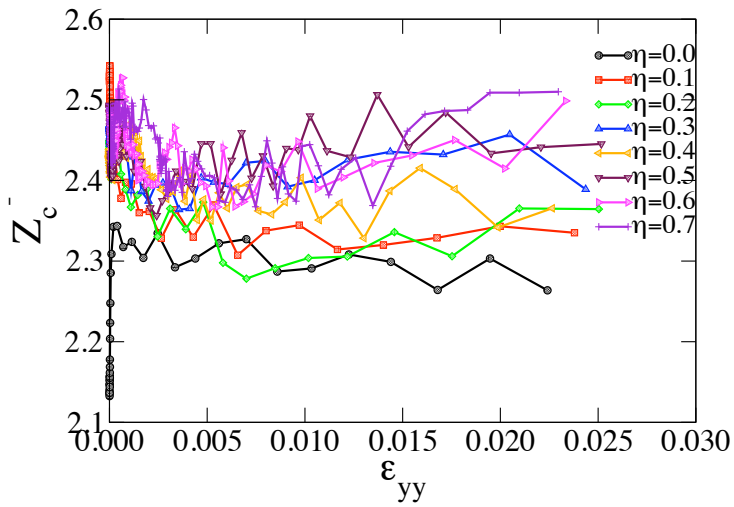


FIGURE *4.54* – *Evolution du nombre de connectivité Z_c^- pour les contacts en traction en fonction de la déformation axiale ε_{yy}.*

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons analysé la cohésion des assemblages granulaires composés d'agrégats non convexes interagissant par contacts frottants et une loi de force d'adhésion simple. L'état de cohésion de ces assemblages, cisaillés d'abord par une compression biaxiale, évolue avec le cisaillement. La cohésion de Coulomb peut être évaluée à des points de référence tels que le pic de contrainte déviatorique et l'état critique. Les résultats indiquent que la cohésion au pic de contrainte augmente avec la non-convexité des agrégats. La compacité présente une dépendance non-monotone similaire au cas non-cohésif par rapport à la non-convexité.

L'état critique n'étant pas totalement atteint à 50% de déformation en raison du développement de fortes hétérogénéités mésoscopiques liées à la localisation du cisaillement dans des bandes, la dépendance de la cohésion évaluée vis-à-vis de la non-convexité est fortement tributaire des singularités des schémas de distribution des compacités au sein des échantillons. En interprétant les liens cohésifs dans nos échantillons à ceux d'un compact fritté, ce résultat est cohérent avec l'observation expérimentale que la tenue mécanique de ces compacts est très sensible aux hétérogénéités de compacité.

Ce constat nous a conduit à étudier plus en détail les hétérogénéités de compacité locales en fonction de l'échelle d'analyse. Une variabilité de l'ordre de 0,1 est ainsi trouvée à une échelle de 15 diamètres moyens pour les assemblages d'agrégats les plus non convexes. Ces analyses ont révélé que les échantillons numériques cohésifs présentent nécessairement un fort effet de paroi et qu'il convient d'étudier la cohésion par des essais de compression simple afin d'éviter à la fois ces effets et les aléas du processus complexe d'évolution des bandes de cisaillement qui contrôlent l'état de compacité du matériau. Des essais de compression simple ont ainsi été menés sur les différents échantillons de compacités maximales et ont permis de mettre en évidence une dépendance linéaire de la cohésion par rapport à la non-convexité.

Enfin, par des simulations de compression œdométrique nous avons mis en évidence une dépendance logarithmique de la compacité par rapport à la contrainte de compression. Cette loi de compaction est expliquée par la diminution de la cohésion effective du fait de l'augmentation de la pression moyenne. Nous avons aussi montré que η influait peu sur le coefficient de compression des échantillons. Plusieurs essais de compression œdométrique réalisés pour différents échantillon cohésifs ont permis de mettre en évidence la persistance des hétérogénéités de compacité même pour de très grandes contraintes appliquées.

Conclusion générale

L'objectif des travaux de thèse présentés dans ce mémoire était de proposer un modèle granulaire des poudres d'UO_2 tenant compte de leurs particularités en vue d'une étude numérique systématique de leurs propriétés rhéologiques et microstructurales. Les simulations, les analyses et les interprétations des résultats numériques présentés dans ce mémoire découlent d'une méthodologie qui a été employée tout au long de cette thèse. Cette méthodologie, à caractère générique est applicable autant à une étude bidimensionnelle qu'à une étude tridimensionnelle et elle repose sur les étapes principales suivantes :

- la définition d'un modèle physique reproduisant les caractéristiques physiques (morphologie, granulométrie, ...) des particules et la nature de leurs interactions,
- la mise en données du problème par le choix d'un jeu de paramètres (densité des particules, coefficient de frottement, précisions sur les lois d'interactions et les objets concernés, pas de temps, précision du calcul, ...),
- la définition d'un système de conditions aux limites et d'un mode de préparation des assemblages granulaires,
- l'application de l'algorithme de dynamique des contacts et calcul,
- la gestion des données de simulations, le développement d'un post-traitement adapté,
- l'analyse et l'interprétation physique des résultats.

La définition du modèle physique est une étape primordiale dans la démarche. Elle dépend fortement des attentes liées à la problématique posée, et repose sur un certain nombre d'hypothèses. Compte tenu des données expérimentales et de l'analyse critique de la littérature nous avons proposé un modèle original à l'échelle des agrégats de cristallites, l'aspect dendritique des agrégats ayant été modélisé par le choix des formes non convexes. Enfin, les agrégats ont été considérés comme des particules rigides et insécables. Les propriétés physico-chimiques de surface des poudres d'UO_2 ont été englobées dans un modèle de cohésion à énergie de surface unique caractérisé par une adhésion réversible au contact. Pour traiter de l'effet de la non-convexité, nous avons construit un paramètre géométrique de non-convexité η, permettant de simuler l'effet d'une évolution graduelle du degré de non-convexité des particules sur le comportement local et macroscopique des empilements. La forme non convexe des agrégats a été réalisée à partir d'une construction géométrique simple qui repose en 2D sur un assemblage rigide de trois disques de même taille, interpénétrés et à symétrie d'ordre 3. En 3D, la définition de η reste identique mais les agrégats ont cette fois-ci été construits par assemblage rigide de quatre sphères de même rayon, interpénétrées et à symétrie d'ordre 4. Les caractéristiques physiques telles que la surface, la densité ou encore le volume des particules ont été calculées explicitement en 2D, et approchées en 3D en fonction de η. La réalisation de l'étude en 2D permet de prendre en compte des systèmes granulaires de grandes tailles tout en ayant des temps de calcul corrects. L'objectif des simulations 3D réalisées au cours de cette thèse étaient de valider les tendances observées en 2D.

La méthode de dynamique des contacts, a été employée pour la préparation des échantillons par compression isotrope ou uni-axiale, en vue de leur caractérisation mécanique par compression biaxiale ou compression simple. Les travaux réalisés ont permis d'obtenir des éléments de réponse à des questions inédites dans le domaine de la mécanique numérique des milieux granulaires. Ces questions sont relatives d'une part aux problèmes d'empilement par compac-

tion uni-axiale ou isotrope et d'autre part à la rhéologie en cisaillement et au comportement à rupture d'empilements de particules non convexes et/ou cohésives.

En ce qui concerne la compaction d'un empilement de particules non convexes, un résultat marquant de ces études est l'observation d'une évolution non-monotone de la compacité en fonction de la non-convexité des agrégats aussi bien lors des simulations 2D que 3D. Ce comportement est observé pour des empilements denses et isostatiques préparés par une compression isotrope à frottement nul entre agrégats. La distribution des forces ainsi que la connectivité sont contrôlées plutôt par le caractère isostatique du système et n'évoluent donc pas avec la non-convexité. Par ailleurs, l'évolution non-monotone de la compacité avec la non-convexité s'explique par une compétition entre la perte de porosité due à la diminution de la taille des pores formés entre les bords convexes des agrégats, et le gain de porosité due à l'augmentation de la taille des pores formés entre les bords convexes et non convexes des agrégats. Un autre effet qui semble jouer est le remplissage partiel de moins en moins efficace du volume libre des agrégats par enchevêtrement. Le modèle phénoménologique introduit à ce niveau permet d'obtenir un bon ajustement des valeurs de la compacité observées en 2D. Une autre partie des travaux a concerné l'évaluation de l'effet de la non-convexité et de la cohésion dans le processus de compaction uni-axiale.

Nous avons notamment montré que la compacité des échantillons, caractérisée par l'indice des vides, augmente logarithmiquement avec la contrainte imposée. Nos analyses indiquent que cette compaction est essentiellement due à la réduction de la cohésion effective définie comme le rapport entre la force d'adhésion et la force de compression moyenne par particule. Le coefficient de compressibilité est ainsi indépendant de la non-convexité des particules.

Il est également remarquable que les hétérogénéités de compacité initialement présentes au sein les échantillons ne s'effacent que partiellement au cours d'une compaction uniaxiale. Une analyse locale de ces hétérogénéités par analyse d'images couplée à une méthode Monte-Carlo, a permis de montrer que cette variabilité spatiale de la compacité est d'autant plus importante que les particules sont non convexes. Par exemple, sur une échelle de longueur de 15 diamètres moyens de particules, les empilements constitués d'agrégats dont le degré de non-convexité est égal à 0,7 présentent une variabilité de compacité de l'ordre du dixième. Ce résultat est intéressant dans la mesure où il corrobore le fait observé que la distribution des compacités dans les ébauches crues est déterminante pour la qualité des compacts obtenus à l'issue du frittage. En effet, il est bien connu que de fortes hétérogénéités de compacité présentes lors de la phase de mise en forme entraînent des différentiels de consolidation lors du frittage.

En ce qui concerne la rhéologie des compacts denses et isotropes, nous avons montré qu'en l'absence de cohésion, l'angle de frottement interne augmente considérablement avec le degré de non-convexité de la forme des particules, mais montre une tendance à saturer aux grandes valeurs de la non-convexité. De plus, les empilements cisaillés à différents instants d'évolution présentent la même évolution de la compacité en fonction de η que celle des empilements initiaux. Il est aussi à noter que l'augmentation de l'angle de frottement interne a également été observée dans nos simulations 3D et que la compacité passe par une valeur maximale lorsque la non convexité augmente. Ainsi, des empilements de même compacité macroscopique peuvent

présenter une résistance au cisaillement très différente selon le degré de non-convexité des particules qui le composent. C'est un résultat observé expérimentalement même si le degré de non-convexité des poudres d'UO_2 ne peut être évalué que qualitativement.

Pour identifier les caractéristiques microstructurales qui conduisent au comportement macroscopique observé, nous avons analysé par une étude statistique de la microstructure l'effet d'imbrication des agrégats lorsque l'empilement est soumis à un cisaillement. Cet effet se traduit, d'une part, par une augmentation de la connectivité des particules avec pratiquement le même nombre de coordination en fonction de la non-convexité et, d'autre part, par le développement d'une structure anisotrope des réseaux de contacts et de forces. La résistance au cisaillement au pic (maximum du déviateur de contrainte normalisé) et dans l'état critique (déviateur de contrainte normalisé constant lorsque la déformation augmente) est correctement ajustée par la demi-somme des anisotropies de texture et de forces normales et tangentielles avec une prédominance de l'anisotropie de texture. D'une manière générale, la microstructure est de plus en plus hétérogène lorsque la non-convexité augmente. La signature de cette hétérogénéité est surtout observée sur les densités de probabilité des forces de contact. Ces densités présentent une distribution exponentielle pour les forces fortes (supérieures à la force moyenne) et une distribution presque uniforme ou en loi de puissance pour les forces faibles (inférieures à la force moyenne). Lorsque la non-convexité augmente, le caractère bimodal de la distribution des forces s'accroit ; l'intensité des forces les plus fortes et le nombre de forces faibles augmentent au détriment du nombre des forces proches de la force moyenne.

Enfin, l'adhésion entre les particules contribue à augmenter la cohésion macroscopique de Coulomb des empilements d'autant plus que la non-convexité des agrégats est importante. Mais, en étudiant différentes configurations, nous avons mis en évidence l'extrême sensibilité de ce paramètre aux hétérogénéités mésosocopiques (échelle d'une dizaine de diamètres moyens de particules) induites notamment par la localisation du cisaillement dans des bandes. C'est pourquoi, les valeurs de la cohésion au pic de contrainte dans les essais de compression biaxiale augmentent d'une manière plus régulière avec l'adhésion que dans les états de cisaillement plus développés. Afin d'évaluer la cohésion des empilements sans l'effet amplificateur des parois latérales, nous avons réalisé des essais de compression simple sur les états isotropes de compacité maximale. Nous avons trouvé que la cohésion macroscopique au seuil de rupture, où le matériau ne comporte encore aucune trace de localisation du cisaillement ou des forces, augmente de manière quasi linéaire avec la non-convexité. Cependant, une localisation des forces de compression apparaît sous la forme d'un gradient du centre, où les chaînes de forces les plus intenses sont observées, vers les bords où les forces s'annulent en l'absence d'une contrainte de confinement. Ces gradients sont dus à la mobilisation du frottement effectif entre l'échantillon et les parois supérieure et inférieure de la cellule de charge. Concernant la texture, il apparaît clairement que l'anisotropie des contacts en traction évolue fortement avec la déformation axiale. Même si elle est maximale dans la direction d'extension au début de la compression, elle s'aligne rapidement avec la direction des contacts en compression, ce qui montre la complexité de la texture dans une géométrie sans confinement.

Ainsi, les études réalisées au cours de ce travail de thèse ont permis de mettre en évidence

certains effets non-triviaux (saturation de la résistance au cisaillement, variation non-monotone de la compacité, sensibilité de la cohésion macroscopique vis-à-vis de la variabilité spatiale de la compacité, ...) de la non-convexité de forme des agrégats par rapport au comportement et à la microstructure des assemblages granulaires. Le caractère générique du paramètre η permet d'appliquer la même méthodologie à l'étude des assemblages de particules avec des formes variées telles que celles étudiées dans le cadre du projet CEGEO. Cette possibilité ouvre de nombreuses perspectives dans la mesure où l'effet de la forme des particules sur la rhéologie des matériaux granulaires reste encore largement inexploré.

A court terme, pour nos agrégats non convexes, il serait pertinent de caractériser la cinématique locale des empilements, en particulier les rotations des agrégats. En effet, le phénomène de réarrangement implique plusieurs types de mouvement : le glissement relatif entre agrégats que nous avons étudié, mais aussi les rotations d'agrégats seuls ou agglomérés lorsque l'on tient compte de la cohésion. La finalité est d'évaluer le poids des rotations sur les propriétés rhéologiques des empilements telles que la dilatance ou encore la mobilisation du frottement interne. Par ailleurs, afin de mettre en évidence des effets d'engrènement pour simuler des blocages en translation et en rotation plus marqués, ainsi que des mouvements d'ensemble, il pourrait être envisageable de complexifier les formes actuelles des agrégats en y ajoutant des branches (ramifications) pour se rapprocher de l'aspect dendritique des agrégats de cristallites des poudres d'UO_2.

En ce qui concerne la cohésion nous avons vu que le comportement des empilements pouvait être qualifié de comportement ductile en raison de la réversibilité du modèle d'adhésion au contact. Il serait intéressant de déterminer la contrainte à rupture des empilements de manière univoque en tenant compte d'un modèle d'adhésion irréversible. Pour les essais de compression simple tels que conduits ici, nous avons vu qu'il est nécessaire d'apporter une correction à l'évaluation de la contrainte à rupture et de ce fait à la cohésion interne des empilements. Une expérience intéressante serait de réaliser des essais de compression simple sur différents états de consolidation afin de voir l'évolution de la contrainte à rupture avec la compacité ou encore avec la contrainte de consolidation (précompression) en fonction de η. Par ailleurs, il serait intéressant d'illustrer le comportement anisotrope en mesurant la contrainte à rupture des compacts dans la direction orthogonale à la direction de précompression et d'évaluer l'écart entre les mesures en fonction de η.

Les résultats concernant l'évolution de la compacité et la résistance au cisaillement, obtenus dans une configuration tridimensionnelle par essai triaxial sont en accord avec les résultats de l'étude bidimensionnelle. A moyen terme, il est encourageant et fortement envisageable de poursuivre ces études dans ce cadre tridimensionnel pour une meilleure représentativité des simulations par rapport au comportement du matériau réel et de se placer dans une perspective de validation expérimentale des résultats numériques. La prise en compte de la polydispersité en taille des particules serait un plus pour tendre, plus encore, vers les caractéristiques des particules d'UO_2.

Bibliographie

[1] I. Agnolin and J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings. i. assembling process, geometry, and contact networks. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 76(6-1) :061302, Dec 2007.

[2] I. Agnolin and J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings. ii. compression and pressure cycles. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 76(6-1) :061303, Dec 2007.

[3] I. Agnolin and J.-N. Roux. Internal states of model isotropic granular packings. iii. elastic properties. *Physical Review E*, 76(6) :061304, December 2007.

[4] E. Azema and F. Radjai. Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Physical Review E*, 81(5, Part 1), MAY 2010.

[5] E. Azema, F. Radjai, R. Peyroux, and G. Saussine. Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 76(1 Pt 1) :011301, Jul 2007.

[6] E. Azema, F. Radjai, and G. Saussine. Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles. *Mechanics of Materials*, 41(6) :729–741, 2009.

[7] G. Bartels, T. Unger, D. Kadau, D. E. Wolf, and J. Kertesz. The effect of contact torques on porosity of cohesive powders. *Granular Matter*, 7(2-3) :139–143, 2005.

[8] S.J . Blott and K. Pye. Particle shape : a review and new methods of characterization and classification. *Sedimentology*, 55 :31–63, 2008.

[9] E. T. Bowman, K. Soga, and W. Drummond. Particle shape characterisation using fourier descriptor analysis. *Geotechnique*, 51(6) :545–554, August 2001.

[10] I. Bratberg, F. Radjai, and A. Hansen. Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds. *Physical Review E*, 66(3), 2002.

[11] B. Cambou. From global to local variables in granulars media. In C. Thornton, editor, *Powders and Grains 93*, pages 73–86. Rottterdam, 1967 Balkema, 1993.

[12] B. Cambou and A. Danescu. *Multiscale Techniques for Granular Materials*, chapter 3, pages 101–145. Wiley, New-York, 2009.

[13] L.C.Y. Chan and N.W. Page. Particle fractal and load effects on internal friction in powders. *Powder Technology*, 90 :259–266, 1997.

[14] J.-L. Chermant, P. Odier, D. Jeulin, J.-P. Jernot, P. Lalanne, H. Van Damme, G. Nouet, and J.-Y. Laval. *Caractérisation des poudres et des céramiques*. FORCERAM. HERMES, 1992.

[15] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. Discrete numerical-model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1) :47–65, 1979.

[16] Frédéric da Cruz, Sacha Emam, Michaël Prochnow, Jean-Noël Roux, and François Chevoir. Rheophysics of dense granular materials : Discrete simulation of plane shear flows. *Phys. Rev. E*, 72(2) :021309–, August 2005.

[17] J. Danroc. *Evolution superficielle et aptitude au compactage des poudres d'oxydes d'uranium*. PhD thesis, INPG (Grenoble), 1982.

[18] P. Dantu. étude statistique des forces intergranulaires dans un milieu pulvérulent. *Géotechnique*, 18 :50, 1968.

[19] G. de Saxcé, J. Fortin, and O. Millet. About the numerical simulation of the dynamics of granular media and the definition of the mean stress tensor. *Mechanics Of Materials*, 36(12) :ASME ; ASCE ; Soc Engn Sci, December 2004.

[20] G.W Delaney and P.W. Cleary. The packing properties of superellipsoids. *Europhysics letters*, 89, 2010.

[21] J. Delenne, V. Topin, and F. Radjai. Failure of cemented granular materials under simple compression : experiments and numerical simulations. *Acta Mechanica*, 205 :9–21, 2009. 10.1007/s00707-009-0160-9.

[22] J.-Y. Delenne, F. Soulié, M.S. El Youssoufi, and F. Radjai. Compressive strength of an unsaturated granular material during cementation. *Powder Technology*, 208(2) :308–311, March 2011.

[23] J.Y. Delenne, V. Topin, V. Richefeu, and F. Radjai. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Numerical Modeling of Cohesive Interactions, pages 263–297. Wiley-ISTE, 2011.

[24] J. Desrues. In J.Benoit et R.H. Borden F. Darve, Y. Meimon, editor, *Proceedings of the joint US-France workshop in recent advances in geomechanics, geotechnical and geoenvironmental engineering*, pages 47–58, Paris, 1993.

[25] A. Donev, I. Cisse, D. Sachs, E. Variano, F. H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato, and P. M. Chaikin. Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science*, 303(5660) :990–993, 2004.

[26] A. Donev, R. Connelly, F. H. Stillinger, and S. Torquato. Underconstrained jammed packings of nonspherical hard particles : Ellipses and ellipsoids. *Physical Review E*, 75(5), 2007.

[27] A. Donev, F. H. Stillinger, P. M. Chaikin, and S. Torquato. Unusually dense crystal packings of ellipsoids. *Physical Review Letters*, 92(25), 2004.

[28] A. Drescher and G. de Josselin de Jong. Photoelastic verification of a mechanical model for the flow of a granular material. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*,

20(5) :337–340, October 1972.

[29] F. Dubois. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Numerical modeling of granular media composed of polyhedral particles, pages 233–262. Wiley-ISTE, 2011.

[30] J. Duran. *Sables, poudres et grains*. Eyrolles, 1997.

[31] S. F. Edwards. The rheology of powders. *Rheologica Acta*, 29(6) :493–499, November 1990.

[32] N. Estrada, A. Taboada, and F. Radjai. Shear strength and force transmission in granular media with rolling resistance. *Physical Review E*, 78(2), 2008.

[33] Nicolas Estrada, Emilien Azéma, Farhang Radjai, and Alfredo Taboada. Identification of rolling resistance as a shape parameter in sheared granular media. *Phys. Rev. E*, 84(1) :011306–, July 2011.

[34] J.F. Favier, M.H. Abbaspour-Fard, M. Kremmer, and A.O. Raji. Shape representation of axi-symmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles. *Engineering Computations*, 16 :467–480, 1999.

[35] J. Fourcade. *Etude de la mise en forme par pressage uni-axial des poudres de combustibles nucléaires*. PhD thesis, Université Montpellier 2, 2002.

[36] GDR-MiDi. On dense granular flows. *European Physical Journal E*, 14(4) :341–65, 2004.

[37] P. Guo and X. Su. Shear strength, interparticle locking, and dilatancy of granular materials. *Can. Geotech. J.*, 44 :579–591, 2007.

[38] T.C. Halsey and A.J. Levine. How sandcastles fall. *Phys.Rev.Letts.*, 80(14) :3141–3144, 1998.

[39] T. Inoue and H. Matzke. Fracture surface energy of UO_2 and ThO_2 containing additives. *Journal of Nuclear Science and Thechnology*, 17 :908–912, 1980.

[40] H. M. Jaeger and Sidney R. Nagel. Physics of the granular state. *Science*, 255(5051) :1523–1531, March 1992.

[41] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 177 :235–257, 1999.

[42] M. Jean. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Contact Dynamics Method, pages 27–65. Wiley, New-York, 2011.

[43] R. P. Jensen, P.J. Bosscher, M.E. Plesha, and T.B. Edil. Dem simulation of granular media-structure interface : Effects of surface roughness and particle shape. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 23 :531–547, 1999.

[44] P. Jop, Y. Forterre, and O. Pouliquen. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 441(7094) :727–730, June 2006.

[45] D. Kadau, G. Bartels, L. Brendel, and D. E. Wolf. Contact dynamics simulations of compacting cohesive granular systems. *Computer Physics Communications*, 147(1-2) :190–193, 2002.

[46] I. Kock and K. Huhn. Influence of particle shape on the frictional strength of sediments : A numerical case study. *Sedimentary Geology*, 196 :217–233, 2007.

[47] C. M. Kong and J. J. Lannutti. Effect of agglomerate size distribution on loose packing fraction. *Journal Of The American Ceramic Society*, 83(9) :2183–2188, 2000.

[48] C. M. Kong and J. J. Lannutti. Localized densification during the compaction of alumina granules : The stage i-ii transition. *Journal Of The American Ceramic Society*, 83(4) :685–690, April 2000.

[49] K. Kurosaki, Y. Saito, H. Muta, M. Uno, and S. Yamanaka. Nanoindentation studies of UO_2 and (U,Ce)o_2. *Journal of Alloys and Compounds*, 381 :240–244, 2004.

[50] S. Luding. Collisions & contacts between two particles. In H.J.Herrmann *et al.*, editor, *Physics of Dry Granular Media*, pages 285–304. Kluwer Academic Publisher, 1998. Printed in the Netherlands.

[51] S. Luding. Shear flow modeling of cohesive and frictional fine powder. *Powder Technology*, 158(1-3) :45–50, October 2005.

[52] K. Maeda, H. Sakai, A. Kondo, T. Yamaguchi, M. Fukuma, and E. Nukudani. Stress-chain based micromechanics of sand with grain shape effect. *Granular Matter*, 2010.

[53] V. Magnanimo and S. Luding. A local constitutive model with anisotropy for ratcheting under 2d axial-symmetric isobaric deformation. *Granular Matter*, 13 :225–232, 2011. 10.1007/s10035-011-0266-3.

[54] K. Mair, Kevin M. Frye, and C. Marone. Influuence of grain characteristics on the friction of granular shear zones. *Journal of geophysical research*, 107, 2002.

[55] C. L. Martin. Unloading of powder compacts and their resulting tensile strength. *Acta Materialia*, 51(15) :4589–4602, September 2003.

[56] C. L. Martin, D. Bouvard, and G. Delette. Discrete element simulations of the compaction of aggregated ceramic powders. *Journal Of The American Ceramic Society*, 89(11) :3379–3387, 2006.

[57] C. L. Martin, D. Bouvard, and S. Shima. Study of particle rearrangement during powder compaction by the discrete element method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(4) :667–693, April 2003.

[58] C.L. Martin and D. Bouvard. Study of the cold compaction of composite powders by the discrete element method. *Acta Materialia*, 51(2) :373–386, January 2003.

[59] S. McNamara. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Molecular Dynamics Method, pages 1–26. Wiley-ISTE, 2011.

[60] M.N. Mehrabadi, S Nemat-Nasser, and M. Oda. On statistical description of stress and fabric in granular materials. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 6 :95–108, 1982.

[61] A. Mehta. *Granular Physics*. Cambridge University Press, 2007.

[62] A. A. Mirghasemi, L. Rothenburg, and E. L. Matyas. Influence of particle shape on engineering properties of assemblies of two-dimensional polygon-shaped particles. *Geotechnique*, 52(3) :209–217, 2002.

[63] J.K. Mitchell and K. Soga. *Fundamentals of Soil Behavior*. Wiley, New-York, NY, 2005.

[64] J. J. Moreau. Some numerical-methods in multibody dynamics - application to granular-materials. *European Journal of Mechanics A-Solids*, 13 :93–114, 1994.

[65] J. J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. In D. E. Wolf and P. Grassberger, editors, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, pages 233–247, Singapore, 1997. World Scientific.

[66] J.J. Moreau. Friction less unilateral constraints and inelastic shocks. *Comptes-rendus des séances de l'Academie des sciences*, 296 :1473–1476, 1983.

[67] J.J. Moreau. *Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics*, volume 302 of *International Centre for Mechanical Sciences, Courses and Lectures*. Springer, Vienna, 1988.

[68] R. M. Nedderman. *Statics and kinematics of granular materials*. Cambr. Univ. Press, Cambridge, 1992.

[69] T. T. Ng. Particle shape effect on macro- and micro-behaviors of monodisperse ellipsoids. *International Journal For Numerical And Analytical Methods In Geomechanics*, 33(4) :511–527, 2009.

[70] C. Nouguier-Lehon, B. Cambou, and E. Vincens. Influence of particle shape and angularity on the behaviour of granular materials : a numerical analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 27(14) :1207–1226, 2003.

[71] C. Nouguier-Lehon, E. Vincens, and B. Cambou. Structural changes in granular materials : The case of irregular polygonal particles. *International Journal Of Solids And Structures*, 42(24-25) :6356–6375, 2005.

[72] M. Oda, M. Nemat-Nasser, and J. Konishi. Strees-induced anisotropy in granular masses. *Soils Found.*, 25[3] :85–97, 1985.

[73] M. Oda and T. Sudoo. Fabric tensor showing anisotropy of granular soil and its application to soil plasticity. In Biarez and Gourvès, editors, *Powders and Grains 89*, pages 155–161. Rotterdam, 1967 Balkema, 1989.

[74] S Oda, M. Nemat-Nasser, and M. Mehrabadi. A statistical study of fabric in a random assembly of spherical granules. *International Journal For Numerical And Analytical Methods In Geomechanics*, 6 :77–94, 1982.

[75] H. Ouadfel and L. Rothenburg. 'stress-force-fabric' relationship for assemblies of ellipsoids. *Mechanics Of Materials*, 33(4) :201–221, 2001.

[76] A. A. Pena, R. Garcia-Rojo, and H. J. Herrmann. Influence of particle shape on sheared dense granular media. *Granular Matter*, 9(3-4) :279–291, 2007.

[77] P. Pizette. *Simulation de la compaction des poudres céramiques par la méthode des éléments discrets : Application à la mise en forme des combustibles nucléaires mixtes*. PhD thesis, INPG-LITEN, 2009.

[78] T. Poschel and V. Buchholtz. Static friction phenomena in granular-materials - coulomb law versus particle geometry. *Physical Review Letters*, 71(24) :3963–3966, 1993.

[79] O. Pouliquen, C. Cassar, P. Jop, Y. Forterre, and M. Nicolas. Flow of dense granular material : towards simple constitutive laws. *Journal Of Statistical Mechanics-Theory And Experiment*, page P07020, July 2006.

[80] M. C. Pujol, M. Idiri, L. Havela, S. Heathman, and J. Spino. Bulk and young's modulus of doped UO_2 by synchrotron diffraction under high pressure and knoop indentation. *Journal of Nuclear Materials*, 324 :189–197, 2004.

[81] F. Radjai. *Physics of dry granular media*, chapter Multicontacts dynamics, page 305. Kluwer Academic Publishers (Dordrecht/Boston/London), 1997.

[82] F. Radjai, M. Jean, J.J. Moreau, and S. Roux. Force distributions in dense two-dimensional granular systems. *Phys.Rev.Letts.*, 77(2) :274–277, july 1996.

[83] F. Radjai and V. Richefeu. Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mechanics of Materials*, 41(6) :715–728, 2009.

[84] F. Radjai and S. Roux. Etats internes des milieux granulaires denses. *14e Congrès Français de Mécanique*, 1999. Toulouse.
[85] F. Radjai and S. Roux. *The physics of granular media*. Wiley, New-York, 2004.
[86] F. Radjai, D. Wolf, M. Jean, and J.J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular media. *Phys.Rev.Lett.*, 80 :61, 1998.
[87] F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean, and J. J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Physical Review Letters*, 80(1) :61–64, 1998.
[88] Farhang Radjai, Michel Jean, Jean-Jacques Moreau, and Stéphane Roux. Force distributions in dense two-dimensional granular systems. *Phys. Rev. Lett.*, 77(2), July 1996.
[89] Farhang Radjai, Stéphane Roux, and Jean Jacques Moreau. Contact forces in a granular packing. *Chaos*, 9(3) :544–550, Sep 1999.
[90] Vincent Richefeu, Moulay Saïd El Youssoufi, and Farhang Radjai. Shear strength properties of wet granular materials. *Phys. Rev. E*, 73(5 Pt 1) :051304, May 2006.
[91] Vincent Richefeu, Moulay Said El Youssoufi, Emilien Azéma, and Farhang Radjai. Force transmission in dry and wet granular media. *Powder Technology*, 190 :258–263, 2009.
[92] V. Roque, B. Cros, D. Baron, and P. Dehaudt. Effects of the porosity in uranium dioxide on microacoustic and elastic properties. *Journal Of Nuclear Materials*, 277(2-3) :211–216, February 2000.
[93] L. Rothenburg and R. J. Bathurst. Analytical study of induced anisotropy in idealized granular materials. *Geotechnique*, 39 :601–614, 1989.
[94] L. Rothenburg and R. J. Bathurst. Influence of particle eccentricity on micromechanical behavior of granular-materials. *Mechanics Of Materials*, 16(1-2) :141–152, 1993.
[95] L. Rothenburg and A. P. S. Selvadurai. A micromechanical definition of the cauchy stress tensor for particulate media. In A. P. S. Selvadurai, editor, *Mechanics of Structured Media*, pages 469–486. Elsevier, 1981.
[96] J.N. Roux and F. Chevoir. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Dimensional Analysis and Control Parameters, pages 199–228. Wiley-ISTE, 2011.
[97] T. Sakakibara, S. Shibuya, and S. Kato. Effects of grain shape on mechanical behaviors of granular material under plane strain condition in 3d dem analyses. *Powders And Grains 2009*, 1145 :381–384, 2009.
[98] C. Santamarina and G. Cascante. Effect of surface roughness on wave propagation parameters. *Geotechnique*, 48(1) :129–136, February 1998.
[99] M. Satake. Fabric tensor in granular materials. In P. A. Vermeer and H. J. Luger, editors, *Proceedings of the IUTAM symposium on deformation and failure of granular materials, Delft*, pages 63–68, Amsterdam, 1982. A. A. Balkema.
[100] J. Schofield and I. Oppenheim. The hydrodynamics of inelastic granular systems. *Physica A*, 196 :209, 1993.
[101] J.F. Shao and P.Y. Hicher. *Elastoplasticite des sols et des roches*. Hermes, 2000.
[102] K. Shinohara, M. Oida, and B. Golman. Effect of particle shape on angle of internal friction by triaxial compression test. *Powder Technology*, 107(1-2) :131–136, 2000.
[103] L. E. Silbert, D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, and D. Levine. Analogies between granular jamming and the liquid-glass transition. *Physical Review E*, 65(5), 2002.
[104] Lydie Staron and Farhang Radjai. Friction versus texture at the approach of a granular

avalanche. *Phys Rev E*, 72(4 Pt 1) :041308, Oct 2005.

[105] A. Taboada, K. J. Chang, F. Radjai, and F. Bouchette. Rheology, force transmission, and shear instabilities in frictional granular media from biaxial numerical test using the contact dynamics method. *Journal of Geophysical Research*, 110 :1–24, 2005.

[106] J. A. TenCate, D. Pasqualini, S. Habib, K. Heitmann, D. Higdon, and P. A. Johnson. Nonlinear and nonequilibrium dynamics in geomaterials. *Physical Review Letters*, 93(6) :065501, August 2004.

[107] C. Thornton and C. W. Randall. Applications of theoretical contact mechanics to solid particle system simulation. In *Micromechanics of granular media*, Amsterdam, 1988. Elsevier.

[108] C. Voivret. *Texture et comportement des matériaux granulaires à grande polydispersité*. PhD thesis, Université de Montpellier 2, 2008.

[109] C. Voivret, F. Radjai, J. Y. Delenne, and M. S. El Youssoufi. Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, 76(2), 2007.

[110] C. Voivret, F. Radjaï, J.-Y. Delenne, and M. S. El Youssoufi. Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 102(17) :178001–, April 2009.

[111] C. Voivret, F. Rdajai, and J.Y. Delenne. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, chapter Particle Assembling Methods, pages 123–150. Wiley-ISTE, 2011.

[112] W. J. Walker and J. S. Reed. Granule fracture during dry pressing. *American Ceramic Society Bulletin*, 78(6) :53–57, June 1999.

[113] D.M. Wood. *Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics*. Cambridge University Press, 1990. Printed in the United States of America.

[114] R. Y. Yang, R. P. Zou, A. B. Yu, and S. K. Choi. Characterization of interparticle forces in the packing of cohesive fine particles. *Physical Review E*, 78(3) :031302, September 2008.

ANNEXE A

Article publié dans Physical Review E

Rheology of granular materials composed of nonconvex particles

B. Saint-Cyr,[1,2] J.-Y. Delenne,[1] C. Voivret,[1] F. Radjai,[1] and P. Sornay[2]
[1]*LMGC, CNRS-Université Montpellier 2, Place Eugène Bataillon, F-34095 Montpellier cedex 05, France*
[2]*CEA, DEN, SPUA, LCU, F-13108 Saint Paul lez Durance, France*
(Received 19 April 2011; published 10 October 2011)

By means of contact dynamics simulations, we investigate the shear strength and internal structure of granular materials composed of two-dimensional nonconvex aggregates. We find that the packing fraction first grows as the nonconvexity is increased but declines at higher nonconvexity. This unmonotonic dependence reflects the competing effects of pore size reduction between convex borders of aggregates and gain in porosity at the nonconvex borders that are captured in a simple model fitting nicely the simulation data both in the isotropic and sheared packings. On the other hand, the internal angle of friction increases linearly with nonconvexity and saturates to a value independent of nonconvexity. We show that fabric anisotropy, force anisotropy, and friction mobilization, all enhanced by multiple contacts between aggregates, govern the observed increase of shear strength and its saturation with increasing nonconvexity. The main effect of interlocking is to dislocate frictional dissipation from the locked double and triple contacts between aggregates to the simple contacts between clusters of aggregates. This self-organization of particle motions allows the packing to keep a constant shear strength at high nonconvexity.

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.041302 PACS number(s): 45.70.−n, 61.43.−j, 83.80.Fg

I. INTRODUCTION

Most of recent research work on granular physics has been concerned with the emerging behavior of a large number of basically monodisperse spherical particles [1,2]. The fact that a minimalistic model of granular matter reveals a complex generic rheology implies that the granular physics can be founded on a robust common denominator in spite of the wide variety of granular materials with substantial differences in their properties [3]. However, while essential for federative research on granular matter, this fact tends at the same time to eclipse the complexity arising from specific features of particles and their interactions.

Chief among those features is particle shape. The particles occur with various degrees of sphericity, elongation, angularity, facetedness, and convexity. In analogy to friction, particle shape affects the flow and equilibrium states of granular materials. For example, faceted particles present a higher shear strength than spherical particles [4–6], and packings of elongated particles may approach unusually high or low packing fractions [7–10]. Obviously, given the wide range of shapes and their degree of regularity in conjunction with particle size distribution, the mechanisms by which particle shape comes into play are diverse, and they hardly begin to be understood on quantitative grounds [11,12]. In this respect, the sphere packing model may be considered as reference material for the analysis of granular media with more general particle shapes deviating from a spherical or circular shape [6,13].

Among various shape characteristics, nonconvexity is of special interest as it conveys the possibility of interlocking between particles. For example, in sintered powders such as UO_2 pellets used as nuclear fuel, the particles at the micrometric scale are solid nonconvex aggregates composed of convex crystallites of nearly round shape [14]. The nonconvex feature of the aggregates varies from superficial roughness of their surface to deep concavity, allowing equally for large pores between aggregates and interlocked structures that vary with the degree of compaction.

We consider in this paper a two-dimensional (2D) model of nonconvex particles in which the degree of nonconvexity can be varied and that can easily be simulated by discrete element methods. These model particles are rigid aggregates of three overlapping disks with a three-fold rotational symmetry (see Fig. 1). Their nonconvexity can be tuned by adjusting the overlap, the range of shapes varying thus from disk, for a full overlap of the three disks, to a trimer of three tangent disks.

We perform quasistatic shear deformations of large packings of those model aggregates by means of the contact dynamics method [15,16]. We are interested both in the space-filling properties and shear strength as a function of nonconvexity. The shape may affect the behavior through various mechanisms such as the structure (packing texture and compactness) induced by shape nonconvexity, hindrance of particle rotations due to interlocking, enhanced mobilization of friction, and multiple contacts between aggregates with an effect similar to that of face-to-face contacts between faceted particles [6,10,13]. We analyze various internal variables in the initially isotropic packings prepared by isotropic compaction and in the sheared packings in order to determine the prevailing mechanisms with increasing nonconvexity of the aggregates.

In the following, we first introduce in Sec. II the technical details of the simulations, procedures of sample preparation and relevant mechanical observables, which are essential for the interpretation of the results. Then, in Sec. III, we present the evolution of shear stress and packing fraction with shear strain and at an increasing level of nonconvexity. As we shall see, the shape dependence is rather complex and characterized by a saturation of shear strength at high nonconvexity and unmonotonic evolution of the packing fraction. Sections IV, V, VI, and VII are devoted to the analysis of contact network topology, force distributions, friction mobilization, and force-contact anisotropy. In Sec. VIII, we introduce a simple model of packing fraction as a function of nonconvexity that nicely fits our simulation data. We conclude with a discussion of the most salient results of this work and its possible extension to three dimensions and more general particle shapes.

 ©2011 American Physical Society

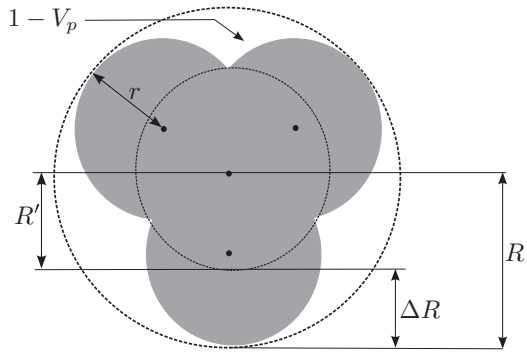


FIG. 1. Geometry of a regular aggregate.

II. SYSTEM DESCRIPTION

A. Particle shape parameter

Figure 1 shows a regular aggregate of threefold rotational symmetry composed of three overlapping disks of the same radius r. The shape of an aggregate can be characterized by considering the radius R of the circumscribing circle as compared to the radius R' of the inscribed circle. The difference $\Delta R = R - R'$ represents the concavity of the aggregate, that is, the inward deviation from the surface of the circumscribing circle. Hence, we define the nonconvexity η of an aggregate by the ratio

$$\eta = \frac{\Delta R}{R}. \tag{1}$$

An alternative parameter of nonconvexity for aggregates is the ratio $\lambda \equiv \ell/2r$, where ℓ is the distance between disk centers. The parameter η can be expressed as a function of λ:

$$\eta = \frac{3 + \sqrt{3}\lambda - 3\sqrt{1-\lambda^2}}{3 + 2\sqrt{3}\lambda}. \tag{2}$$

It varies from $\eta = 0$, corresponding to a disk ($\lambda = 0$), to $\eta \simeq 0.73$, corresponding to a trimer of three disks of vanishing overlap ($\lambda = 1$). The parameter η can also be related to the notion of "roundness" expressed in geology as the ratio of the average radius of curvature of the edges or corners to that of the maximum inscribed sphere [17,18]. With our notations, the roundness of the aggregates is simply $r/[(1-\eta)R]$, which decreases from 1.72 for $\lambda = 0$ to $\simeq$0.367 for $\lambda = 1$.

B. Numerical method

The simulations were carried out by the contact dynamics method [2,15,19,20]. Newton's equations of motion for all rigid-body degrees of freedom of all particles are integrated by taking into account contact reaction forces between particles, as well as bulk forces such as gravity. In contrast to the molecular dynamics method [21–24], where an explicit scheme is used for solving the equations of motion by introducing stiff repulsive potential and viscous damping between particles, the contact dynamics method is based on an implicit scheme involving an iterative Gauss-Seidel algorithm yielding simultaneously the contact forces and particle displacements at the end of each time step. This iterative process is defined such as to satisfy the kinematic constraints related to mutual exclusions of particles and the Coulomb friction law. For this reason, the contact dynamics method is unconditionally stable and does not require elastic repulsive potential between particles. This allows for much larger time steps than in molecular dynamics, in particular in the limit of highly stiff particles or very low confining stresses.

It should also be noticed that the solution is not generally unique when dealing with perfectly rigid particles. However, the variability of the solution is small and often in the limit of numerical precision as the kinematic constraints and disorder prevail in granular dynamics. In practice, the evolution of the system can be made almost deterministic by initializing the iterative process at each step by the contact forces at the end of the preceding step [19]. This point has been investigated by comparison with molecular dynamics simulations and experiments [25–29].

When treating complex-shaped particles such as aggregates, the same iterative process can be applied although several contact points may occur between two particles (see Fig. 7). The contacts, including those occurring between two neighboring particles, are treated as independent unilateral constraints [30]. The reaction force between two particles is the result of all forces acting at individual contacts.

C. Sample preparation

Eight samples of 5000 aggregates were prepared for eight different values of $\eta \in [0,0.7]$. To avoid long-range ordering, a size polydispersity was introduced by taking R in the range $[R_{\min}, R_{\max}]$ with $R_{\max} = 3R_{\min}$ and a uniform distribution of particle volumes ($\propto R^{-2}$), which leads to a high packing fraction ρ [31–34]. It is worth mentioning that a lower level of size polydispersity might be sufficient for topological disorder (disorder in the connectivity of the particles and force transmission) but does not ensure the metric disorder of the contact network.

A dense packing composed of disks ($\eta = 0$) was first constructed by means of random deposition inside a rectangular box of dimensions $l \times h$. For other values of η, the same packing was used with each disk serving as the circumscribing circle. The particle was inscribed with the given value of η and random orientation inside the disk. This geometrical step was followed by isotropic compaction of the packings by the contact dynamics method inside a rectangular frame. The gravity g and friction coefficients μ and μ_w between the particles and with the walls, respectively, were set to zero during compaction to ensure packing homogeneity. The samples prepared by this procedure are both isotropic and isostatic, as we see in Sec. IV. Figure 2 displays snapshots of four packings for increasing value of η at the end of isotropic compaction.

These isotropic samples were then sheared biaxially by applying a slow downward velocity $\dot{y}$ on the top wall with a constant confining stress acting on the lateral walls. During shear, the friction coefficient was set to 0.5 between particles and to 0 with the walls. The zero friction with the walls prevents from stress gradients as those that lead to the Janssen effect [35]. The vertical shear rate $\dot{y}/y$ is low enough to ensure a

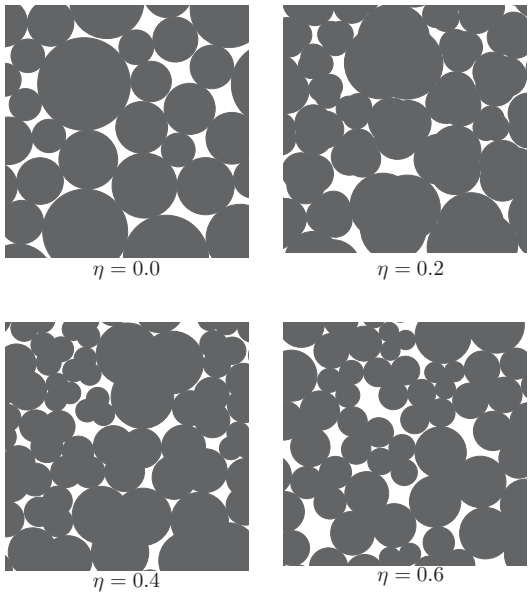


FIG. 2. Snapshots of the numerical samples at the end of isotropic compaction with zero friction between particles for different values of shape parameter η.

quasistatic state during shear by reducing the inertia parameter I given by (in 2D) [36]:

$$I = \frac{\dot{y}}{y}\sqrt{\frac{m}{p}}, \tag{3}$$

where m is the particle mass and p is the mean pressure by unit length. In our simulations, I was below 10^{-3}. Each sample is sheared until a residual state is reached with a nearly constant packing fraction.[1]

D. Stress and strain variables

In numerical simulations, the stress tensor can be evaluated from the contact forces and the geometrical configuration of a packing [37]. An interesting approach for the estimation of the stress tensor was introduced by Moreau [38]. It is based on the virtual power formalism and the notion of "internal moment" $\boldsymbol{M}^i$ defined for each particle i in the packing as

$$M^i_{\iota\delta} = \sum_{c\in i} f^c_\iota r^c_\delta, \tag{4}$$

where f^c_ι is the ι component of the force exerted on particle i at the contact c, r^c_δ is the δ component of the position vector of the same contact c, and the summation runs over all contact neighbors of particle i (noted briefly by $c \in i$).

It can be shown that the internal moment of a collection of rigid particles is the sum of the internal moments of individual particles, and the stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$ is simply the density of internal moment [38]:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{V}\sum_{i\in V}\boldsymbol{M}^i = \frac{1}{V}\sum_{c\in V}\boldsymbol{f}^c_\iota \boldsymbol{l}^c_\delta, \tag{5}$$

where V is the volume of the packing or a domain inside the packing and $\boldsymbol{\ell}^c$ is the branch vector joining the centers of the two touching particles at the contact c. In view of the above definition, which can be shown to be equivalent to other expressions of the stress tensor [2,39], the internal moment tensor in a granular packing at equilibrium underlies the Cauchy stress tensor which is a notion of continuum mechanics.

In biaxial compression, the major principal stress direction coincides with the compression axis and the principal stress values are σ_1 along the compression axis and σ_2 along the extension axis. The mean stress p and the deviatoric stress q are defined by

$$p = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2), \tag{6}$$

$$q = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2). \tag{7}$$

For a system of rigid particles, the stress state is fully defined by the dimensionless ratio q/p.

The strain variables are defined from the deformations of the simulation box. Let h_0 and l_0 be the initial height and width of the simulation box. The compression being in the vertical direction, the cumulative principal strains ε_1 and ε_2 are given by

$$\varepsilon_1 = \int_{h_0}^{h}\frac{dh'}{h'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta h}{h_0}\right), \tag{8}$$

where h is the current height and $\Delta h = h_0 - h$ is the total downward displacement, and

$$\varepsilon_2 = \int_{l_0}^{l}\frac{dl'}{l'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta l}{l_0}\right), \tag{9}$$

where l is the current box width and $\Delta l = l - l_0$ is the total change of the box width.

The cumulative shear strain is defined by

$$\varepsilon_q \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2, \tag{10}$$

whereas the cumulative volumetric strain ε_p is given by

$$\varepsilon_p = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \int_{V_0}^{V}\frac{dV'}{V'} = \ln\left(1 + \frac{\Delta\rho}{\rho}\right), \tag{11}$$

where $V_0 = l_0 h_0$ is the initial volume and $\Delta\rho = \rho - \rho_0$ is the cumulative change of packing fraction.

III. MACROSCOPIC BEHAVIOR

We are interested in this section in the effective quasistatic rheology of the packings of aggregates in terms of shear strength and evolution of packing fraction under monotonic loading for increasing values of the nonconvexity parameter η.

A. Shear strength

Figure 3 displays the normalized shear stress q/p as a function of the cumulative shear strain ε_q for different values of the nonconvexity parameter η. As a consequence of sample preparation by isotropic compaction, q/p is vanishingly small in the initial isotropic state ($\varepsilon_q = 0$). It jumps to a finite value as soon as the shear is applied and then relaxes to a

[1] Animation videos of these simulations are available at [www.cgp-gateway/ref007].

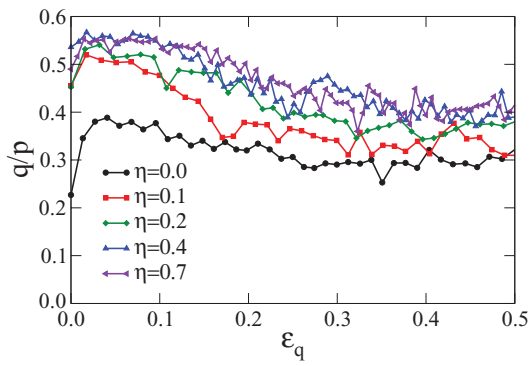


FIG. 3. (Color online) Normalized shear stress as a function of the cumulative shear strain for different values of the shape parameter η.

constant residual shear stress up to fluctuations of rather small amplitude. The initial jump to the peak stress reflects the fact that the samples have a high packing fraction in the initial state, and the particles are assumed to be perfectly rigid and simulated as such by the contact dynamics method [15]. We see that both the peak stress and the residual stress increase with η. The normalized residual stress q^*/p is independent of initial state and it represents the intrinsic shear strength of the material that often is described by the internal angle of friction φ^* defined in 2D by

$$\sin\varphi^* = \frac{q^*}{p}. \tag{12}$$

Figure 4 shows $\sin\varphi^*$ as a function of η. The error bars represent the standard deviation computed from the fluctuations around the mean in the residual state as observed in Fig. 3. It can be seen that, up to the fluctuations, $\sin\varphi^*$ increases linearly from $\simeq$0.3 to $\simeq$0.43 at $\eta = 0.5$ and beyond, where it stays independent of η. This increase of shear strength reflects the effect of nonconvexity on the internal structure, as we see in Sec. VII. However, it is surprising that this effect is apparently absent for $\eta > 0.4$. In a recent work by Azema and Radjai [10] granular packings of elongated particles were investigated and a parameter similar to η was used. They found a similar trend of increasing shear strength with η with nearly the same values but, in contrast to our nonconvex particles, no

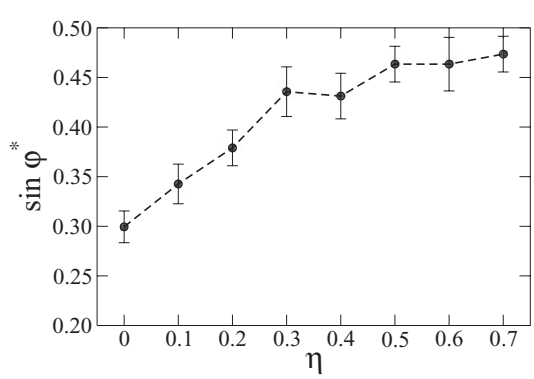


FIG. 4. Internal angle of friction φ^* as a function of η. Error bars represent the standard deviation in the residual state.

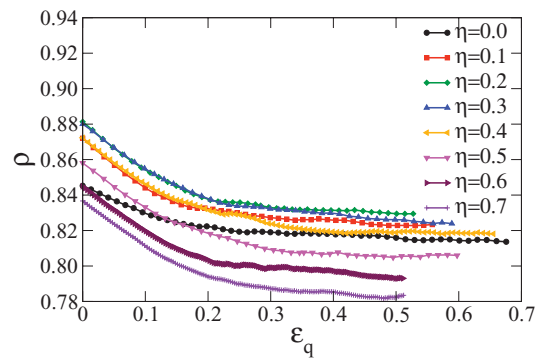


FIG. 5. (Color online) Evolution of packing fraction ρ with the cumulative shear strain ε_q for different values of η.

saturation of shear strength was observed. We come back to this point below when analyzing the microstructure.

B. Packing fraction

In Fig. 5, the evolution of packing fraction ρ is shown as a function of ε_q for different values of η. All samples dilate during shear and ρ declines from its value ρ^{iso} in the initial isotropic state down to a constant value ρ^* in the residual state. The samples dilate almost homogeneously at low shear strains ($\leqslant$0.2) and thus ρ decreases rapidly. At larger strains, dilation is localized within shear bands appearing throughout the system. As the shear bands develop at different locations inside the system, a nearly homogeneous density ρ^* is reached practically at $\varepsilon_q = 0.5$. For our rigid particles the residual packing fraction ρ^* is independent of the confining pressure and, as q^*/p, it should be considered as an intrinsic property of the material, that is, reflecting basically the particle shape and size distribution as well as the friction coefficient between particles.

Figure 6 displays ρ as a function of η at different instants of ε_q. Remarkably, ρ first grows from its value for disks ($\eta = 0$) toward a maximum at $\eta \simeq 0.2$ and then declines at higher values of η. The peak value of packing fraction ρ^{iso} in the isotropic state is as high as 0.88. In the residual state, the packing fraction ρ^* takes as low value as 0.78 at $\eta = 0.7$. A similar unmonotonic behavior of packing fraction has been previously observed for granular packings of elongated particles such as ellipses, ellipsoidal particles, spherocylinders,

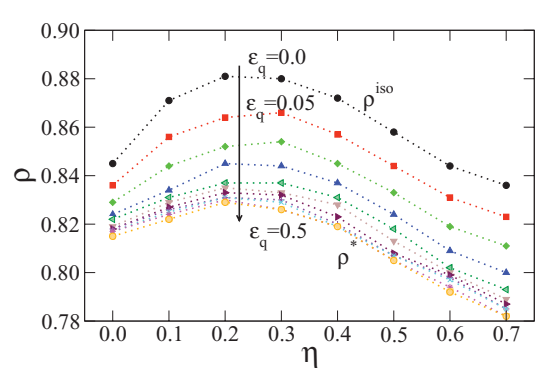


FIG. 6. (Color online) Packing fraction ρ as a function of η at different levels of cumulative shear strain ε_q.

and rounded-cap rectangles [7,8,10,40]. The falloff of the packing fraction at higher aspect ratios is attributed to the increase of excluded volumes, that is, the largest pore volume that can not be filled by a particle. Obviously, a similar effect can be advocated for our nonconvex particles which can form an increasingly tortuous and large pore space as the nonconvexity increases. However, the initial increase of ρ_0 as η varies from 0 to 0.2 indicates that this effect does not prevail at low η corresponding to small deviations from a reference circular shape. As we see below, this effect and the subsequent decrease of ρ result from the size variation of different classes of pores. We also guess that there is a link between the decrease of ρ and the saturation of φ^* at large values of η. Indeed, it seems plausible that the increase of free volume prevents from further increase of interlocking although the particle nonconvexity becomes higher, so that the shear strength remains constant. This picture emerges also from the analysis of microstructure (Sec. IV).

IV. CONTACT NETWORK TOPOLOGY

In this section, we analyze the microstructure of our simulated packings of aggregates as a function of particle shape nonconvexity. The relevant microstructural variables in a granular material are linked with the contact network, which is the backbone of stress transmission in quasistatic equilibrium [3]. The principal effect of shape nonconvexity is to allow for multiple contacts between aggregates as shown in Fig. 7. Four different types of contact can occur between two aggregates as shown in Fig. 7: (1) simple contact (S), (2) double-simple (DS) contact, defined as two simple contacts between two pairs of disks belonging to the aggregates, (3) double (D) contact, defined as two contacts between one disk of one aggregate with two disks of the other aggregate, and (4) triple (T) contact, defined as the combination of one simple and one double contact.

Given multiple contacts between aggregates, we distinguish between the coordination number Z, defined as the mean number of contact neighbors per particle, and the *connectivity number* Z_c, defined as the mean number of contacts per particle. For convex particles, we have $Z = Z_c$. The contact network of nonconvex particles can thus be characterized by Z and the ratio $K = Z_c/Z$. Let K_S, K_{DS}, K_D, and K_T be the proportions of simple, double simple, double, and triple contacts. It is easy to see that

$$K = \frac{Z_C}{Z} = K_S + 2(K_{DS} + K_D) + 3K_T. \qquad (13)$$

Figure 8 shows the coordination number in the initial (isotropic) and residual states as a function of η. Quite interestingly, $Z^* \simeq 3$ is nearly independent of η, whereas

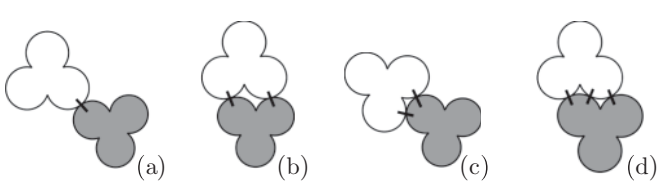


FIG. 7. Four different contact configurations between two aggregates: (a) simple, (b) double simple, (c) double, and (d) triple.

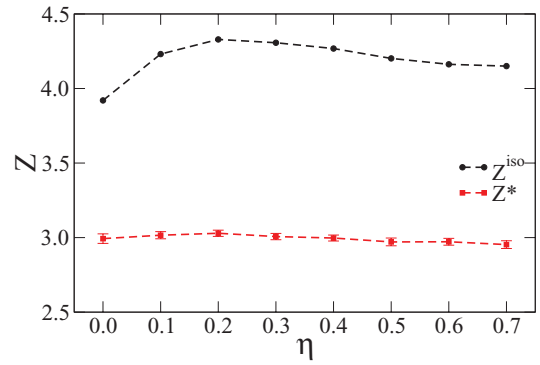


FIG. 8. (Color online) Coordination number Z in the initial isotropic state (labeled by "iso") and in the residual state (labeled by $\star$) as a function of nonconvexity η. The error bars of Z^* indicate the standard deviation of the data in the residual state.

$Z^{\rm iso}$ follows the same trend as $\rho^{\rm iso}$ (see Fig. 6). The higher value of $Z^{\rm iso}$ is a consequence of isotropic compaction with zero friction. Its value then declines to Z^* as a result of dilatancy by shearing with $\mu = 0.5$. The rather low value $Z^* \simeq 3$ implies that many aggregates have only three contact neighbors irrespective of nonconvexity.

The connectivity number Z_c is displayed in Fig. 9 as a function of η. Its value in the isotropic state jumps from $Z_c^{\rm iso} = 4$ at $\eta = 0$ to $Z_c^{\rm iso} \simeq 6$ at $\eta = 0.1$. Both values are compatible with the isostatic nature of our packings prepared with a zero friction coefficient [41–43]. Indeed, frictionless circular particles ($\eta = 0$) are characterized by two degrees of freedom (rotations being immaterial) and thus the isostatic condition implies two independent constraints (normal forces) which amounts to a connectivity number of 4. For slightest deviation from circular shape the rotation becomes material and a similar counting argument leads to a connectivity number of 6. In contrast, for frictional aggregates in the residual state, Z_c^* increases from 3 to $\simeq$3.8 at $\eta = 0.7$. The effect of increasing nonconvexity is therefore expressed by an increasing number of multiple contacts with the same average number of neighboring aggregates ($Z \simeq 3$). It is remarkable that Z_c^* does not follow the trend of the packing fraction (Fig. 25) as η is increased, so that at high nonconvexity the

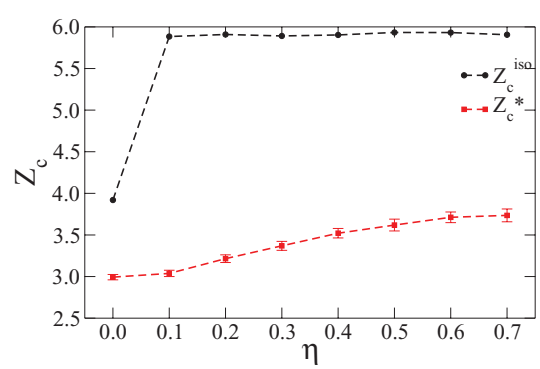


FIG. 9. (Color online) Connectivity number Z_c in the initial isotropic state (labeled by "iso") and in the residual state (labeled by $\star$) as a function of nonconvexity η. The error bars of Z_c^* indicate the standard deviation of the data in the residual state.

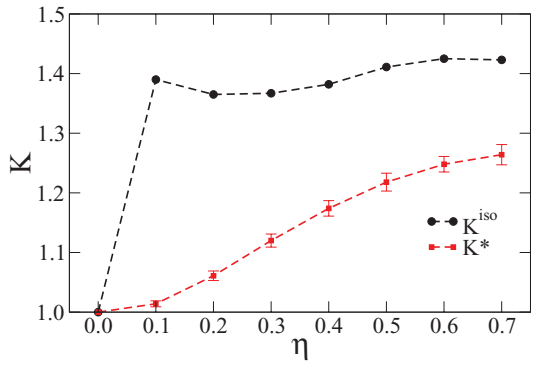


FIG. 10. (Color online) The ratio K of connectivity number to coordination number in the initial isotropic state (labeled by "iso" or black line) and in the residual state (labeled by ⋆ or red line) as a function of nonconvexity η. The error bars of K^* indicate the standard deviation of the data in the residual state.

packings of aggregates are less compact but more tightly connected. The ratio K reflects this behavior as shown in Fig. 10. The isostatic packings are characterized by a ratio $K^{\rm iso} \simeq 1.4$ for $\eta > 0$, whereas the sheared packings in the residual state have a ratio K^* increasing smoothly from 1 to 1.26 as η varies from 0 to 0.7.

Figure 11(a) displays the proportions of different contact types as a function of η in the isostatic state. We observe that, like $Z^{\rm iso}$ and $Z_c^{\rm iso}$, the proportions of different types of connection between aggregates are nearly independent of η in the isostatic state. The simple contacts represent the highest proportion ($\simeq$0.63), whereas the triple and double-simple contacts have the lowest proportions (<0.1). The double

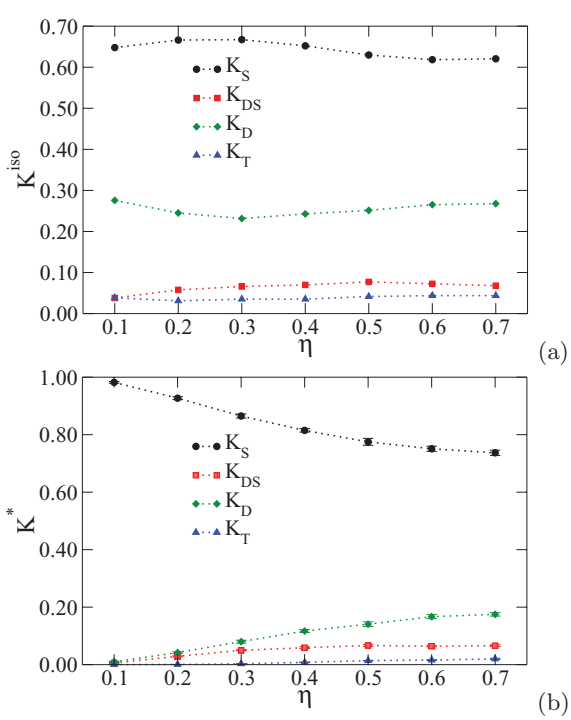


FIG. 11. (Color online) Proportions of simple, double, double-simple, and triple contacts as a function of η in the isotropic (a) and residual (b) states.

contacts are represented by an intermediate proportion about 0.27. The fractions of contact types in the residual state are displayed in Fig. 11(b). The proportion of simple contacts declines as η is increased but its value remains above that in the isotropic state at the expense of double contacts, which are fewer in number.

One observes also a drastic loss of double contacts in the residual state compared to the initial isotropic state for all values of η. In contrast, the proportion of double-simple and triple contacts are nearly the same. In fact, the isostatic state corresponds to the unique minimum of the total potential energy pV. This state is achieved by an enhanced number of double and triple contacts, which tend to decrease the volume. The situation is different in the residual state, which is governed by shear-induced dilatation of the material and where the particles explore constantly metastable states. In this state, the double and triple contacts are no more required for the equilibrium and stability of the packing. However, as we see below, the role of interlocking due to a weak increase of the number of double and triple contacts is to reduce energy dissipation by allowing for clustered rigid rotations of the paricles (see Sec. VI).

The description of the microstructure in terms of the average coordination and connectivity between the aggregates, provides us with a basic picture of the effect of shape nonconvexity. The isotropic states prepared by compaction with zero friction between aggregates are interesting but rather special isostatic states that exhibit practically no dependence on particle shape. The residual state, on the contrary, reveals a clear shape dependence, marked out by increasing connectivity though with a nearly constant coordination number as the shape nonconvexity increases. In contrast to the unmonotonic evolution of the packing fraction, the increasing connectivity of the aggregates is obviously correlated with the increase of shear strength. In the following, we analyze force transmission and higher-order descriptors of the microstructure in order to clarify the nature of this correlation.

V. FORCE DISTRIBUTIONS

The distribution of contact forces in granular media reflects the inhomogeneity of the contact network. For our packings of aggregates one expects an invariant distribution in the isotropic state since the connectivity remains unchanged as nonconvexity is increased. This is what we observe in Figs. 12(a) and 12(b), where the probability density functions (PDFs) of normal forces f_n are displayed. The PDF for $\eta \neq 0$ is practically the same as for disks ($\eta = 0$) with a roughly exponential falloff of large forces, a peak slightly below the mean force and a nonvanishing PDF as the force tends to zero [44–52]. The normal force PDFs in the residual state are shown in Figs. 12(c) and 12(d). Here the distribution is increasingly broader as nonconvexity is increased. We observe an increasing number of weak forces and increasingly stronger forces. The exponential character $[P(f_n) \propto e^{-\alpha_n f_n/\langle f_n\rangle}]$ of the distribution in the range of strong forces is more pronounced compared to that in the isostatic state as the extent of strong forces increases with η. It is characterized by the exponent α_n, which declines from $\simeq$1.71 to 1 as η increases from 0 to 0.7. The distribution in the range of weak forces may be

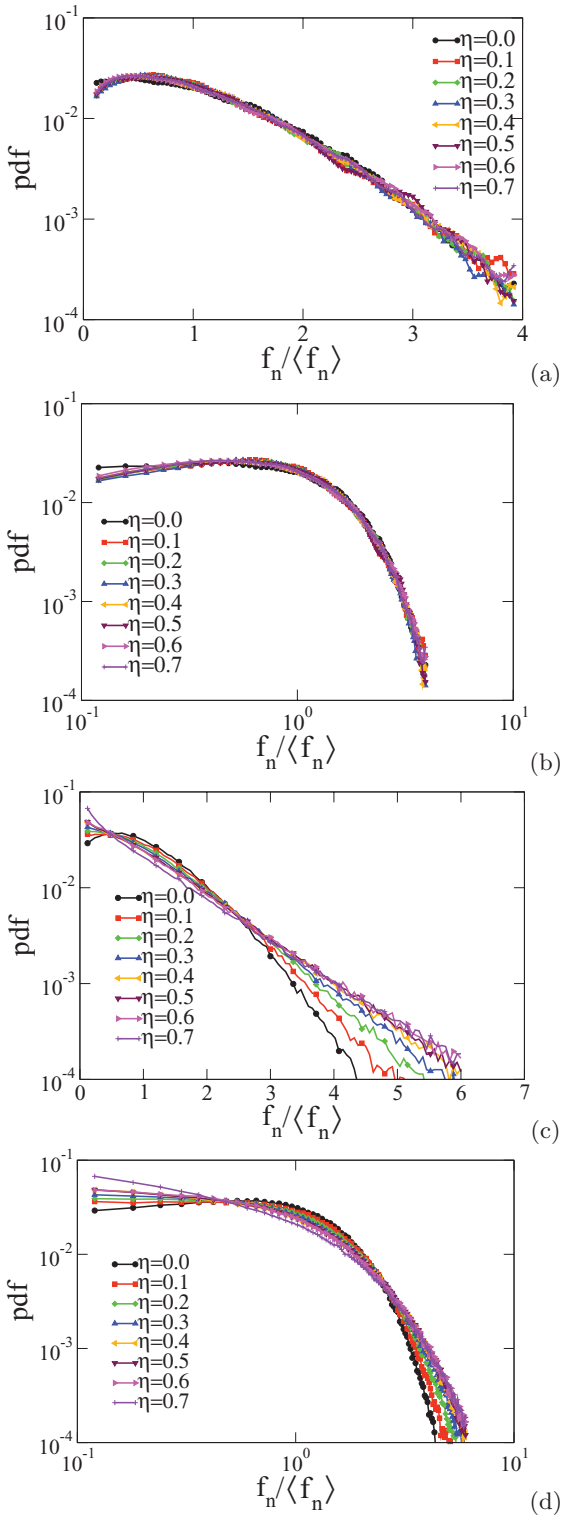


FIG. 12. (Color online) Probability distribution function of normal forces for different levels of shape nonconvexity η in the isotropic (a),(b) and residual (c),(d) states in a log-linear and log-log scales. The forces are normalized by the mean normal force.

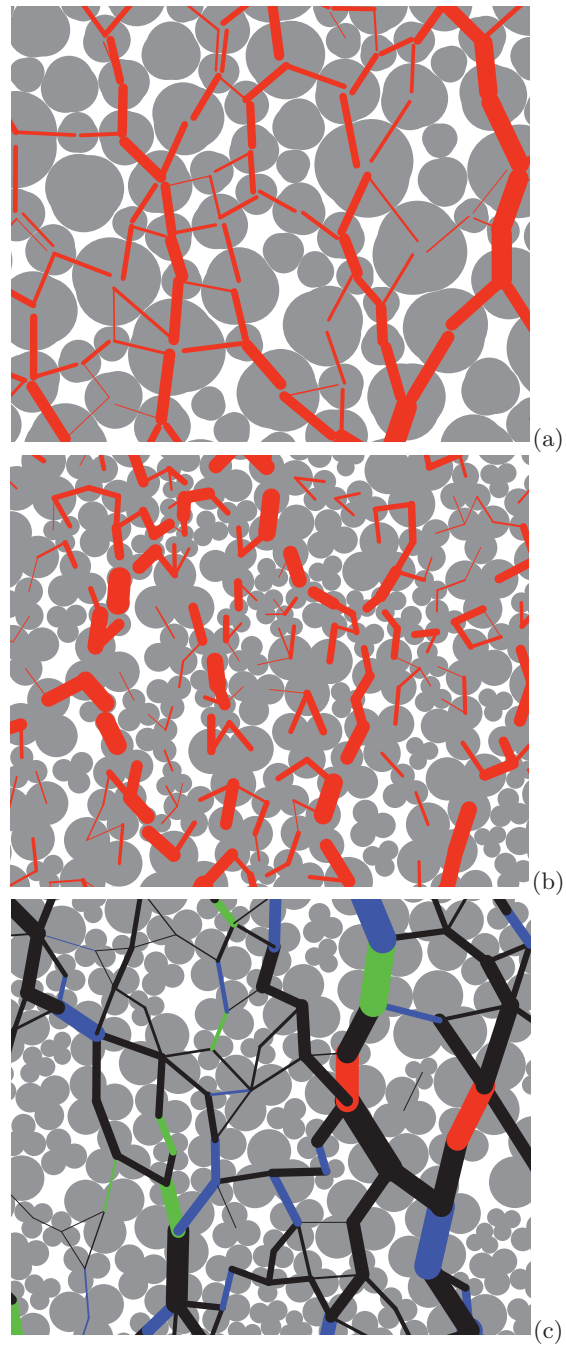


FIG. 13. (Color online) Snapshots of normal force chains for $\eta = 0.1$ (a), $\eta = 0.5$ (b), and radial force chain for $\eta = 0.5$ (c) taken in the residual state. Line thickness is proportional to force intensity. In (c) the black, dark gray, medium gray, and light gray lines are, respectively, radial forces for simple, double, double-simple, and triple contacts.

approximated by a power law $[P(f_n) \propto f_n/\langle f_n \rangle^{-\beta_n}]$, as seen on the log-log scale with the exponent β_n increasing from $\simeq -0.16$ for $\eta = 0$ to $\simeq 0.46$ for $\eta = 0.7$. This means that the packings of more nonconvex aggregates, though more closely connected, are more inhomogeneous. This discrepancy may be attributed to enhanced disorder due to the increasing number of multiple contacts between aggregates. Figures 13(a) and 13(b) show two snapshots of normal forces for $\eta = 0.1$ and $\eta = 0.5$ in the residual state. We observe double contacts with double force lines as well as enhanced force branching for $\eta = 0.5$. The visual aspect of the force chains is consistent with a higher inhomogeneity for $\eta = 0.5$.

In order to highlight the role of multiple contacts in force transmission, we consider the reaction forces between aggregates. The reaction force $\boldsymbol{F}$ between two aggregates is the resultant of point forces acting at their contacts. It can be projected on the branch vector connecting the centers of the two aggregates with unit vector $\boldsymbol{n}'$. In this way, the complex network of contacts can be replaced by the simpler network of branch vectors and carrying the radial force $F \equiv \boldsymbol{F} \cdot \mathbf{n}'$ between aggregates [6,13]. This network of neighbors can be compared to that of convex particles and among systems with different levels of shape nonconvexity. One example is displayed in Fig. 13(c), which represents the radial forces F extracted from the contact force. The radial force chains observed in this figure have nearly the same feature as those generally observed between convex particles.

We differentiate the average radial forces F_S, F_D, F_{DS}, and F_T of simple, double, double-simple, and triple contacts, respectively. Figures 14(a) and 14(b) display the the radial forces of different contact types normalized by the average normal force $\langle f_n \rangle$ as a function of η in the isotropic and residual states. One remarkable feature is that these averages by contact type are practically independent of η in the isotropic state. This means that the average reaction force of each contact type varies as the average normal force. $F_S^{\rm iso}$ remains close to 1 (of the order of the average normal force), whereas $F_D^{\rm iso}$ and $F_{DS}^{\rm iso}$ are slightly below two. Since each double or double-simple contact involves two contacts, this observation also means that the two contact forces belonging to a double contact between a pair of aggregates are almost statistically independent forces. In contrast, we observe that $F_T^{\rm iso} < 2.5$, implying that the three forces belonging to a triple contact are generally correlated since one would have $F_T^{\rm iso} = 3$ otherwise.

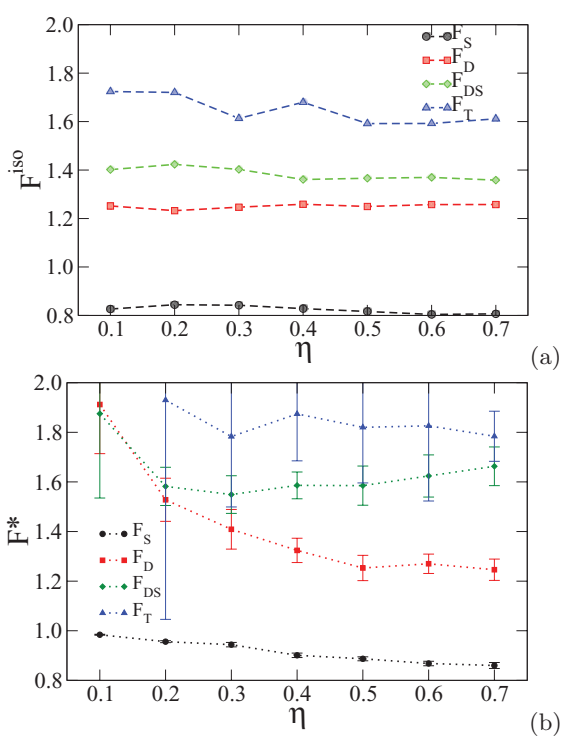


FIG. 14. (Color online) Average forces by contact type normalized by the average normal force as a function of η in the isotropic (a) and residual (b) states.

In the residual state, F_S^* declines slightly from 1 with increasing η and F_T^* remains unchanged and close to 1.8 up to error bars due to the weak number of triple contacts at low values of η. F_D^* falls off to very low values ($\simeq$1.2), a sign of very high correlation between the two point forces at the two contact points between one disk of one aggregate and two disks of another aggregate (we would have $F_D^* = 2$ without correlation). This correlation may be attributed to the increasing level of kinematic constraint or interlocking as nonconvexity increases (see Sec. VI). In contrast, F_{DS}^* varies in the range [1.6,1.9].

It is important to note that multiple contacts, though far less in number than simple contacts (Fig. 11), carry the largest forces and represent the strong radial force chains in Fig. 13(c). Their respective weights in force transmission are, however, given by $K_D F_D$, $K_{DS} F_{DS}$, and $K_T F_T$, which are below $K_S F_S$, but grow as K_D, K_{DS}, and K_T increase with η.

VI. FRICTION MOBILIZATION

The degree of mobilization of friction forces is a basic state parameter in granular materials. The friction forces increase on average with shear stress, and sliding occurs only at a subset of contacts where the friction force f_t equals in absolute value the friction coefficient μ times the normal force f_n. In the case of aggregates, an interesting issue is how far their nonconvex geometry affects friction mobilization and whether sliding is hindered by interlocking.

Let $(\mathbf{n}^a, \mathbf{t}^a)$ be a local frame of specified polarity attached to a contact a of an aggregate, where $\mathbf{n}^a$ is the inward contact normal and $\mathbf{t}^a$ is the unit orthogonal vector. The components of the contact force $\mathbf{f}^a$ acting on the aggregate in this frame are the normal force f_n^a, which is positive, and the tangential force f_t^a, which can be either positive or negative within the Coulomb friction criterion $|f_t| \leqslant \mu f_n$. We have $\mathbf{f}^a = f_n^a \mathbf{n}^a + f_t^a \mathbf{t}^a$. The accelerations are assumed to be negligible in quasistatic deformation so that the forces and force moments acting on the aggregate are balanced:

$$\sum_a \mathbf{f}^a = 0, \tag{14}$$

$$\sum_a h_n^a f_t^a = 0, \tag{15}$$

with $h_n^a = \mathbf{h}^a \cdot \mathbf{n}$, where $\mathbf{h}^a$ is the *contact vector* joining the center of inertia of the aggregate to the contact a.

Taking the average of the second equation in Eq. (15) over all aggregates and assuming that h_n^a and f_t^a are statistically independent, we get $\langle h_n \rangle \langle f_t \rangle = 0$. Hence, we have $\langle f_t \rangle = 0$ since $\langle h_n \rangle > 0$. This means that, due to the balance of force moments, the average tangent force in the packing vanishes. This is what generally is observed in numerical simulations of granular materials. For this reason, the average tangential force does not reflect the mobilization of friction.

The friction mobilization can be defined from higher-order moments of tangential forces. At second order, the root mean square (rms) $\sqrt{f_t^2}$ of tangential forces provides a good measure of friction mobilization when normalized by the mean $\mu \langle f_n \rangle$.

Alternatively, a friction mobilization index I_f can be defined from the absolute values of friction forces:

$$I_f = \left\langle \frac{|f_t|}{\mu f_n} \right\rangle, \tag{16}$$

where the average is taken over all contacts. This definition is closer to the spirit of the Coulomb friction law as compared to the rms of friction forces.

A somewhat more elegant way of describing friction mobilization is to start with the probability density of the friction force $f_t\boldsymbol{t}$, which derives from the joint probability density $P(f_t,\boldsymbol{t})$ of the friction force f_t and its orientation $\boldsymbol{t}$. In 2D, the vector $\boldsymbol{t} = (-\sin\theta, \cos\theta)$ is parametrized by the orientation θ of the contact normal $\boldsymbol{n}$ and we have

$$\langle f_t\rangle_\theta(\theta) P_\theta(\theta) = \int_0^\infty f_t \; P(f_t,\theta)\, df_t, \tag{17}$$

where $\langle f_t\rangle_\theta(\theta)$ is the average friction force along the direction θ and $P_\theta(\theta)$ is the probability density of contact normal orientations. Both P_θ and $\langle f_t\rangle_\theta$ are π periodic since the contact normals have no intrinsic polarity. Since the average friction force vanishes, we have

$$0 = \langle f_t\rangle = \int_0^\pi \langle f_t\rangle_\theta(\theta) P_\theta(\theta)\, d\theta. \tag{18}$$

This equation implies that the functions $\langle f_t\rangle_\theta(\theta)$ and $P_\theta(\theta)$ are orthonormal.

Given the π periodicity of the above functions, they can be Fourier-expanded, and at lowest order we get the following approximation, which satisfies the orthonormal condition,

$$P_\theta(\theta) = \frac{1}{\pi}\{1 + a_c \cos 2(\theta - \theta_c)\}, \tag{19}$$

$$\langle f_t\rangle_\theta = \langle f_n\rangle\, a_t \sin 2(\theta - \theta_t), \tag{20}$$

where a_c represents the fabric anisotropy of contact normals, a_t is the anisotropy of friction forces, θ_c is the privileged direction of contact normals, and θ_t is the reference direction for friction forces. The normalization of $\langle f_t\rangle_\theta$ by the average normal force $\langle f_n\rangle$ is necessary for the definition of a dimensionless anisotropy a_t. Figure 15 shows polar diagrams of the simulation data for $\langle f_t\rangle_\theta(\theta)$ and $P_\theta(\theta)$ together with the Fourier fits in the residual state. The fits are excellent. We see that $\theta_c \simeq \theta_t = \pi/2$ coincides with the principal stress direction $\theta_\sigma = \pi/2$.

In this way, we define a friction mobilization function:

$$M_f(\theta) \equiv \frac{\langle f_t\rangle_\theta}{\mu\,\langle f_n\rangle} = \frac{a_t}{\mu}\sin 2(\theta - \theta_t). \tag{21}$$

This function has two modes along the directions $\theta_t \pm \pi/4$ and the ratio a_t/μ is simply their amplitude. This amplitude can therefore be used as a descriptor of friction mobilization. Note that a descriptor of friction mobilization I'_f can also be defined by integrating the absolute value of $M_f(\theta)$ in the range $[0,\pi]$. This leads to the relation $I'_f = 2a_t/\mu$. This definition is similar to that of I_f with the difference that Eq. (16) is the average of the ratio of tangential and normal forces, whereas I'_f involves the ratio of the averages. Hence, we have $I'_f = 2a_t/\mu \leqslant I_f$.

The friction mobilization increases from zero in the isotropic state with shear strain and its value in the residual state depends on the nature of the material. In Fig. 16, I_f^*, representing the residual-state value of I_f, is displayed as a function of η. I_f^* increases linearly with η from $\simeq$0.45 for disks and saturates to $\simeq$0.62 above $\eta = 0.4$ in the same manner as the shear strength (Fig. 4). This high correlation between the shear strength and friction mobilization at increasing level of shape nonconvexity indicates that particle shape-dependence of shear strength is at least partially mediated by friction mobilization.

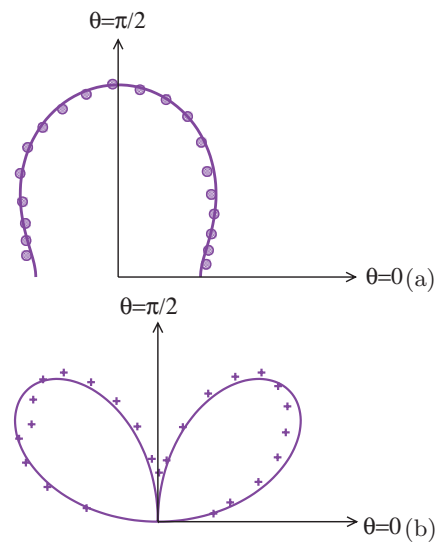


FIG. 15. (Color online) Polar diagrams of the probability density of contact orientations θ (a) and friction mobilization function (b) in the residual state for $\eta = 0.7$. The solid lines are leading-order Fourier fits.

Figure 17 displays a_t^*/μ and a_c^*, representing the residual-state values of a_t/μ and a_c, as a function of η. a_t^*/μ shows the same trend as I_f^* with values only slightly below $0.5I_f^*$. In the same way, a_c^* increases from 0.3 to a steady value 0.4 beyond $\eta \simeq 0.3$. Hence, the two descriptors of friction mobilization are almost equivalent and the shear strength is correlated with both friction mobilization and fabric anisotropy. This point is discussed in more detail in Sec. VII.

Another aspect of friction mobilization is the proportion S of sliding contacts in steady shearing [39]. Figure 18 displays S^* in the residual state as a function of η. S^* varies about 0.13 at $\eta = 0$ to about 0.28 for $\eta > 0.4$. Hence, the number

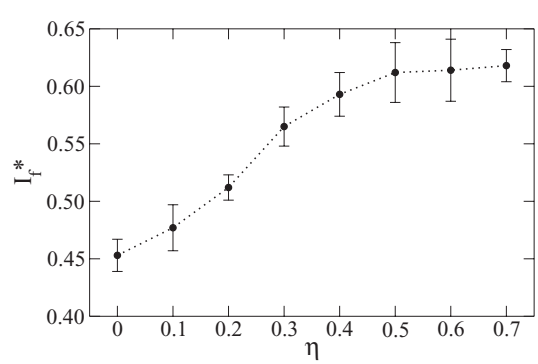


FIG. 16. Friction mobilization I_f^* in the residual state as a function of nonconvexity. Error bars represent the standard deviation of the data.

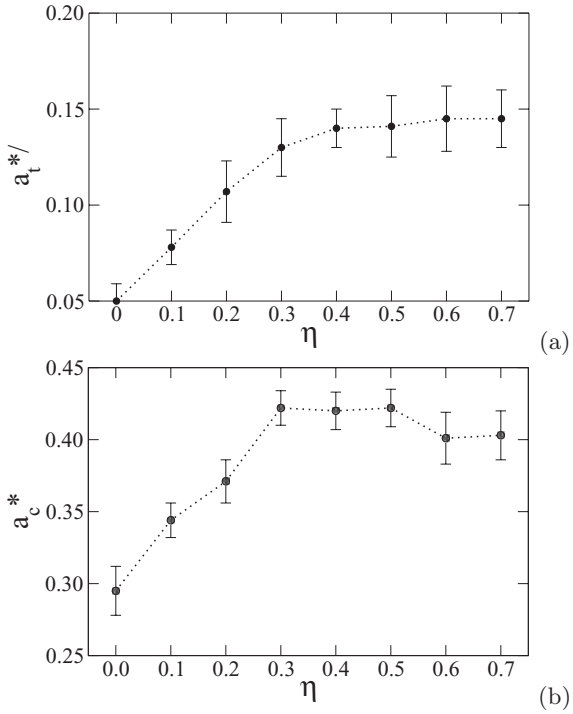


FIG. 17. Friction mobilization a_t^*/μ (a) and fabric anisotropy a_c^* (b) in the residual state as a function of nonconvexity. Error bars represent the standard deviation of the data.

of sliding contacts follows the average friction mobilization. The fact that none is affected by increasing the nonconvexity of the aggregates beyond $\eta = 0.5$ is important information for understanding the saturation of shear strength. Another key information is that the sliding contacts are unevenly distributed among simple, double-simple, double, and triple contacts, as shown in Fig. 19. Only a weak number of triple and double contacts are sliding, whereas the proportion of sliding double-simple contacts increases with η at the expense of simple contacts. Hence, in contrast to S_D^*, which remains far below S_{DS}^*, the proportion K_D^* of double contacts increases much faster than the proportion K_{DS}^* of double-simple contacts (Fig. 11).

This differentiation between the roles played by the double and double-simple contacts is maybe the best demonstration

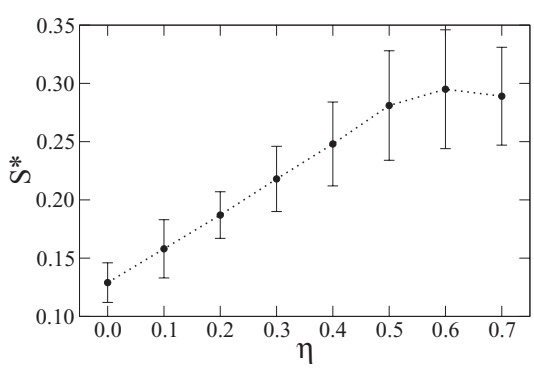


FIG. 18. Proportion of sliding contacts as a function of η in the residual state. Error bars show the standard deviation in the residual state.

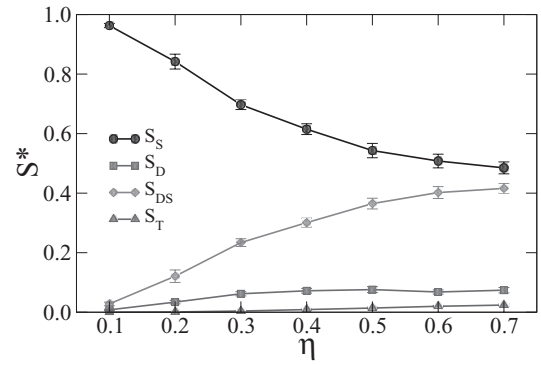


FIG. 19. (Color online) Proportions of sliding contacts as a function of η in the residual state for different contact types between aggregates. Error bars show the standard deviation in the residual state.

of interlocking of the aggregates with the evident effect of freezing the relative motion and sliding at the double and triple contacts. As a result, frictional dissipation between the most nonconvex aggregates occurs preferentially at the simple and double-simple contacts. This enhanced interlocking has the same effect as cohesion forces in a cohesive granular material: As the aggregates are increasingly interlocked, they move together in the form of rigid clusters composed of several aggregates, giving rise to larger dilatation and thus lower packing fractions. This mechanism explains the lower values of packing fraction at high nonconvexity reached in the residual state compared to the isotropic state, where friction plays no role (see Fig. 6).

VII. FABRIC AND FORCE ANISOTROPIES

The fabric anisotropy a_c and the tangential force anisotropy a_t were introduced in the last section in connection with friction mobilization. A similar definition can be applied to the angular dependence of the average normal forces [53]. We consider the joint probability density $P(f_n,\boldsymbol{n})$ of the normal force f_n and its orientation $\boldsymbol{n}$. In 2D, the vector $\boldsymbol{n} = (\cos\theta, \sin\theta)$ is parametrized by θ and we have

$$\langle f_n\rangle_\theta(\theta)P_\theta(\theta) = \int_0^\infty f_n\ P(f_n,\theta)\,df_n, \tag{22}$$

where $\langle f_n\rangle_\theta(\theta)$ is the average normal force along the direction θ. The average normal force is

$$\langle f_n\rangle = \int_0^\pi \langle f_n\rangle_\theta(\theta)P_\theta(\theta)\,d\theta. \tag{23}$$

The Fourier expansion of $\langle f_n\rangle_\theta(\theta)$ at leading order together with the condition (22) yield

$$\langle f_n\rangle_\theta = \langle f_n\rangle\,\{1 + a_n\cos 2(\theta - \theta_n)\}, \tag{24}$$

where a_n is the anisotropy of normal forces with privileged direction θ_n. This form is well fit to the data as shown in Fig. 20 in the residual state for $\eta = 0.7$. We also see that θ_n coincides with the principal stress direction $\theta_\sigma = \pi/2$.

The residual-state value of normal-force anisotropy a_n^* is displayed in Fig. 21 as a function of η. It increases with η and, up to fluctuations, saturates to a value nearly independent of η.

Titre : Modélisation des matériaux granulaires cohésifs à particules non convexes : Application à la compaction des poudres d'UO_2.

Résumé : On s'intéresse à la modélisation des matériaux granulaires composé d'agrégats non convexes et cohésifs en vue d'application à la rhéologie des poudres d'UO_2. L'influence du degré de non-convexité des particules est analysé en termes de grandeurs macroscopiques (frottement interne et cohésion de Coulomb) et de paramètres micro-mécaniques tels que l'anisotropie de la texture et la transmission des efforts. Il apparaît en particulier que la compacité évolue d'une manière complexe avec la non-convexité et que la résistance au cisaillement augmente mais sature sous l'effet d'imbrication entre agrégats. Des modèles simples sont introduits pour décrire ces comportements en termes de paramètres micro-mécaniques. De même, des études systématiques par cisaillement, compaction uniaxiale et compression simple montrent que la cohésion interne augmente avec la non-convexité mais est fortement contrôlée par les conditions aux limites et l'apparition de bandes de cisaillement ou de concentrations de contraintes.

Mots clefs : poudres d'UO_2, matériaux granulaires, non-convexité, enchevêtrement, texture, rhéologie, résistance au cisaillement, compacité, cohésion, compression isotrope, compression biaxiale, compaction uniaxiale, compression simple, élements discrets, dynamique des contacts.

Title : Cohesive granular media modelization with nonconvex particles shape : Application to UO_2 powder compaction

Abstract : We model in this work granular materials composed of nonconvex and cohesive aggregates, in view of application to the rheology of UO_2 powders. The effect of nonconvexity is analyzed in terms of bulk quantities (Coulomb internal friction and cohesion) and micro-mechanical parameters such as texture anisotropy and force transmission. In particular, we find that the packing fraction evolves in a complex manner with the shape nonconvexity and the shear strength increases but saturates due to interlocking between the aggregates. We introduce simple models to describe these features in terms of micro-mechanical parameters. Furthermore, a systematic investigation of shearing, uniaxial compaction and simple compression of cohesive packings show that bulk cohesion increases with non-convexity but is strongly influenced by the boundary conditions and shear bands or stress concentration.

Keywords : UO_2 powder , granular material, nonconvexity, interlocking, texture, rheology, shear strength, solidfraction, cohesion, isotropic compression, biaxial compression, uniaxial compaction, simple compression, discrets elements, contact dynamics.

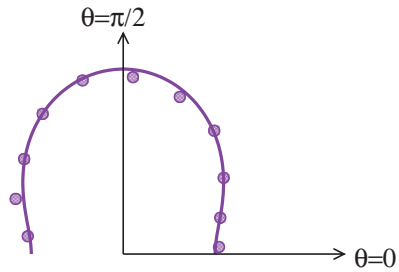


FIG. 20. (Color online) Polar diagram of the angular average of normal forces in the residual state for $\eta = 0.7$. The solid line is the leading-order Fourier fit.

This is consistent with the behavior of friction mobilization and fabric anisotropy. Since a_n represents the anisotropic structure of the force chains, its saturation indicates that nonconvexity has no influence on the force chains beyond $\eta \simeq 0.4$.

The force and fabric anisotropies are at the origin of shear strength in granular materials. Indeed, the expression of stress tensor (5) together with the Fourier expansions (20) and (24) lead to the following relation in the residual state [53]:

$$\sin\varphi^* = \frac{q^*}{p} \simeq \frac{1}{2}(a_c^* + a_n^* + a_t^*). \tag{25}$$

This expression is based on the following assumptions, which are satisfied with a good approximation in the residual state: (1) The contact forces and branch-vector lengths are weakly correlated; (2) the reference directions coincide with the major principal stress direction, $\theta_c = \theta_t = \theta_n = \theta_\sigma$; (3) the cross products among the three anisotropies are negligible. The values of shear strength given by this expression from the anisotropies predict correctly the measured shear strength as observed in Fig. 22 for all values of η in the residual state. Equation (25) allows us to evaluate the relative weights of fabric anisotropy, force chains, and friction mobilization with regard to shear strength. From Figs. 17 and 21 we see that $a_t^* < a_n^* < a_c^*$, so that the largest and smallest contributions are due to fabric anisotropy and friction mobilization, respectively. On the other hand, the saturation of shear strength beyond $\eta \simeq 0.4$ is mainly due to the saturation of friction mobilization and fabric anisotropy.

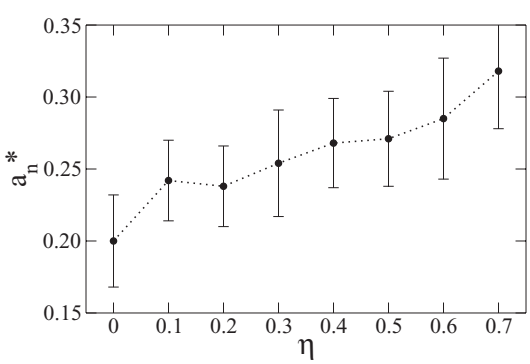


FIG. 21. Normal-force anisotropy a_n^* in the residual state as a function of nonconvexity. Error bars represent the standard deviation of the data.

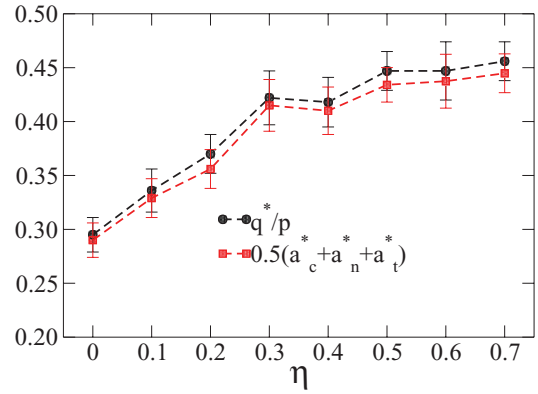


FIG. 22. (Color online) Normalized shear stress q^*/p in the residual state as a function of η (black line) with the harmonic approximation (red line) given by Eq. (25). Error bars represent the standard deviation of the data.

VIII. A MODEL OF PACKING FRACTION

The unmonotonic evolution of the packing fraction ρ with the nonconvexity parameter η is intriguing as it contrasts with a common intuition that the packing fraction of nonconvex particles should decrease as a result of interlocking. We would like to show here that the unmonotonic evolution of ρ with η may be understood from the very definition of η and by discerning at least two different types of pores between the aggregates.

Let us consider the mean particle volume V_p and the mean free volume V_f defined as the mean pore volume per particle, and both normalized by the reference volume πR^2. We assume that the volume fractions in both initial and residual states are homogeneously distributed so that the total packing fraction results from particle-scale interactions rather than large-scale strain localization. This condition is nearly satisfied for the initial state due to the preparation process and for the residual state as a result of long shearing (see Sec. III B). The packing fraction is defined by

$$\rho = \frac{V_p}{V_p + V_f}. \tag{26}$$

Given the normalization, we have $V_p = 1$ for $\eta = 0$. The volume $1 - V_p$ represents the mean *self-porosity* of a particle, whereas $V_f - (1 - V_p)$ is the remaining free volume of the interstitial space of three aggregates or more. As η increases, V_p declines and self-porosity increases. According to Eq. (26), if the void ratio $e = V_f/V_p$ were an increasing function of η, then the packing fraction would decrease with η. Since this is not what we observe at low η, e is expected to decrease as η varies from 0 to 0.2.

The variation of V_p with η can easily be calculated for the geometry of aggregates. We have

$$V_p = \frac{r^2}{\pi}\left\{\frac{5\pi}{2} - 3\cos^{-1}(\lambda) + \sqrt{3}\lambda^2 + 3\lambda\sqrt{1-\lambda^2}\right\}, \tag{27}$$

with

$$r = \left\{1 + \frac{2\sqrt{3}}{3}\lambda\right\}^{-1}, \tag{28}$$

where we have set $R = 1$. The parameter λ can be expressed as a function of η by inverting Eq. (2).

The free volume V_f can be approximated as a sum of four terms:

$$V_f(\eta) = V_f(0) + \Delta V_f^{(1)}(\eta) - \Delta V_f^{(2)}(\eta) - \Delta V_f^{(3)}(\eta). \quad (29)$$

$V_f(0)$ is the free volume at $\eta = 0$. $\Delta V_f^{(1)}$ is the gain of free volume due to the increase of self-porosity with η, simply given by

$$\Delta V_f^{(1)} = 1 - V_p, \quad (30)$$

whereas $\Delta V_f^{(2)}$ is the loss of free volume due to interlocking, which implies the overlap of their self-porosities. The distance between the aggregates is reduced as the concave borders of an aggregate are partially filled by the convex parts of a neighboring aggregate [see Fig. 23(a)]. As a first approximation, we assume that $\Delta V_f^{(2)}$ varies proportionally to the self-porosity:

$$\Delta V_f^{(2)} = f(\eta)(1 - V_p), \quad (31)$$

where $f(\eta)$ is the filling rate depending on η. The net volume change $\Delta V_f^{(1)} - \Delta V_f^{(2)} = \{1 - f(\eta)\}(1 - V_p)$ is always positive (increasing free volume) since, due to steric exclusions, the interlocking can never fully compensate the increase of self-porosity with η. In other words, the extra free volume created by the increasing concavity of the particle borders cannot be filled by the convex borders of neighboring particles. Moreover, an increasing number of large pores appear between the nonconvex borders of the aggregates [see Fig. 23(b)]. For this reason, the combination of self-porosity and interlocking cannot explain the increase of ρ with η in the range [0,0.2]. We also expect that $f(\eta)$ is a decreasing function of η due to increasing angular hindrance between particles as their nonconvexity becomes larger. We assume here a linear decreasing function:

$$f(\eta) = \alpha(1 - \gamma\ \eta). \quad (32)$$

The last term $\Delta V_f^{(3)}$ represents the variation of free volume as a result of the size variation of pores involving only the convex borders of the particles [see Fig. 23(c)]. The radius of curvature of the convex borders is the radius r of the disks,

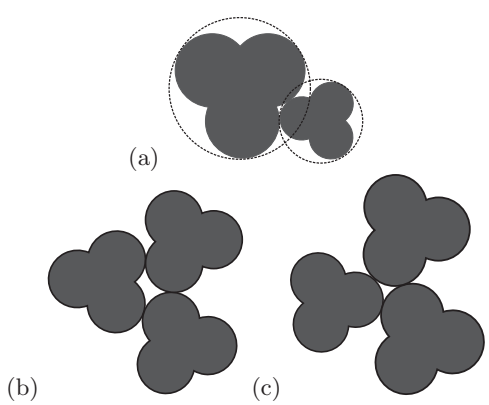


FIG. 23. (a) Overlap between the self-porosities of two aggregates. (b) A pore involving at least one nonconvex border. (c) A pore between the convex borders of aggregates.

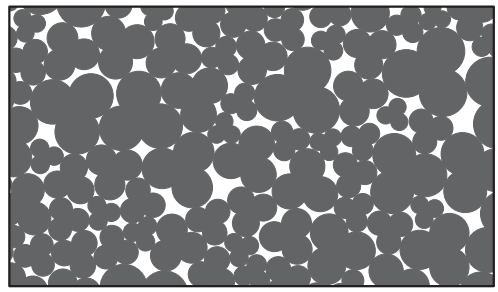


FIG. 24. A snapshot of a portion of the isotropic sample for $\eta = 0.5$.

which declines for a fixed value $R = 1$ of the circumscribing circle. Hence, the volume of a pore between the convex borders of three or more particles decreases as $-r^2$. Therefore, given that $r(\eta = 0) = R = 1$, we set

$$\Delta V_f^{(3)} = \beta(1 - r^2), \quad (33)$$

where β is assumed to be a constant. In contrast to $\Delta V_f^{(1)} - \Delta V_f^{(2)}$, $\Delta V_f^{(3)}$ is a decreasing function of η and it explains the increase of ρ with η in the range [0,0.2]. The reduction of the pores composed of convex borders is clearly observed in Fig. 24, where a snapshot of the isotropic sample is displayed for $\eta = 0.5$. We observe many small pores between the convex borders of the aggregates as well as large pores involving concave borders.

Inserting the expression of V_f from Eq. (29) in Eq. (26) together with Eqs. (30), (31), and (33), we arrive at the following expression for packing fraction:

$$\frac{\rho(\eta)}{\rho(0)} = \frac{V_p}{1 - \alpha\rho(0)(1 - \gamma\ \eta)(1 - V_p) - \beta\rho(0)(1 - r^2)}. \quad (34)$$

Given the expressions of V_p in Eq. (27) and r in Eq. (28) as a function of $\lambda(\eta)$ obtained from the inversion of Eqs. (2) and (34) provides an excellent fit for our data points by adjusting the values of the parameters from the position of the peak and the packing fraction at $\eta = 0.7$ for $\varepsilon_q = 0$ and $\varepsilon_q = 0.5$, as shown in Fig. 25. The best fit is obtained at $\varepsilon_q = 0$ for

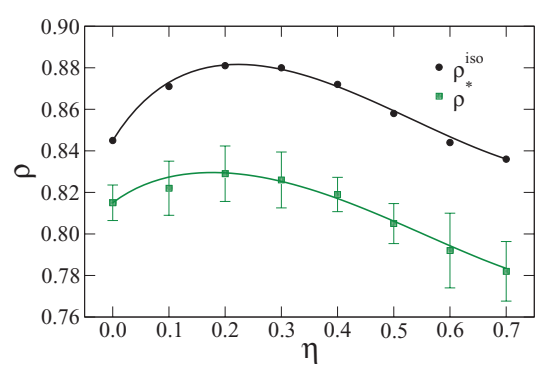


FIG. 25. (Color online) Packing fraction ρ as a function of η in the initial isotropic state and in residual state (at $\varepsilon_q = 0.5$). The symbols are the simulation data, whereas the solid lines are analytical fits by Eq. (34). The error bars represent standard deviation in the residual state.

$\alpha = 0.87$, $\beta = 0.17$, and $\gamma = 0.17$, and at $\varepsilon_q = 0.5$ for $\alpha = 1$, $\beta = 0.11$, and $\gamma = 0.18$.

The main assumption of the simple model introduced above is that the particle shape is inside a circumscribing circle of radius R and it occupies a portion of the total surface πR^2 of the circle with a central part which is fully inscribed in a circle of radius $(1 - \eta)R$. This model can therefore be applied to arbitrary shapes which can be described by similar parameters, and we expect a similar unmonotonic dependence of the packing fraction with respect to η.

IX. DISCUSSION AND CONCLUDING REMARKS

Large packings of nonconvex aggregates were simulated and analyzed in this work with the aim of quantifying the effect of nonconvex particle shape on the behavior of granular materials. The aggregates are of a rather simple shape characterized by a threefold rotational symmetry and a single nonconvexity parameter η varying from 0 (corresponding to a disk) to 0.73 (corresponding to a trimer of mutually contacting disks). The shape dependence appears to be rather nontrivial. One would expect the shear strength to increase with η as a result of interlocking between aggregates. We do observe a linear increase of the shear strength, measured by the internal angle of friction in the residual state, but it saturates to a value independent of η. It is also remarkable that the packing fraction varies unmonotonically with nonconvexity, a feature that seems to be shared with other shapes described by deviation from circular shape.

The saturation of shear strength with nonconvexity recalls a similar effect observed when the friction coefficient is increased between particles in a granular packing [54]. The internal angle of friction in a packing of circular particles increases with friction coefficient, but tends to a constant value that is no more affected by further increase of the friction coefficient. This effect is attributed to the exhaustion of sliding contacts and a self-organization of the particle motions favoring rolling contacts, which do not dissipate energy. A similar picture emerges also from our analysis of the multiple contacts between aggregates. Indeed, an increasing number of aggregates are interlocked so that most double and triple contacts between aggregates are nonsliding. The aggregates move in clusters with relative sliding and rolling localized mainly at the simple and double-simple contacts. At the same time, larger pores occur due to this "clustered" motion of the aggregates and the packing fraction tends to decline. This frictional clustering is therefore a general mechanism, which provides an internal compensation mechanism in conjugation with rolling and free volume change that allow the system to keep a constant level of dissipation.

Another interesting feature of the packings of aggregates is that the connectivity of the aggregates does not follow the packing fraction. The effect of increasing nonconvexity is expressed by an increasing number of multiple contacts with essentially the same number of contact neighbors, whereas the packing fraction increases with η before decreasing to a rather low level. This means that the packing fraction is not a good variable for the plastic behavior of granular materials composed of nonconvex particles. This should not come as a surprise since the expression of stress tensor does not involve the packing fraction. The internal variables exhibited by a harmonic decomposition of the stress tensor are the fabric anisotropy, normal-force anisotropy, and friction mobilization, formulated in terms of the friction force anisotropy. All these anisotropies enter the expression of the shear strength and follow nearly the same trend.

We would like also to underline here the specificity of the isostatic state, which shows a basically invariant structure with regard to the nonconvexity of the aggregates. The coordination number, connectivity, proportions of different types of contact between aggregates and probability densities of forces are independent of nonconvexity. Nevertheless, the variation of packing fraction is unmonotonic with η in the isostatic state, too. This is a major argument in favor of the phenomenological model introduced in this paper for packing fraction with ingredients based on the particle shape rather than a particular state of the material.

Further work is presently under way with more complex nonconvex geometries and in 3D in order to evaluate the robustness of the results presented in this paper. The analysis presented in this paper may be generalized to other particle shapes described by a parameter similar to η, which essentially refers to a deviation from circular shape. This idea was investigated within a benchmark by a collaborative group for different particle shapes. The results of this work will be presented elsewhere.

[1] H. Jaeger and S. Nagel, Rev. Mod. Phys. **68**, 1259 (1996).

[2] B. Cambou and A. Danescu, in *Multiscale Techniques for Granular Materials*, Chap. 3 (Wiley, New York, 2009), pp. 101–145.

[3] F. Radjai, H. Troadec, and S. Roux, in *Granular Materials: Fundamentals and Applications*, edited by S. Antony, W. Hoyle, and Y. Ding (Royal Society of Cambridge, Cambridge, 2004), pp. 157–184.

[4] H. Ouadfel and L. Rothenburg, Mech. Mater. **33**, 201 (2001).

[5] C. Nouguier-Lehon, B. Cambou, and E. Vincens, Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech. **27**, 1207 (2003).

[6] E. Azema, F. Radjai, and G. Saussine, Mech. Mater. **41**, 729 (2009).

[7] A. Donev, F. H. Stillinger, P. M. Chaikin, and S. Torquato, Phys. Rev. Lett. **92**, 255506 (2004).

[8] A. Donev, I. Cisse, D. Sachs, E. Variano, F. H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato, and P. M. Chaikin, Science **303**, 990 (2004).

[9] W. N. Man, A. Donev, F. H. Stillinger, M. T. Sullivan, W. B. Russel, D. Heeger, S. Inati, S. Torquato, and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **94**, 198001 (2005).

[10] E. Azema and F. Radjai, Phys. Rev. E **81**, 051304 (2010).

[11] S. Torquato and Y. Jiao, Phys. Rev. E **82**, 051304 (2010).

[12] U. Agarwal and F. A. Escobedo, Nat. Mater. **10**, 230 (2011).

[13] E. Azema, F. Radjai, R. Peyroux, and G. Saussine, Phys. Rev. E **76**, 011301 (2007).

[14] J. Fourcade, P. Sornay, F. Sudreau, and P. Papet, Powder Metall. **49**, 125 (2006).
[15] F. Radjai and V. Richefeu, Mech. Mater. **41**, 715 (2009).
[16] M. Jean, *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, Chap. Contact Dynamics Method (Wiley, New York, 2011), pp. 27–65.
[17] J. Mitchell and K. Soga, *Fundamentals of Soil Behavior* (Wiley, New York, NY, 2005).
[18] S. Blott and K. Pye, Sedimentology **55**, 31 (2008).
[19] J. J. Moreau, Eur. J. Mech., A/Solids **13**, 93 (1994).
[20] M. Jean, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. **177**, 235 (1999).
[21] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, Geotechnique **29**, 47 (1979).
[22] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, Oxford, 1987).
[23] H. J. Herrmann, Chaos, Solitons Fractals **6**, 203 (1995).
[24] S. McNamara, *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, Chap. Molecular Dynamics Method (Wiley-ISTE, New York, 2011), pp. 1–26.
[25] F. Radjai and S. Roux, Phys. Rev. E **51**, 6177 (1995).
[26] F. Radjai, *Physics of Dry Granular Media*, Chap. Multicontacts Dynamics (Kluwer Academic, Dordrecht/Boston/London, 1997), p. 305.
[27] F. Radjai, S. Roux, and J. J. Moreau, Chaos **9**, 544 (1999).
[28] J. Lanier and M. Jean, Powder Technol. **109**, 206 (2000).
[29] F. Radjai and S. Roux, in *The Physics of Granular Media*, edited by H. Hinrichsen and D. E. Wolf (Wiley-VCH, Weinheim, 2004), pp. 165–186.
[30] F. Dubois, *Discrete-element Modeling of Granular Materials*, Chap. Numerical Modeling of Granular Media Composed of Polyhedral Particles (Wiley-ISTE, New York, 2011), pp. 233–262.
[31] I. Bratberg, F. Radjai, and A. Hansen, Phys. Rev. E **66**, 031303 (2002).
[32] A. Taboada, K. J. Chang, F. Radjai, and F. Bouchette, J. Geophys. Res. **110**, 1 (2005).
[33] C. Voivret, F. Radjai, J. Y. Delenne, and M. S. El Youssoufi, Phys. Rev. E **76**, 021301 (2007).
[34] C. Voivret, Ph.D. thesis, Université de Montpellier 2, 2008.
[35] E. Clement, Colloid Interface Sci. **4**, 294 (1999).
[36] GDR-MiDi, Eur. Phys. J. E **14**, 341 (2004).
[37] L. Rothenburg and A. P. S. Selvadurai, in *Mechanics of Structured Media*, edited by A. P. S. Selvadurai (Elsevier, Amsterdam, 1981), pp. 469–486.
[38] J. J. Moreau, in *Friction, Arching, Contact Dynamics*, edited by D. E. Wolf and P. Grassberger (World Scientific, Singapore, 1997), pp. 233–247.
[39] L. Staron and F. Radjai, Phys. Rev. E **72**, 041308 (2005).
[40] A. Donev, R. Connelly, F. H. Stillinger, and S. Torquato, Phys. Rev. E **75**, 051304 (2007).
[41] I. Agnolin and J.-N. Roux, Phys. Rev. E **76**, 061302 (2007).
[42] I. Agnolin and J.-N. Roux, Phys. Rev. E **76**, 061303 (2007).
[43] I. Agnolin and J.-N. Roux, Phys. Rev. E **76**, 061304 (2007).
[44] C. Liu, S. R. Nagel, D. A. Schecter, S. N. Coppersmith, S. Majumdar, O. Narayan, and T. A. Witten, Science **269**, 513 (1995).
[45] S. N. Coppersmith, C.-h. Liu, S. Majumdar, O. Narayan, and T. A. Witten, Phys. Rev. E **53**, 4673 (1996).
[46] F. Radjai, M. Jean, J.-J. Moreau, and S. Roux, Phys. Rev. Lett. **77**, 274 (1996).
[47] P. T. Metzger, Phys. Rev. E **70**, 051303 (2004).
[48] T. S. Majmudar and R. P. Behringer, Nature (London) **435**, 1079 (2005).
[49] J. H. Snoeijer, W. G. Ellenbroek, T. J. H. Vlugt, and M. van Hecke, Phys. Rev. Lett. **96**, 098001 (2006).
[50] V. Richefeu, M. S. El Youssoufi, E. Azéma, and F. Radjai, Powder Technol. **190**, 258 (2009).
[51] V. Topin, F. Radjai, and J.-Y. Delenne, Phys. Rev. E **79**, 051302 (2009).
[52] B. P. Tighe, J. H. Snoeijer, T. J. H. Vlugt, and M. van Hecke, Soft Matter **6**, 2908 (2010).
[53] L. Rothenburg and R. J. Bathurst, Geotechnique **39**, 601 (1989).
[54] N. Estrada, A. Taboada, and F. Radjai, Phys. Rev. E **78**, 021301 (2008).