



**HAL**  
open science

# Modélisation multi-échelle des matériaux granulaires frottant-cohésifs

Trung Kien Nguyen

► **To cite this version:**

Trung Kien Nguyen. Modélisation multi-échelle des matériaux granulaires frottant-cohésifs. Autre. Université de Grenoble, 2013. Français. NNT : 2013GRENI048 . tel-01062483

**HAL Id: tel-01062483**

**<https://theses.hal.science/tel-01062483>**

Submitted on 9 Sep 2014

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

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

THÈSE

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE**

Spécialité : **Matériaux, Mécanique, Génie Civil, Electrochimie**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

**NGUYEN Trung Kiên**

Thèse dirigée par **Jacques DESRUES**

et codirigée par **Gaël COMBE** et **Denis CAILLERIE**

préparée au sein du **Laboratoire Sols, Solides, Structures - Risques**  
et dans l'**Ecole Doctorale I-MEP 2**

**Modélisation multi-échelle  
des matériaux granulaires  
frottant-cohésifs**

Thèse soutenue publiquement le 17 Décembre 2013,  
devant le jury composé de :

**Mr. Robert CHARLIER**

Professeur, Université de Liège, Président

**Mr. Xavier CHÂTEAU**

Directeur de Recherche, CNRS, Rapporteur

**Mr. Claudio TAMAGNINI**

Professeur, Università Degli Studi Di Perugia, Rapporteur

**Mr. Michel JEAN**

Directeur de Recherche Émérite, CNRS, Examineur

**Mr. Darius SEYEDI**

Docteur, ANDRA, Examineur

**Mr. Jacques DESRUES**

Directeur de Recherche, CNRS, Directeur de thèse

**Mr. Gaël COMBE**

MCF HDR, Université Joseph Fourier, Co-Directeur de thèse

**Mr. Denis CAILLERIE**

Professeur Émérite, Grenoble INP, Co-Directeur de thèse





---

## Remerciements

---

Aucun projet de recherche n'aurait être possible sans appui de beaucoup de gens. Je tiens à remercier dans cette page un certain nombre de personnes qui m'ont aidé à mener à bien ce travail.

Je voudrais tout d'abord exprimer ma profonde gratitude à mes trois directeurs de thèse Jacques Desrues, Gaël Combe et Denis Caillerie pour la confiance qu'ils m'ont accordé, pour leur suivi et leur gentillesse. Merci à Jacques et Gaël qui m'ont proposé ce sujet de thèse et à Denis pour avoir accepté de participer à l'équipe d'encadrement. Il m'a été très agréable de travailler à vos côtés tant personnels que professionnels. Un grand merci à Gaël pour tes conseils précieux, tes encouragements incessants même dans les moments les plus difficiles. J'accorde une pensée particulière à Jacques qui m'a beaucoup aidé, qui m'a guidé et accompagné pendant ces trois années de thèse. Si ce travail est une réussite, c'est en très grande partie grâce à toi.

Tous mes remerciements et un respect profond vont à ceux qui ont accepté la lourde tâche de rapporter ce travail : Xavier Château et Claudio Tamagnini. Leurs remarques fructueuses et précieuses m'ont aidé à améliorer le niveau scientifique de ce travail.

Je voudrais adresser mes remerciements sincères à Robert Charlier qui m'a fait l'honneur d'être président du jury. Merci pour ton accueil chaleureux lors de mon séjour à Liège.

Je remercie également Michel Jean et Darius Seyedi pour avoir accepté de participer à l'évaluation de ce travail et pour les riches discussions que nous avons eu mais aussi pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Je n'oublie pas, non plus, de remercier l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) pour avoir financé cette thèse dans le cadre du projet GeoBridge.

Pendant ces trois années de thèse passées au sein du laboratoire 3SR (**S**ols, **S**olides, **S**tructures et **R**isques), je remercie l'ensemble des membres du laboratoire pour l'ambiance de travail qu'on a partagé, pour votre soutien et notamment le soutien de l'équipe GDR (**G**éomatériaux, **D**éformation, **R**upture) : Cino, Simon, Pierre, René, Khadi, Fabrizio, Ghonwa, Nando, Bram, Eddy, Antoine, Barthélémy, etc. Merci à mes co-bureaux : Hassan, Stéfan, Joanna, Donia et Ewa.

Mes remerciements vont suivant à mes amis vietnamiens avec qui j'ai partagé des moments inoubliables : anh Thang, Thao, chi Tam, Quyen, Linh, Thu, Thao Chi, Tuan

Anh, ... (à Lyon), anh Tuan, anh Lam, Lan, anh Tieng, anh Dung, anh Manh, anh Hung, anh Tuan, chi Nguyet, anh Hung, chi Hang, anh Dung, Trang, Toan, Bao, Hoang Anh, Binh, Ha, Quan, Van, Quynh, Trung, ... (à Grenoble) et Linh (Toulouse - Paris), anh Hanh, anh Bao, chi Vu, les amis du lycée et les amis 49XF.

Enfin, je dois une grande reconnaissance à mes parents et à ma grande sœur qui m'ont toujours écouté, encouragé et soutenu. À eux, je dédie cette thèse.

*Grenoble, le 15 janvier 2013*

NGUYEN Trung Kiên

---

## Résumé

---

Ce travail de recherche présente une modélisation du comportement mécanique des matériaux granulaires cohésifs par une approche multi-échelle combinant la méthode des éléments finis (FEM) et la méthode des éléments discrets (DEM). Le principe de cette approche peut se résumer en disant que la modélisation d'un problème aux limites concernant un domaine constitué d'un matériau de type frottant-cohésif, typiquement un milieu granulaire cimenté ou non, est abordée par une méthode aux éléments finis à l'échelle macroscopique, alors qu'à l'échelle microscopique, la DEM est utilisée pour modéliser l'assemblage granulaire. Afin de faire un pont entre l'échelle micro et macroscopique, un Volume Élémentaire Représentative (VER) est considéré dans lequel la contrainte résultant d'une déformation imposée est obtenue d'un calcul numérique de type DEM. De cette manière, la loi numérique constitutive repose sur la modélisation de la microstructure, et par conséquent prend en compte la nature des matériaux granulaires.

Après avoir exposé la construction de la loi numérique, on propose d'étudier les propriétés de cette loi incrémentale en terme des enveloppes de réponse Gudehus, de l'analyse en bande de cisaillement. Cette étude nous permet d'avoir une vision générale sur cette nouvelle loi.

Ensuite, on implémente la loi numérique DEM dans un code de calcul par éléments finis, ce qui nous donne un outil numérique multi-échelle que nous testons alors sur la simulation d'essais de laboratoire, ainsi que des modèles de problèmes de terrain (cylindre creux, tunnel). Les résultats obtenus montrent l'émergence de solutions avec déformation localisée en bandes de cisaillement ; ces résultats sont analysés et discutés.

**Mots-clés : FEM, DEM, homogénéisation numérique, matériaux granulaires frottant-cohésifs, localisation de la déformation, cylindre creux.**



---

## Abstract

---

This thesis presents a multi-scale modeling approach of cohesive granular materials which combines the Finite Element Method (FEM) and the Discrete Element Method (DEM). At the microscopic level, a DEM is used to model dense grains packing. At the macroscopic level, the numerical solution is obtained by a FEM. In order to bridge the micro and macro scales, the concept of Representative Elementary Volume (REV) is applied, in which the average REV stress and the consistent tangent operators are obtained at each macroscopic integration point as the results of DEM's simulation. In this way, the numerical constitutive law is determined through the detailed modeling of the microstructure, therefore taking into account the nature of granular materials.

After building the numerical law, we investigate the properties of this incremental law in terms of the response envelopes Gudehus and the shear band analysis. This study provides us a deep understanding about this new constitutive law.

Regarding numerical contribution, the numerical law DEM is implemented in a finite element code. The obtained numerical tool is used to simulate a series of biaxial tests in plane strain condition and the hollow cylinder test in laboratory. Macroscopic strain localization is observed and discussed.

**Keywords : FEM, DEM, numerical homogenization, cohesive-frictional granular materials, strain localization, hollow cylinder.**



---

# Sommaire

---

<b>Remerciements</b>	<b>i</b>
<b>Résumé</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>Sommaire</b>	<b>x</b>
<b>Table des figures</b>	<b>xvi</b>
<b>Liste de tableaux</b>	<b>xvii</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Étude bibliographique</b>	<b>5</b>
1.1 Comportement mécanique des matériaux granulaires . . . . .	6
1.1.1 Généralités . . . . .	6
1.1.2 Localisation de la déformation . . . . .	8
1.2 Méthodes numériques existantes . . . . .	13
1.2.1 Méthode des éléments finis (FEM) . . . . .	13
1.2.2 Méthode des éléments discrets . . . . .	14
1.2.3 Couplage entre Éléments Finis / Éléments Discrets (EF/ED) . . .	15
1.3 Approches multi-échelle . . . . .	18
1.3.1 Différentes échelles dans la modélisation numérique . . . . .	18
1.3.2 Homogénéisation statistique dans les milieux granulaires . . . . .	19
1.3.3 Homogénéisation périodique dans les milieux granulaires . . . . .	20
1.4 Conclusion . . . . .	23
<b>2 Modèle micromécanique</b>	<b>25</b>
2.1 Introduction . . . . .	26
2.2 Lois de contact . . . . .	26
2.2.1 Contact avec frottement sans cohésion (contact de type 1) . . . .	27

2.2.2	Milieu cohésif-frottant : Prise en compte de la cohésion dans un modèle numérique . . . . .	28
2.2.3	Mécanisme de dissipation de l'énergie au niveau du contact . . . . .	33
2.3	Conditions aux limites périodiques . . . . .	35
2.3.1	Conditions aux limites de type forces . . . . .	35
2.3.2	Conditions aux limites de type parois souples ou rigides . . . . .	35
2.3.3	Conditions aux limites périodiques (CLP) . . . . .	36
2.4	Simulation des expériences du laboratoire par DEM : Essai biaxial en compression . . . . .	38
2.4.1	Génération d'un échantillon numérique . . . . .	38
2.4.2	Compression isotrope . . . . .	39
2.4.3	Échantillons numériques utilisés . . . . .	41
2.4.4	Compression biaxiale modélisée en DEM . . . . .	44
2.5	Conclusion . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Méthode d'homogénéisation numérique</b>	<b>61</b>
3.1	Introduction . . . . .	62
3.2	Construire une loi par homogénéisation . . . . .	62
3.2.1	Loi numérique DEM . . . . .	62
3.2.2	Enveloppe de réponse incrémentale . . . . .	65
3.2.3	Matrice tangente à la loi . . . . .	70
3.2.4	Tenseur acoustique . . . . .	73
3.2.5	Analyse de la formation de bande de cisaillement . . . . .	74
3.3	Formulation macroscopique . . . . .	83
3.3.1	Loi de comportement macroscopique . . . . .	83
3.3.2	Intégration numérique de la loi de comportement DEM . . . . .	84
3.4	Implémentation de la loi DEM dans ACTIV . . . . .	85
3.5	Application à la modélisation d'ouvrages souterrains . . . . .	87
3.5.1	Introduction . . . . .	87
3.5.2	Détermination des paramètres des modèles . . . . .	87
3.5.3	Notations du calcul . . . . .	90
3.5.4	Chemins de contraintes à proximité de la paroi d'une galerie . . . . .	91
3.5.5	Chemin à rotation des axes principaux . . . . .	98
3.6	Conclusion . . . . .	100
<b>4</b>	<b>Simulation multi-échelle par couplage FEM×DEM</b>	<b>101</b>
4.1	Introduction . . . . .	102
4.2	Implémentation de la loi DEM dans un code éléments finis : le cas du code Lagamine . . . . .	102
4.2.1	Présentation du code de calcul Lagamine . . . . .	102
4.2.2	Implémentation de la loi DEM dans Lagamine . . . . .	104

4.3	Validation du code de calcul multi-échelle FEM $\times$ DEM . . . . .	107
4.3.1	Problème élémentaire . . . . .	107
4.3.2	VER à l'échelle microscopique . . . . .	107
4.3.3	Résultats et discussions . . . . .	109
4.4	Simulation des essais biaxiaux en compression . . . . .	114
4.4.1	Géométrie et conditions aux limites . . . . .	114
4.4.2	Paramètres microscopiques . . . . .	116
4.4.3	Résultats numériques . . . . .	117
4.5	Essai sur un cylindre creux . . . . .	126
4.5.1	Géométrie et conditions aux limites . . . . .	126
4.5.2	Paramètres microscopiques . . . . .	128
4.5.3	Résultats numériques . . . . .	129
4.6	Conclusion . . . . .	138
<b>5</b>	<b>Modélisation multi-échelle des matériaux granulaires cimentés</b>	<b>139</b>
5.1	Introduction . . . . .	140
5.2	Matériaux granulaires cimentés . . . . .	140
5.2.1	Généralités . . . . .	140
5.2.2	Comportement mécanique . . . . .	140
5.3	Modèle micromécanique pour les milieux granulaires cimentés . . . . .	144
5.4	Modélisation FEM $\times$ DEM des essais biaxiaux . . . . .	144
5.4.1	Géométrie et condition aux limites . . . . .	144
5.4.2	Paramètres microscopiques . . . . .	145
5.4.3	Résultats . . . . .	146
5.4.4	Modélisation du grès tendre Fontainebleau . . . . .	155
5.5	Essai sur un cylindre creux . . . . .	163
5.5.1	Géométrie et conditions aux limites . . . . .	163
5.5.2	Paramètres microscopiques . . . . .	163
5.5.3	Résultats numériques . . . . .	164
5.6	Conclusion . . . . .	170
	<b>Conclusions et Perspectives</b>	<b>171</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>175</b>
<b>A</b>	<b>Calcul du tenseur acoustique</b>	<b>189</b>
<b>B</b>	<b>Loi DEM 686 dans Lagamine</b>	<b>191</b>
B.1	Law name . . . . .	191
B.2	Availability . . . . .	191
B.3	Parameters . . . . .	191
B.3.1	Parameters defining the type of constitutive law (2I5,60A1) . . . . .	191

---

B.3.2	Integer parameters (9I5) . . . . .	192
B.3.3	Real parameters (6G10) . . . . .	192
B.3.4	Stress . . . . .	192
B.3.5	State variables . . . . .	192
<b>C</b>	<b>Loi DEM 696 dans Lagamine</b>	<b>195</b>
C.1	Law name . . . . .	195
C.2	Availability . . . . .	195
C.3	Parameters . . . . .	195
C.3.1	Parameters defining the type of constitutive law (2I5,60A1) . . . .	195
C.3.2	Integer parameters (6I5) . . . . .	196
C.3.3	Real parameters (9G10) . . . . .	196
C.3.4	Stress . . . . .	196
C.3.5	State variables . . . . .	196
<b>D</b>	<b>Essai sur un cylindre creux</b>	<b>199</b>
<b>E</b>	<b>Essai biaxial FDBMGC02</b>	<b>207</b>

---

## Table des figures

---

1.1	Essai triaxial de révolution . . . . .	6
1.2	Champ de déplacement des centres des rouleaux dan un essai biaxial de compression par $1\gamma 2\varepsilon$ . . . . .	8
1.3	Observations au laboratoire de la localisation de la déformation . . . . .	10
1.4	Observation in-situ de la localisation de la déformation . . . . .	10
1.5	Localisation en bande de cisaillement . . . . .	11
1.6	Cycle du calcul DEM . . . . .	14
1.7	Couplage bord-à-bord entre les modèles discrets et continus . . . . .	16
1.8	Principe du couplage illustrant une zone d'interaction entre EF/ED . . . . .	16
1.9	Simulation d'un projectile sur une plaque rocheuse par couplage EF/ED . . . . .	17
1.10	Différentes échelles dans la modélisation multi-échelle . . . . .	18
1.11	Principe de changement d'échelle dans les milieux granulaires . . . . .	20
1.12	Définition du milieu périodique et de la cellule de référence . . . . .	21
1.13	Principe de la méthode FEM <sup>2</sup> . . . . .	22
2.1	Deux grains en contact . . . . .	26
2.2	Loi de contact (type 1) purement frottant . . . . .	27
2.3	Critère de Mohr-Coulomb dans le plan de Mohr . . . . .	29
2.4	Loi de contact (type 2) prenant en compte la cohésion normale . . . . .	30
2.5	Rôle de la cohésion normale sur le glissement au contact . . . . .	30
2.6	Critère de rupture du contact de type 3 . . . . .	32
2.7	Critère de rupture en fonction du coefficient d'exposant $n$ (contact de type 3) . . . . .	33
2.8	Modèle rhéologique de Kelvin-Voigt . . . . .	34
2.9	Conditions aux limites de type membranes et de type parois rigides . . . . .	36
2.10	Définition d'une cellule élémentaire. VER en 2D avec CLP . . . . .	37
2.11	Conditions aux limites périodiques (CLP) . . . . .	37
2.12	Évolution de l'indice des vides $e$ et le nombre de contacts en fonction du coefficient de frottement interne $\mu$ après une compression isotrope . . . . .	40
2.13	Évolution de la contrainte pendant la compression isotrope d'un échantillon très dense . . . . .	40

2.14	VER avec CLP : (a) Configuration initiale et (b) après la compression isotrope . . . . .	41
2.15	Distribution de taille de grains et les orientations du contact des VER400 et VER3600 . . . . .	42
2.16	Distribution de taille de grains et les orientations du contact des VER6400, VER10000 et VER22500 . . . . .	43
2.17	Principe de l'essai biaxial avec CLP . . . . .	44
2.18	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : étude sur le nombre de grains . . . . .	45
2.19	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : Influence de l'indice des vides . . . . .	47
2.20	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : Étude sur le rapport $k_n/k_t$ . . . . .	48
2.21	Zoom de la figure 2.20 dans la zone $\varepsilon_{11} = 0 - 0.8\%$ . . . . .	49
2.22	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : Influence du niveau de raideur $\kappa$ . . . . .	50
2.23	Zoom sur la figure 2.22 dans la zone $\varepsilon_{11} = 0 - 1\%$ . . . . .	50
2.24	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : Étude du coefficient de frottement intergranulaire $\mu$ . . . . .	51
2.25	Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : Étude du niveau de cohésion $p^*$ . . . . .	52
2.26	Cercles de Mohr au pic : Étude du niveau de cohésion $p^*$ . . . . .	53
2.27	Valeurs de $C$ et $\varphi$ au pic correspondant à $p^*$ . . . . .	54
2.28	Réponse du VER22500 : les points étudiés sont numérotés . . . . .	55
2.29	Chaînes des forces dans un essai biaxial sur un VER22500 . . . . .	55
2.30	Transformations linéaires planes . . . . .	56
2.31	Fluctuation de déplacement d'un échantillon VER22500 à différents états de déformations . . . . .	58
3.1	Principe de l'enveloppe de réponse Gudehus . . . . .	66
3.2	Réponse du VER400. Les points étudiés en rouge . . . . .	67
3.3	Enveloppes de réponses à l'état isotrope (point A) . . . . .	67
3.4	Enveloppes de réponses à l'état au pic (point B) . . . . .	68
3.5	Enveloppes de réponses à l'état critique (point C) . . . . .	69
3.6	Enveloppes de réponses à l'état critique (point C) : zoom sur la figure 3.5 . . . . .	69
3.7	Représentation du schéma numérique du calcul de la matrice tangente à la loi . . . . .	72
3.8	L'orientation de la bande : définition de l'angle d'orientation $\theta$ . . . . .	73
3.9	Deux différents modes de cisaillement . . . . .	74
3.10	Analyse <i>en-axes</i> et <i>hors-axes</i> . . . . .	75

3.11	Analyse <i>en-axes</i> . Comparaison des composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec différentes valeurs de $(\alpha, \varepsilon)$ . . . . .	77
3.12	Analyse <i>en-axes</i> . Composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$ . . . . .	78
3.13	Analyse <i>en-axes</i> . Analyse du tenseur acoustique . . . . .	79
3.14	Analyse <i>hors-axes</i> . Comparaison des composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec différentes valeurs de $(\alpha, \varepsilon)$ . . . . .	80
3.15	Analyse <i>hors-axes</i> . Composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$ . . . . .	81
3.16	Analyse <i>hors-axes</i> . Analyse du tenseur acoustique . . . . .	82
3.17	Schéma du calcul d'homogénéisation . . . . .	84
3.18	Compilation des essais disponibles . . . . .	88
3.19	Comparaison modèle DEM – expériences sur le chemin TC 12 MPa . . . . .	89
3.20	Définition des axes dans une galerie . . . . .	91
3.21	Cas 1.1 : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	92
3.22	Cas 1.1 : Réponse en déformation . . . . .	93
3.23	Cas 1.2 : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	94
3.24	Cas 1.2 : Réponse en déformation . . . . .	94
3.25	Cas 1.3 : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	95
3.26	Cas 1.3 : Réponse en déformation . . . . .	96
3.27	Cas 1.4 : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	97
3.28	Cas 1.4 : Réponse en déformation . . . . .	97
3.29	Cas 2 : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	99
3.30	Cas 2 : Réponse en déformation . . . . .	99
4.1	Appel des routines dans Lagamine au point de Gauss . . . . .	105
4.2	Représentation du schéma numérique du calcul de la matrice tangente consistante . . . . .	106
4.3	Géométrie du problème élémentaire . . . . .	107
4.4	Essais élémentaires : Différents VER utilisés à l'échelle microscopique . . . . .	108
4.5	Calcul FEM $\times$ DEM d'un essai élémentaire de 1 élément Q8 avec différents VER à l'échelle microscopique . . . . .	110
4.6	Calcul FEM $\times$ DEM : l'utilisation de la matrice tangente consistante . . . . .	112
4.7	Définition de la matrice auxiliaire élastique . . . . .	113
4.8	Calcul FEM $\times$ DEM : Utilisation de la matrice tangente consistante et de la matrice auxiliaire élastique . . . . .	113
4.9	Essais biaxiaux : Représentation des différents maillages du problème et les conditions aux limites . . . . .	115
4.10	Essais biaxiaux : Elément Q8 avec 4 points d'intégration de Gauss; un VER de 400 grains est disposé en chaque point de Gauss . . . . .	115
4.11	Essais biaxiaux : VER 400 grains utilisé . . . . .	116

4.12	Essais biaxiaux : Réponse macroscopique. FEM $\times$ DEM de 128 éléments avec DEM de différents nombres de particules . . . . .	117
4.13	Essais biaxiaux : Réponse macroscopique. FEM $\times$ DEM de différents types de maillage avec DEM 40000 particules . . . . .	118
4.14	Essais biaxiaux : Structure déformée à $\varepsilon_{11} = 3\%$ . . . . .	120
4.15	Essais biaxiaux : Iso valeur du second invariant du tenseur de déformation à $\varepsilon_{11} = 3\%$ . . . . .	120
4.16	Bandes de cisaillement dans les calculs biaxiaux par DEM purs . . . . .	121
4.17	Essais biaxiaux : Évolution des microstructures des points de Gauss de l'élément 46 . . . . .	122
4.18	Essais biaxiaux : Évolution des microstructures des points de Gauss de l'élément 52 . . . . .	123
4.19	Essais biaxiaux : Contraintes principales dans un point de Gauss des élément 46 et 52 . . . . .	124
4.20	Essais biaxiaux : Direction principale de la contrainte dans un point de Gauss de l'élément 52 . . . . .	125
4.21	Modèle 2D du cylindre creux . . . . .	126
4.22	Modélisation d'un cylindre creux : Numéroter et dimensionner les éléments Q8 . . . . .	127
4.23	Modélisation d'un cylindre creux : Discrétisation d'un quart d'une section entière en éléments finis Q8 . . . . .	128
4.24	Modélisation d'un cylindre creux : Chemin de sollicitation en contrainte . . . . .	129
4.25	Modélisation d'un cylindre creux : Location des profils de déplacement . . . . .	130
4.26	Modélisation d'un cylindre creux : Contraintes principales à l'instant final $t = 10000 s$ . . . . .	131
4.27	Modélisation d'un cylindre creux : Carte du $2^{nd}$ invariant du tenseur de déformations . . . . .	132
4.28	Modélisation d'un cylindre creux : Zoom sur la zone localisée de la figure 4.27.f . . . . .	133
4.29	Modélisation d'un cylindre creux : Allure des bandes de cisaillement à $t = 10000 s$ . . . . .	133
4.30	Modélisation d'un cylindre creux : Profil du déplacement à $t = 10000 s$ . . . . .	134
4.31	Modélisation d'un cylindre creux : Déplacement de la paroi intérieure à $t = 10000 s$ . . . . .	134
4.32	Modélisation d'un cylindre creux : Positions des éléments considérés. . . . .	135
4.33	Modélisation d'un cylindre creux : Évolution des microstructures des éléments 4, 7, 13, 16 . . . . .	136
4.34	Modélisation d'un cylindre creux : Évolution des microstructures des éléments 51, 72, 362, 379 . . . . .	137
5.1	Essai triaxial sur les grès de Vosges . . . . .	141

5.2	Bandes de cisaillement dans les essais triaxiaux sur les grès de Vosges . . .	142
5.3	Microstructure des zones cisillées sur le grès Fontainebleau à différents confinements . . . . .	143
5.4	Géométrie de l'essai biaxial par FEM $\times$ DEM . . . . .	144
5.5	VER utilisés à l'échelle microscopique . . . . .	146
5.6	Essais biaxiaux en compression : réponses macroscopiques . . . . .	147
5.7	Essais biaxiaux en compression : structure déformée des essais <i>FDBMGC01</i> , <i>FDBMGC02</i> , <i>FDBMGC03</i> . . . . .	149
5.8	Essais biaxiaux en compression : carte du second invariant du tenseur de déformation totale des essais <i>FDBMGC01</i> , <i>FDBMGC02</i> , <i>FDBMGC03</i> . . .	150
5.9	Évolution des microstructures à $\varepsilon_1 = 0.3\%$ . . . . .	152
5.10	Évolution des microstructures à $\varepsilon_1 = 1.15\%$ . . . . .	153
5.11	Évolution des microstructures à $\varepsilon_1 = 6\%$ (état critique) . . . . .	154
5.12	Essais triaxiaux sur les grès Fontainebleau . . . . .	156
5.13	Essais triaxiaux sur les grès Fontainebleau – rupture dans les échantillons	156
5.14	Modélisation du grès Fontainebleau. Microstructure du VER . . . . .	158
5.15	Modélisation du grès Fontainebleau : Comparaison entre le résultat numérique / expérimental . . . . .	159
5.16	Essai d'extension par la simulation FEM $\times$ DEM . . . . .	160
5.17	Cercles de Mohr au pic des essais expérimentaux et numériques . . . . .	160
5.18	Modélisation du grès Fontainebleau : Structure déformé à différents $\varepsilon_{11}$ dans un essai biaxial en compression . . . . .	162
5.19	Modélisation du grès Fontainebleau : Carte du second invariant du tenseur de déformation à différents $\varepsilon_{11}$ dans un essai biaxial en compression . . .	162
5.20	Modélisation d'un cylindre creux. VER 400 grains utilisé à l'instant initial	164
5.21	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du 2 <sup>nd</sup> invariant du tenseur de déformations . . . . .	165
5.22	Modélisation d'un cylindre creux : Allure des bandes de cisaillement à $t = 10000 s$ . . . . .	166
5.23	Modélisation d'un cylindre creux : positions des éléments considérés. . . .	167
5.24	Évolution des microstructures des éléments 1, 2, 12, 20 . . . . .	168
5.25	Évolution des microstructures des éléments 37, 75, 91, 355 . . . . .	169
A.1	L'orientation de la bande : définition de l'angle d'orientaion $\theta$ . . . . .	189
D.1	Essai sur un cylindre creux . . . . .	199
D.2	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du 2 <sup>nd</sup> invariant du tenseur de déformations à $t = 20, 280, 1000, 2000, 3000, 4000 s$ . . . . .	200
D.3	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du 2 <sup>nd</sup> invariant du tenseur de déformations à $t = 5000, 6000, 6800, 7400, 8000, 8400 s$ . . . . .	201

D.4	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du $2^{nd}$ invariant du tenseur de déformations à $t = 8800, 9200, 9600, 10000, 10400, 10800$ s . . . . .	202
D.5	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du $2^{nd}$ invariant du tenseur de déformations à $t = 11200, 11600, 12000, 12400, 12800, 13200$ s . . . . .	203
D.6	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du $2^{nd}$ invariant du tenseur de déformations à $t = 13600, 13800, 14000, 14200, 14400, 14600$ s . . . . .	204
D.7	Modélisation d'un cylindre creux. Carte du $2^{nd}$ invariant du tenseur de déformations à $t = 14800, 15000, 15200, 15400, 15600, 15800$ s . . . . .	205
E.1	Location des éléments 12 et 24 . . . . .	207
E.2	Évolution des microstructures à $\varepsilon_{11} = 0, 0.27, 0.51\%$ . . . . .	208
E.3	Évolution des microstructures à $\varepsilon_{11} = 0.86, 1.15, 1.42\%$ . . . . .	209
E.4	Évolution des microstructures à $\varepsilon_{11} = 2.44, 4.33, 6.00\%$ . . . . .	210

---

## Liste des tableaux

---

2.1	Caractéristiques des VER à l'état isotrope. . . . .	41
2.2	Paramètres du critère Mohr-Coulomb correspondant à $p^*$ . . . . .	53
3.1	Algorithme de la routine numérique de type DEM. . . . .	65
3.2	État de contraintes du VER considéré se composant de 400 grains. . . . .	66
3.3	Analyse en bande de cisaillement : Caractéristiques du VER. . . . .	76
3.4	Analyse en bande de cisaillement : Paramètres microscopiques de type 2. . . . .	76
3.5	Algorithme général de l'ACTIV. . . . .	86
3.6	Caractéristiques du VER choisi. . . . .	90
3.7	Paramètres de la loi de contact utilisée (contact de type 2). . . . .	90
3.8	Valeurs des composantes de tenseur de contraintes. . . . .	100
4.1	Algorithme général de Lagamine. . . . .	103
4.2	Essais élémentaires : Caractéristiques des VER à l'échelle microscopique. . . . .	109
4.3	Essais élémentaires : Paramètres de la loi DEM de type 2. . . . .	109
4.4	Essais élémentaires : Comparaison en terme du temps de calcul. . . . .	111
4.5	MTC/MAE : Comparaison en terme du temps de calcul. . . . .	114
4.6	Essais biaxiaux : Paramètres du modèle microscopique (DEM) de type 2. . . . .	116
4.7	Essais biaxiaux : nombre de contacts à l'état déformé. . . . .	124
4.8	Modélisation d'un cylindre creux : Paramètres de la loi DEM de type 2. . . . .	129
5.1	Essais biaxiaux : Paramètres du modèle microscopique de type 3. . . . .	145
5.2	Modélisation du grès Fontainebleau : Caractéristiques du VER. . . . .	158
5.3	Modélisation du grès Fontainebleau : Paramètres du modèle microscopique de type 3. . . . .	158
5.4	Modélisation du grès Fontainebleau : Paramètres du critère Mohr-Coulomb. . . . .	161
5.5	Essai sur un cylindre creux : Paramètres du modèle microscopique de type 3. . . . .	164



---

## Introduction générale

---

Cette thèse menée au laboratoire **Sols, Solides, Structures - Risques (3SR)**, Grenoble, s'inscrit dans le cadre d'un projet nommé *GeoBridge* financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) et s'intéressant à la "**rupture des géomatériaux cohésifs : lien entre les échelles.**"

L'endommagement des géomatériaux peut se produire à plusieurs échelles : à l'échelle de l'ouvrage (fractures, surfaces de glissement), à l'échelle de l'essai de laboratoire (fracture, plan de rupture), ou plus près de la microstructure (fissures inter- ou intra-granulaires). On rencontre très souvent l'endommagement localisé sous forme des bandes de cisaillement ou de compaction (Bésuelle [14], Bésuelle *et al.* [15], Desrues [60], Desrues et Viggiani [69], Olsson [139], etc.). Une altération importante à la fois des propriétés mécaniques et de transport peuvent survenir avec l'endommagement, ce qui peut avoir des implications importantes pour la stabilité et la viabilité des ouvrages. Cependant, ces effets sont mal connus et souvent négligés, ou mal pris en compte, dans la modélisation. Ce projet a pour objectif de faire des progrès importants dans les observations expérimentales et dans la modélisation à la rupture des géomatériaux cohésifs en prenant en compte les évolutions microstructurales et en établissant le lien entre les comportements à différentes échelles.

Dans ce contexte, la présente thèse contribue à la **modélisation multi-échelle à la rupture des matériaux granulaires frottant-cohésifs**. Ce travail vise à lier l'évolution microstructurale due à la déformation, au comportement macroscopique du matériau. Le lien entre les études micromécaniques et les approches continues à l'échelle macroscopique est l'une des directions émergentes en mécanique des matériaux, et pas seulement en géomécanique. L'approche *numérique* de la mécanique multi-échelle est en effet un domaine de recherche relativement nouveau, qui a été débuté depuis un peu de temps mais a eu un impact significatif sur de nombreuses disciplines scientifiques et techniques (Feyel [74], Feyel et Chaboche [75], Fish [78], [79], Geers *et al.* [82], Ghosh *et al.* [83], [84], Kouznetsova *et al.* [101], [102], Meier *et al.* [114], Miehe et Dettmar [115], Miehe *et al.* [116], etc.).

Comment faire le pont entre l'échelle micro et macroscopique? Les modèles qui rendent en compte à la fois de ces deux échelles doivent être construits en utilisant les techniques d'homogénéisation dans lesquelles les micro-mécanismes (qui dépend du géo-

matériaux) peuvent être décrites. On considère ici un micro-mécanisme qui consiste en la destruction de la cohésion inter- ou intra- granulaire dans des assemblages de grains cohésifs-frottants. L'objectif est alors de développer par une méthode d'homogénéisation numérique (Caillerie et Cambou dans Cambou et Jean [30], Weber [183]) une loi équivalente, qui sera capable de prendre en compte la complexité du milieu granulaire liée à sa nature discrète, anisotrope et hétérogène. Pour ce faire, la modélisation de l'échelle microscopique repose sur un calcul numérique de type éléments discrets (Méthode des éléments discrets – DEM) (Cundall [48], [49], Cundall et Strack [52]). Dans cette démarche, la réponse d'une microstructure (Volume Élémentaire Représentatif – VER) obtenue par DEM avec les conditions aux limites périodiques (CLP) (Combe et Roux, Radjai et Voivret dans Radjai et Dubois [145]) est utilisée comme une loi constitutive à l'échelle macroscopique, laquelle est traitée par la méthode des éléments finis (FEM) (Zienkiewicz [186]). Dans les matériaux granulaires cohésifs, le VER contiendra des grains avec les interfaces cohésives. Dans nos modèles, la décohésion entre les grains est possible, elle résulte du dépassement d'un critère de rupture du contact cohésif, induisant ainsi un mécanisme d'endommagement qui remonte naturellement à l'échelle macroscopique.

La localisation de la déformation est un phénomène qui a été largement étudié en géomécanique et aussi pour différents types de matériaux tels que les métaux et les polymères. Les études expérimentales (Vardoulakis *et al.* [175], Desrues [60], Desrues *et al.* [66], Tatsouka *et al.* [167], Finno et Viggiani [77], Bésuelle *et al.* [15]) et théoriques (Rice [150], Rudnicki et Rice [158], Vardoulakis *et al.* [175], Kolymbas [99], Darve [54], Desrues et Chambon [64], Bigoni et Hueckel [17], [18], Chambon *et al.* [38], Sulem *et al.* [164], Desrues et Chambon [65]) ont été menées depuis 30 ans afin de mieux comprendre ce phénomène. L'apparition de la bande de cisaillement est associée à une concentration de la déformation dans cette zone. Ce phénomène trouve sa source dans un mécanisme local de dégradation du matériau (endommagement), induisant un affaiblissement local qui tend à s'autoamplifier pour peu qu'une structure cinématique compatible se mette en place, comme une bande de cisaillement.

Grâce à cette méthode multi-échelle, on a l'intention de simuler différents types d'endommagement dans les régimes fragile ou ductile, notamment l'apparition des bandes de cisaillement. Enfin, on s'intéresse également à la capacité prédictive de cette méthode pour des problèmes concrets : dans quelle mesure peut-on l'utiliser, le coût en terme de temps CPU n'est-il pas rédhibitoire ? Cela sera fait par le biais de simulations d'essais géotechniques tels qu'on les pratique au laboratoire.

Dans l'objectif de construire et valider la méthode numérique multi-échelle FEM  $\times$  DEM appliquée aux matériaux granulaires frottant-cohésifs, ce rapport s'articule autour de 5 chapitres.

Dans un premier temps, de brefs rappels sur le comportement mécanique des matériaux granulaires, sur le phénomène de localisation de la déformation dans les milieux

granulaires et sur les méthodes numériques existantes dans la littérature sont présentés.

Le deuxième chapitre est consacré aux modèles micromécaniques utilisables dans la méthode des éléments discrets (DEM), et à l'influence des différents paramètres de ce type de modèle.

Les trois chapitres suivants sont le cœur de ce mémoire.

Le chapitre 3 explicite la construction d'une loi continue pour le milieu à microstructure en se basant sur la méthode DEM, *i.e. en considérant les interactions entre les particules qui constituent le matériau*. Les propriétés de la loi construite telles que l'enveloppe de réponse incrémentale (Gudehus [86]) et l'analyse de bifurcation (Rice [150], Desrues et Chambon [65]) sont également abordées.

Dans le chapitre 4, la loi continue équivalente construite dans le chapitre précédent est implémentée dans un code de calcul en éléments finis généraliste (code Lagamine, Université de Liège). Des simulations numériques en utilisant l'outil numérique développé pour modéliser des essais biaxiaux (Desrues [60], Mokni [119], Mokni et Desrues [120]) ou sur un cylindre creux (Labiouse *et al.* [104], Labiouse et Vietor [105]) sont présentées. Dans tous les cas étudiés, la localisation de la déformation est observée et analysée. Dans chaque calcul, l'analyse de la microstructure des points d'intégration les plus caractéristiques (situés dans les bandes ou au contraire dans le blocs) montre la grande capacité descriptive et prédictive de cette méthode multi-échelle.

Le mémoire se poursuit, avant sa conclusion, par un chapitre 5 qui ouvre une nouvelle perspective avec l'application à des VER plus complexes, en même temps qu'une loi de contact cohésif-frottant plus élaborée inspirée des travaux de Delenne [57], Delenne *et al.* [59]. À nouveau, des simulations numériques de problèmes type illustrent les capacités de ce nouveau développement.



---

## Étude bibliographique

---

*Dans ce chapitre de bibliographie, le comportement des matériaux granulaires est brièvement présenté. Ensuite, les méthodes numériques existantes pour étudier ce type de matériau sont rappelées d'une manière succincte. Le chapitre se termine par un bilan sur les méthodes de changement d'échelle impliquant la méthode d'homogénéisation, trouvées dans la littérature.*

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Comportement mécanique des matériaux granulaires . . . . .</b>	<b>6</b>
1.1.1	Généralités . . . . .	6
1.1.2	Localisation de la déformation . . . . .	8
<b>1.2</b>	<b>Méthodes numériques existantes . . . . .</b>	<b>13</b>
1.2.1	Méthode des éléments finis (FEM) . . . . .	13
1.2.2	Méthode des éléments discrets . . . . .	14
1.2.3	Couplage entre Éléments Finis / Éléments Discrets (EF/ED) . . . . .	15
<b>1.3</b>	<b>Approches multi-échelle . . . . .</b>	<b>18</b>
1.3.1	Différentes échelles dans la modélisation numérique . . . . .	18
1.3.2	Homogénéisation statistique dans les milieux granulaires . . . . .	19
1.3.3	Homogénéisation périodique dans les milieux granulaires . . . . .	20
<b>1.4</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>23</b>

---

## 1.1 Comportement mécanique des matériaux granulaires

### 1.1.1 Généralités

Lanier [106] a décrit les matériaux granulaires comme une classe intermédiaire entre fluides et solides qui peuvent s'écouler comme les fluides (avalanche, vidange de silos, etc.) mais aussi résister à un déviateur de contrainte important (comme les solides). Ce type de matériaux s'inscrit dans la catégorie des matériaux à structure complexe, anisotrope et fortement hétérogène. Leur comportement mécanique dépend des interactions à l'échelle des particules qui les constituent. Ce comportement n'est que partiellement réversible dans une limite très restreinte et est également non-linéaire.

On trouve également dans Cambou *et al.* [31] une définition par Radjai et Lanier : *Les matériaux granulaires sont des assemblages denses de particules solides avec un espace poral souvent occupé par une phase interstitielle fluides (eau, air, etc.) ou solide (ciment, pâte, etc.). Les particules interagissent par les forces de contact telles que répulsion élastique, frottement et adhésion ou par l'intermédiaire de la phase interstitielle. Le chargement mécanique d'un matériau granulaire entraîne à la fois la déformation des particules et des réarrangements collectifs des particules.*

Pour commencer, on s'intéresse d'abord à leur comportement global.

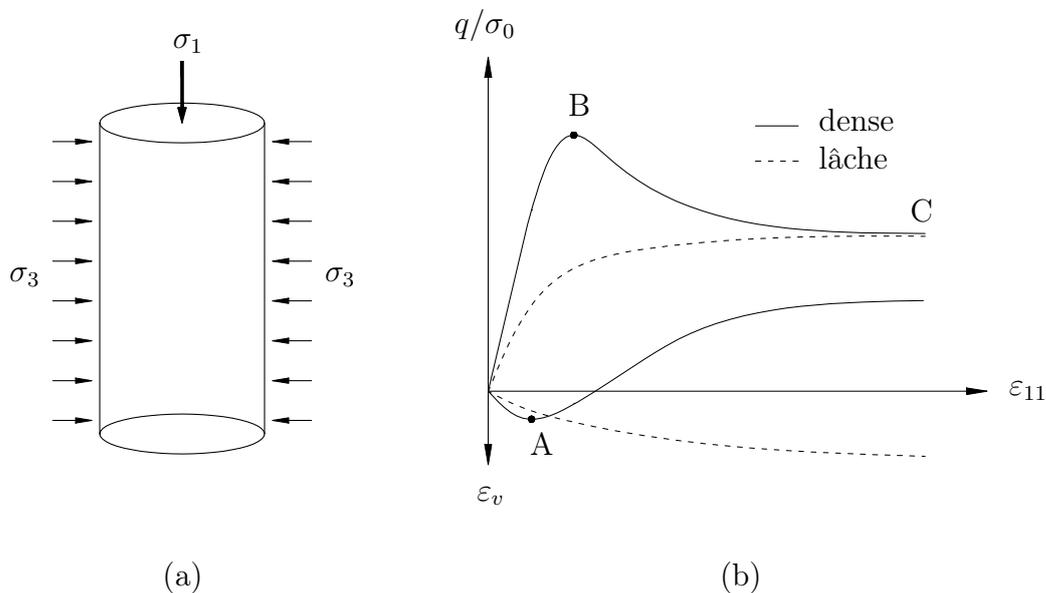


FIGURE 1.1 – Essai triaxial de révolution (Chareyre [40], Combe [45]) : (a) Schéma de principe ; (b) Comportement d'un sable, l'essai drainé.

La figure 1.1 détaille le comportement global typique sur un sable dans un essai triaxial de révolution. On constate que son comportement dépend fortement de la compacité de l'échantillon étudié : selon qu'il est dense ou lâche, il se comporte différemment et les caractéristiques globales enregistrées sont très marquées et bien distinguées. Le

comportement d'un échantillon dense commence par une phase de contractance (taux de déformation volumique négatif,  $d\varepsilon_v < 0$ ) suivi d'une phase de dilatance (taux de déformation volumique positif,  $d\varepsilon_v > 0$ ). La transition de ces deux phases est appelée *l'état caractéristique* (point A) du matériau. Comme on le voit sur cette figure, le comportement d'un matériau dense représente un pic bien marqué (point B). En revanche, la courbe macroscopique d'un matériau lâche ne présente pas de pic même à fort confinement. Néanmoins, en grandes déformations, ces deux échantillons tendent vers un même plateau (point C) ne dépendant pas de leur intensité initiale, qui est *l'état critique* du matériau.

En raison de leur nature discrète constituée par les particules, les matériaux granulaires soumis au chargement sont le siège de différents phénomènes locaux, *i.e.* à *l'échelle des grains*. Ces phénomènes peuvent être décrits par les variables locales. Lanier et Radjai dans Cambou et Jean [30] ont proposé d'analyser ces variables et de distinguer des *variables de texture, variables cinématiques et variables statiques*.

*Les variables de texture* sont définies par les paramètres permettant de décrire la configuration d'un milieu granulaire, c'est-à-dire la géométrie du milieu : nombre de grains, leurs forme et taille, courbe granulométrie, positions relatives entre les grains, l'ensemble de contacts. La texture granulaire évolue sous chargement. Cette évolution dépend des contacts gagnés ou perdus et du changement de l'orientation de contacts, et elle induit une anisotropie dans le milieu granulaire. Au cours d'une déformation, les contacts gagnés ont tendance à s'orienter dans la direction de la contrainte principale majeure et en revanche, les contacts perdus sont généralement observés dans la direction de la contrainte principale mineure (Oda [136], Radjai *et al.* [146]).

Reliées directement à une description de la déformation des milieux granulaires, *les variables cinématiques* sont les déplacements des particules. Chaque grain possède trois degrés de liberté en 2D (deux translations et une rotation) et six degrés de liberté en 3D (trois translations et trois rotations).

Calvetti *et al.* [27] ont réalisé des essais expérimentaux sur les matériaux Schneebeli formés de rouleaux en bois empilés verticalement dans une machine de cisaillement  $1\gamma 2\varepsilon$  (Joer *et al.* [96]) au laboratoire 3S, Grenoble. Sur la figure 1.2, les flèches représentent les déplacements mesurés des centres des particules alors que les lignes continues sont les lignes de courant des déplacements prévus par la Mécanique des Milieux Continus (MMC). On constate que le champ de déplacement des grains est en accord avec ce qui est prévu par la MMC. En ce qui concerne les rotations des grains, ces auteurs ont également observé que la rotation moyenne des particules est presque égale à la rotation de l'échantillon.

Les forces de contact sont considérées comme *les variables statiques* d'un assemblage granulaire. Ces forces apparaissent si le matériau granulaire est soumis à un chargement. Le réseau de contact et ses forces de contact assurent la capacité de réagir à un chargement et à la transmission des efforts internes. La transmission des efforts dans un

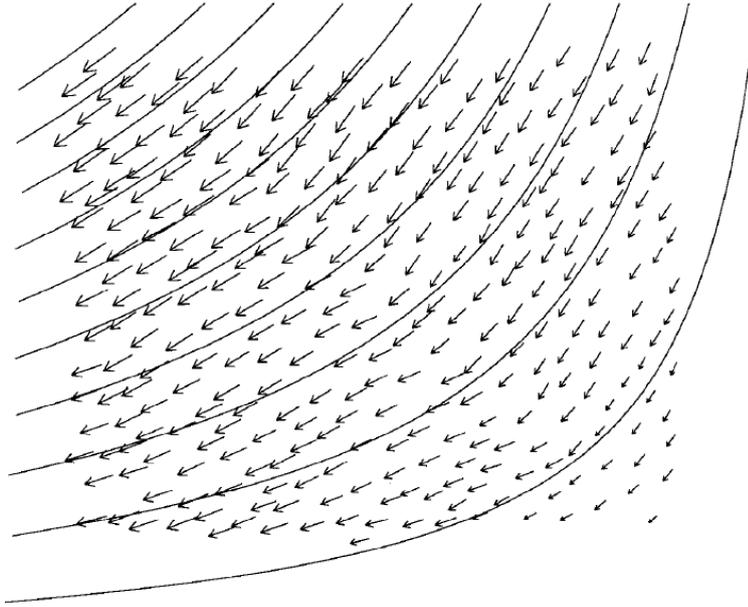


FIGURE 1.2 – Champ de déplacement des centres des rouleaux (flèches) dan un essai biaxial de compression et lignes de courant (ligne continue) correspondant à la déformation supposée homogène (d’après Calvetti *et al.* [27]).

milieu granulaire a été mise en évidence par l’observation des inhomogénéités des forces par une technique photo-élastique, réalisée par Dantu [53]. Néanmoins, les techniques expérimentales rencontrent des difficultés pour mesurer les forces tangentielles.

Parallèlement, les simulations numériques ont avancé et ont permis d’analyser la distribution et transmission de ces efforts par la représentation complète des chaînes des forces. Radjai *et al.* [147] ont distingué deux classes distinctes de forces de contact qui contribuent différemment à l’anisotropie, à l’effort de cisaillement. Les efforts de cisaillement sont entièrement transmis par l’intermédiaire d’un *réseau fort* de contacts, assisté par un ensemble de contact appartenant à un *réseau faible* (Azéma *et al.* [8]). En plus, les forts contacts sont orientés parallèlement à l’axe de compression et le réseau fort est plus anisotrope que le réseau faible.

### 1.1.2 Localisation de la déformation

La localisation de la déformation est un des problèmes les plus typiques des grandes déformations dans les géomatériaux. Ce phénomène apparaît lorsque la structure est proche de la rupture. La localisation est généralement associée à la déformation plastique du matériau (Desrues et Chambon [65]). Les zones de localisation sont plus connues sous le nom de *bandes de cisaillement*; la déformation de la structure associe alors une ou plusieurs de ces bandes, et un certain nombre de blocs quasi-rigides.

Les études expérimentales et théoriques ont été menées depuis 30 ans afin de mieux comprendre ce phénomène. La localisation de la déformation a été observée à différentes

échelles : de l'échelle des ouvrages à l'échelle des expériences du laboratoire. Les paragraphes suivants rappellent les principales observations expérimentales, en se limitant ici aux milieux granulaires.

### 1.1.2.1 Observations expérimentales au laboratoire et in-situ

#### Observations au laboratoire

La localisation de la déformation dans les milieux granulaires se manifeste dans la plupart des essais au laboratoire (essais triaxiaux, essais de déformation plane) et elle a été beaucoup étudiée dans la littérature.

Pour les sols et les matériaux granulaires : les études expérimentales présentées par Vardoulakis et ses collaborateurs (Han et Vardoulakis [89]; Vardoulakis *et al.* [175], Vardoulakis et Graf [176]), Tatsouka *et al.* [167], [168], Arthur et ses collaborateurs (Arthur et Dunstan [6], Arthur *et al.* [7]), Finno et ses collaborateurs (Finno *et al.* [76], Finno et Viggiani [77]), Desrues et ses collaborateurs (Bésuelle *et al.* [15], Desrues [60], [61], Desrues *et al.* [66], [68], Mokni et Desrues [120]), et les autres études sur roches (Bésuelle *et al.* [15], [16], El Bied *et al.* [72]) ont permis de tirer plusieurs conclusions importantes dont Desrues et Chambon [65] ont listé :

- La localisation de la déformation dans les bandes de cisaillement peut être observée dans la plupart d'essais de laboratoire, conduisant à la rupture dans les géomatériaux,
- Les régimes complexes de la localisation de la déformation peuvent provenir des conditions aux limites particulières ou les conditions de chargement,
- Un pic bien marqué dans le plan contrainte – déformation est considéré comme un signe d'apparition de bande de cisaillement,
- Les mesures aident à identifier l'orientation de la bande,
- L'orientation ne change pas brusquement avec l'angle de Lode.

La figure 1.3 présente différents résultats sur les travaux de localisation de la déformation. Ce phénomène a été constaté dans différentes campagnes expérimentales menées au laboratoire. Sur cette figure, la figure à gauche est un exemple typique de la déformation localisée pour un essai triaxial axisymétrique ; la figure au centre montre une bande de cisaillement obtenue avec un essai biaxial à Grenoble ; la dernière image à droite est le résultat obtenu par corrélation d'images (DIC<sup>1</sup>).

---

1. Digital Image Correlation.

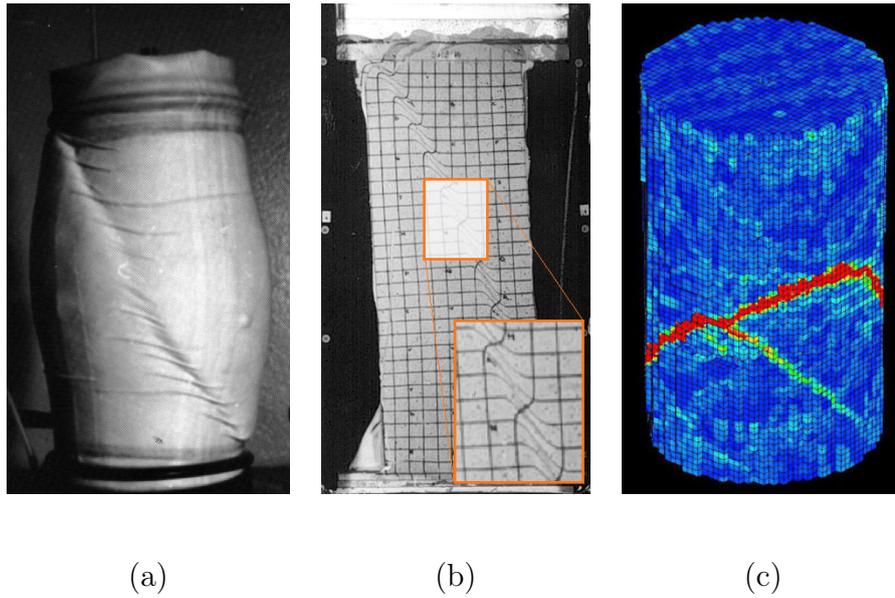


FIGURE 1.3 – Observations au laboratoire de la localisation de la déformation : (a) essai triaxial axisymétrique sur le sable Hostun (Colliat-Dangus *et al.* [44]) ; (b) essai biaxial sur le sol (Desrues [62]) ; (c) essai triaxial de compression sur l'argilite (Bésuelle *et al.* [16]).



FIGURE 1.4 – Observation in-situ de la localisation de la déformation : tremblement de terre en Turquie en 1999.

### Observations in-situ

On observe la localisation de la déformation non seulement à l'échelle du laboratoire, mais aussi à grande échelle, *i.e.* l'échelle des ouvrages.

La figure 1.4 est la photo d'une ligne de train déformée après le tremblement de terre survenu en Turquie en 1999. Cette photo est souvent utilisée pour montrer l'observation in-situ de la localisation de la déformation, elle est également présentée par plusieurs auteurs Desrues [62], Marinelli [112], Viggiani [177].

#### 1.1.2.2 Cadre théorique

Au niveau théorique, la théorie de la bifurcation est le cadre de référence pour une prise en compte théorique de la localisation de la déformation. L'application de la théorie de bifurcation à l'apparition des bandes de cisaillement a été développée par Rice [150] et Rudnicki et Rice [158] dans l'objectif de prévoir l'apparition d'une bande de cisaillement. Dans cette théorie, la bande de cisaillement est traitée comme un problème de perte d'unicité de la solution du problème mécanique représentatif de la structure étudiée. Cette approche a été développée ultérieurement par divers auteurs pour les sols (Darve [54], Desrues et Chambon [64], Kolymbas [99], Vardoulakis *et al.* [175]), puis pour les roches tendres (Bésuelle [13], Chambon *et al.* [38], Sulem *et al.* [164], Vardoulakis [174]) et pour les matériaux non-associés (Bigoni et Hueckel [17], [18]). Nous rappelons ci-dessous en quelques lignes les équations de base telles que posées dans Rice [150].

#### Localisation en bande de cisaillement

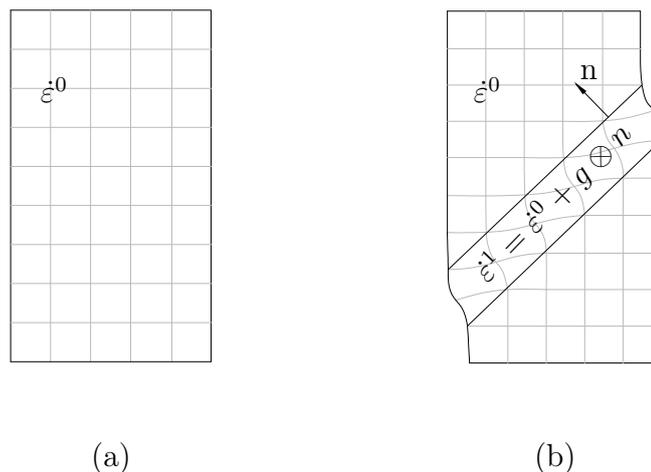


FIGURE 1.5 – Localisation en bande de cisaillement : (a) champ homogène ; (b) champ localisé.

Afin de donner le principe du critère, on se limite ici au cas des petites déformations.

L'émergence d'une bande de cisaillement dans une structure doit répondre à des conditions cinématique et statique, tout en respectant la loi de comportement du matériau. On considère le milieu homogène, déformé de façon homogène jusqu'à l'état actuel. La vitesse de déformations et le taux de contraintes sont notés respectivement  $\dot{\varepsilon}_{kl}$  et  $\dot{\sigma}_{ij}$ . Dans le mode de localisation envisagé, la condition cinématique s'écrit :

$$\dot{\varepsilon}_{kl}^1 = \dot{\varepsilon}_{kl}^0 + g_k \cdot n_l \quad (1.1)$$

où  $g_k$  représente le gradient de vitesse dans la direction  $\vec{n}$ . C'est-à-dire la déformation dans la bande est somme du champ courant et d'un champ additionnel qui est  $g_k \cdot n_l$ .

La condition statique exprime la continuité du vecteur de contraintes  $\sigma \cdot n$  au passage de l'intérieur de la bande à l'extérieur :

$$\dot{\sigma}_{ij}^0 \cdot n_j = \dot{\sigma}_{ij}^1 \cdot n_j \quad (1.2)$$

En ce qui concerne la loi de comportement du matériau, cette relation constitutive relie la vitesse de contrainte à la vitesse du gradient de déformation. Cette relation peut s'écrire :

$$\dot{\sigma}_{ij} = \mathcal{G}_{ij}(\dot{\varepsilon}_{kl}) \quad (1.3)$$

À partir des équations (1.2) et (1.3), en combinant avec l'équation (1.1), on obtient une relation qui prévoit que l'existence d'un mode de déformation localisé sous forme de bande de cisaillement est possible s'il existe une direction  $n$  telle, pour  $g$  non nul, on ait :

$$[\mathcal{G}_{ij}(\dot{\varepsilon}_{kl}^0 + g_k \cdot n_l) - \mathcal{G}_{ij}(\dot{\varepsilon}_{kl}^0)] \cdot n_j = 0 \quad (1.4)$$

Pour une loi incrémentale quelconque, des développements complémentaires sont nécessaires à partir de l'équation (1.4) pour obtenir un critère de localisation (Chambon *et al.* [37], [38], Darve [55]) ; suivant les modèles, un critère explicite peut être obtenu ou non, et dans ce dernier cas, on est réduit à une exploration numérique. Pour le cas des lois de comportement incrémentalement linéaires, la loi de comportement s'écrit sous forme :

$$\dot{\sigma}_{ij} = L_{ijkl} \cdot \dot{\varepsilon}_{kl} \quad (1.5)$$

Un calcul simple combinant (1.4) et (1.5) amène alors la condition :

$$(n_j \cdot L_{ijkl} \cdot n_l) \cdot g_k = 0 \quad (1.6)$$

Il existe toujours la racine triviale  $g_k = 0$  pour l'équation (1.7). La localisation apparaît s'il existe une racine non-triviale. On obtient ainsi la condition classique :

$$\det(nLn) = 0 \quad (1.7)$$

La condition  $\det(nLn) = 0$  ne fait intervenir que la matrice tangente à la loi  $L$  et la normale de la bande  $\vec{n}$ . Le tenseur  $nLn$  est appelé le *tenseur acoustique*.

## 1.2 Méthodes numériques existantes

Dans les paragraphes suivants, quelques méthodes permettant de modéliser le comportement des matériaux granulaires seront présentées brièvement.

### 1.2.1 Méthode des éléments finis (FEM)

La FEM (de l'anglais "**F**inite **E**lement **M**ethod") est une méthode de résolution numérique applicable à un grand nombre de problèmes techniques qui intéressent les ingénieurs et les physiciens. Cette méthode est à l'origine une méthode de résolution des problèmes aux limites pour des équations aux dérivées partielles ou différentielles linéaires. Le problème est mis sous sa forme faible qui est le point de départ de la mise en œuvre de la FEM.

La FEM est une méthode de Galerkin, qui consiste à chercher une approximation du champ inconnu (le déplacement en mécanique) sous une forme discrétisée qui est une combinaison linéaire de fonctions de base prédéterminées. Les coefficients de la combinaison linéaire sont appelés les degrés de liberté de la discrétisation. La détermination de l'approximation du champ inconnu se ramène à celle des degrés de liberté. Pour obtenir autant d'équations qu'il y a d'inconnues discrètes, on prend successivement pour champ test (les vitesses virtuelles en mécanique) les fonctions de base servant à la discrétisation.

Dans la FEM, le domaine sur lequel sont posées les équations est découpé en sous-parties, de forme triangulaire ou quadrangulaire en général pour un problème 2D. Ces sous-parties sont les *éléments finis* de cette discrétisation géométrique, les sommets des éléments sont les nœuds. À chaque nœud est associée une fonction de base qui vaut une en ce nœud et qui est nulle aux autres nœuds. Ce choix des fonctions de base fait que les degrés de liberté de la discrétisation du champ inconnu sont directement les valeurs aux nœuds de ce champ, cela simplifie grandement l'interprétation des degrés de liberté.

Cette méthode de résolution a été initialement développée pour résoudre les problèmes linéaires, elle s'applique désormais à de nombreuses situations, dans lesquelles des phénomènes non-linéaires et couplés peuvent être rencontrés. La non-linéarité peut provenir de la loi de comportement ou de la présence de grandes déformations. En général, on ramène la résolution du problème non-linéaire à celle d'une suite de problèmes linéarisés par la méthode itérative de Newton, le problème linéaire de chaque itération étant résolu par la FEM.

Pour avoir plus de détails sur cette méthode FEM, le lecteur pourra se reporter aux ouvrages de Hughes [91], Reddy [149] et Zienkiewicz [186].

### 1.2.2 Méthode des éléments discrets

L'approche par éléments discrets considère les grains indépendamment les uns des autres et consiste à intégrer le mouvement des grains décrit par l'équation de la deuxième loi de Newton. C'est pourquoi on l'appelle aussi la famille des méthodes Newtoniennes. Cette famille peut être classée en deux grandes catégories suivant les façons de modéliser les interactions entre les particules du milieu étudié.

- Les méthodes non-régulières du type *Non Smooth Discrete Element Method* qui prennent en compte les chocs sans interpénétration des grains et du frottement de Coulomb. On peut citer des exemples de cette famille : la méthode de dynamique événementielle *Event Driven* (voir Mc Namara dans Radjai et Dubois [145]) ou la méthode de dynamique des contacts *Contact dynamics*, développée notamment par J.J. Moreau et M. Jean, qu'on introduit plus loin.
- Les méthodes régulières *Smooth Discrete Element Method* permettent l'interpénétration des grains qui sont en contact. Ces interactions sont représentées par des fonctions continues et différentiables. Les appellations méthodes de Dynamique moléculaire *Molecular dynamics* ou les méthodes des éléments discrets *Discrete Element Method (DEM)* sont utilisées fréquemment pour désigner cette seconde catégorie. Dans la suite, nous utiliserons la désignation "méthode des éléments discrets ou méthode DEM" pour parler de la méthode régulière.

**La méthode DEM** classique a été initiée par Cundall et Strack [52]. Elle a pour objectif d'étudier les problèmes mis en jeu dans les matériaux granulaires et les géomatériaux comme les sables, le béton ou les roches. Cette méthode traite des assemblages de corps rigides tels que les disques, les sphères, les polygones, etc. Les interactions entre particules sont modélisées par des ressorts et des amortissements. L'équation dynamique est intégrée par un schéma explicite.

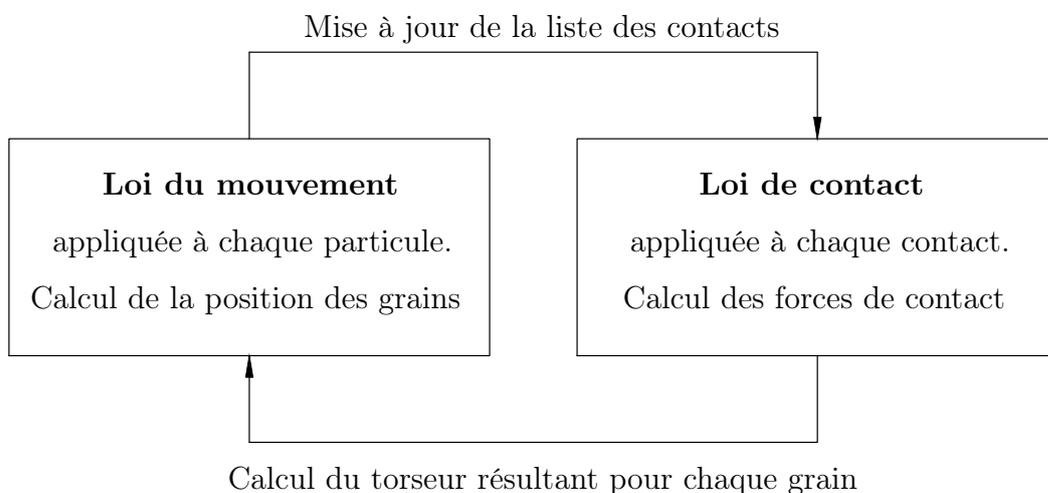


FIGURE 1.6 – Cycle du calcul DEM.

Proposée par Moreau [122] et puis Jean et Moreau [95], Jean [94], la **méthode dynamique des contacts** s'inscrit dans le cadre des méthodes non régulières. Ces méthodes utilisent des lois ne prenant en compte que les traits principaux de l'unilatéralité et du frottement, décrits par des applications non-différentiables, exigeant des méthodes implicites et itératives. Cette méthode considère les particules comme parfaitement rigide, il n'y a donc aucune élasticité du matériau au niveau de contacts. Contrairement à la méthode DEM, cette méthode nécessite une intégration implicite de l'équation du mouvement.

La **méthode quasistatique** se fonde sur les matrices de raideur de l'assemblage granulaire. L'utilisation de cette méthode est encore rare dans la littérature. Les lecteurs intéressés peuvent trouver des détails dans Combe [46], Combe et Roux [47], Roux et Combe [155] et Kaneko *et al.* [97]. Cette méthode est appropriée pour l'analyse des assemblages granulaires à l'équilibre ou en déformation quasistatique.

### 1.2.3 Couplage entre Éléments Finis / Éléments Discrets (EF/ED)

Le choix d'un modèle approprié est réalisé en fonction de l'objectif de modélisation. La DEM est conçue spécifiquement pour étudier les matériaux à l'échelle des grains. À cause de la limitation des puissances d'ordinateur, il n'est pas réaliste de modéliser les problèmes aux limites avec cette méthode. Afin d'assurer un meilleur fonctionnement, un couplage avec d'autres modèles existants comme la FEM est indispensable.

La notion de couplage EF/ED est évoquée à partir des années 80. Toutefois, elle recouvre des propositions très différentes dans leur principe. Les premiers chercheurs s'intéressant à ce type de couplage (EF/ED) furent les physiciens qui cherchaient à coupler une description continue par FEM et une méthode discontinue de type dynamique moléculaire. Des contributions importantes sont apportées par Belytschko et Xiao [11], Cundall *et al.* [50], Miller et Tadmor [118], Munjiza [124], Munjiza *et al.* [125], Oñate et Rojek [135], Owen *et al.* [142], Wellmann et Wriggers [184], Xiao et Belytschko [185].

Un premier principe d'association entre les éléments finis (EF) et les éléments discrets (ED) dans une approche numérique d'un problème aux limites consiste à juxtaposer des sous-domaines traités les uns en EF, les autres en ED. Les éléments discrets sont employés pour modéliser les sous-domaines à une échelle plus fine que celle des éléments finis. La représentation par éléments finis réduit considérablement le nombre d'inconnues à manipuler.

En effet, dans la modélisation du comportement des matériaux ou de la structure, une déformation très élevée dans le matériau induit des discontinuités très marquées des propriétés des matériaux : l'apparition et la propagation de fissures. Dans ce cas, les ED sont requis au voisinage des fissures tandis que le reste de la structure est calculé par un modèle continu (*i.e.* EF).

Le "couplage" dans cette approche désigne le raccordement à effectuer, du point de vue mécanique, entre les sous-domaines ainsi définis. Pour ce faire, il est nécessaire de

spécifier un opérateur capable de transformer une fonction discrète en fonction continue. L'interaction entre ces deux modèles est représentée sous forme des échanges à leurs frontières. Et c'est là que la difficulté majeure venant des différentes natures des forces subies par les deux modèles trouve place. En fait, un modèle continu (EF) est représenté par une relation entre la déformation locale et la contrainte locale. En revanche, les interactions entre les ED sont décrites par les forces et les déplacements des particules. Cette différence engendre des effets inattendus dans la zone d'échange entre ces deux modèles : l'existence de réflexion d'ondes lors du transfert des ondes mécaniques du modèle discret vers le modèle continu (Wagner et Liu [181], Xiao et Belytschko [185]); ou bien les forces fantômes dues à une résultante des forces non nulle dans la zone frontière (Miller et Tadmor [118]).

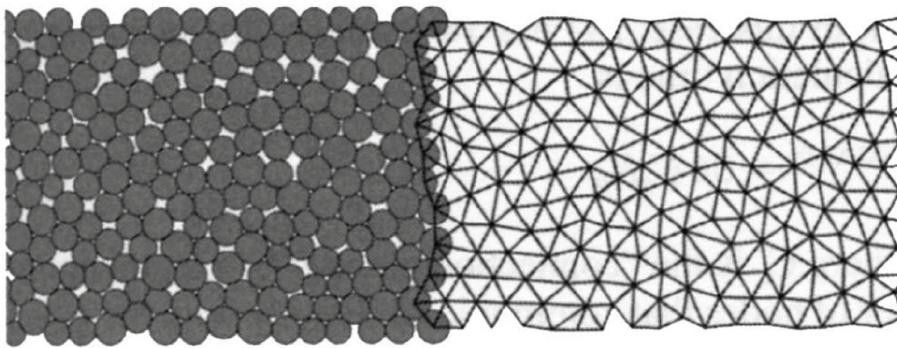


FIGURE 1.7 – Couplage bord-à-bord entre les modèles discrets et continus (d'après Cundall *et al.* [50]).

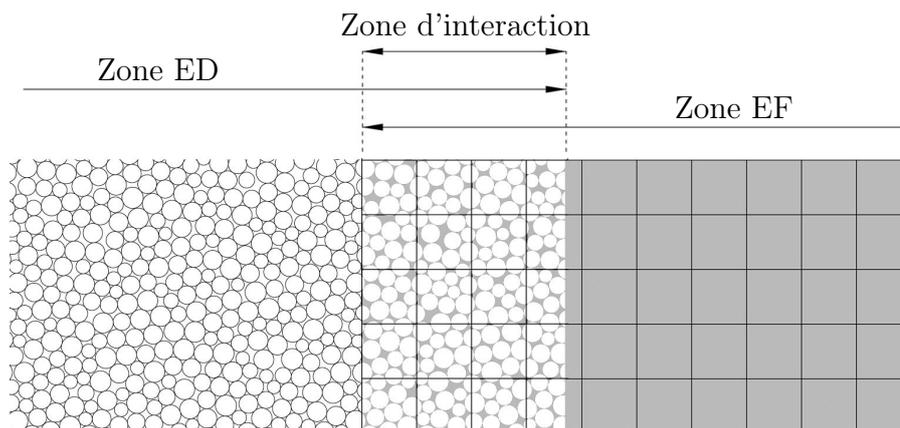


FIGURE 1.8 – Principe du couplage illustrant une zone d'interaction entre EF/ED (Belytschko et Xiao [11]).

Pour réaliser ce couplage de sous-domaines EF et ED, plusieurs approches sont proposées dans la littérature :

Le **couplage bord à bord** (figure 1.7) est la méthode la plus simple à réaliser, il existe cependant des réflexions d'ondes mécaniques lors du traitement des problèmes dynamiques (Xiao et Belytschoko [185]). Dans ce couplage, le domaine est divisé en deux parties se rejoignant via une interface de frontière. Afin de limiter les problèmes de réflexion d'ondes, le maillage par EF est raffiné afin d'associer chaque nœud à l'échelle des ED. C'est-à-dire qu'à la frontière, la position des nœuds EF coïncide avec celle des ED (Cundall *et al.* [50]). Néanmoins, cette utilisation limite donc le gain en temps de calcul.

Belytschko et Xiao [11] propose d'effectuer un **couplage avec une zone de recouvrement** (figure 1.8) entre les deux modèles et de coupler les degrés de liberté (DDL) dans la zone de recouvrement par des multiplicateurs de Lagrange. La zone de recouvrement est une zone mixte entre les deux modèles et le couplage est réalisé par pondération énergétique.

Munjiza [124], Owen *et al.* [142] ont créé ce qu'ils ont appelé la **méthode combinée** qui consiste à considérer initialement l'ensemble de la structure discrétisée par EF et à transformer EF en ED lorsqu'un critère de fissuration est atteint. En effet, il est difficile de choisir un critère de transition approprié qui se base absolument sur les critères d'endommagement du matériau.

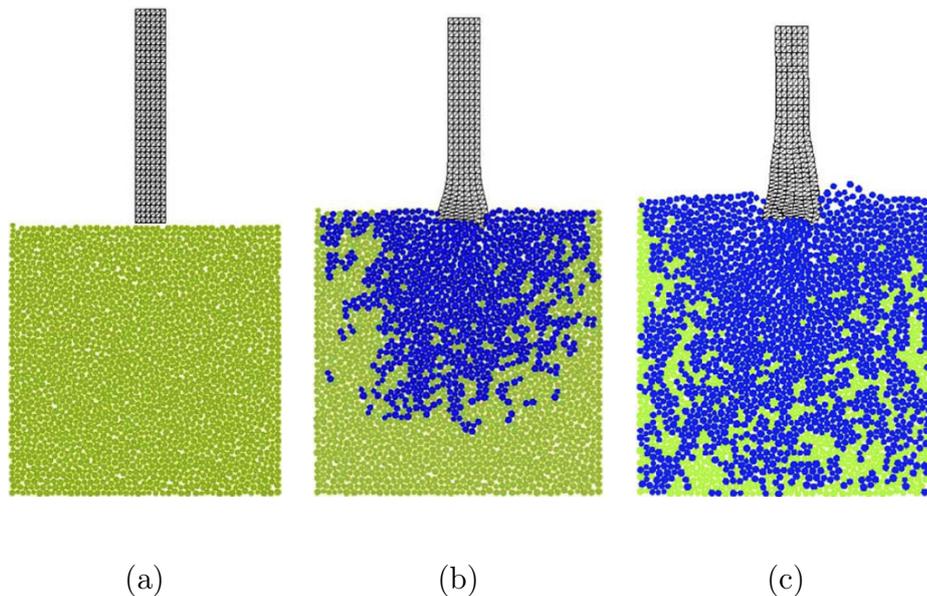


FIGURE 1.9 – Simulation d'un projectile sur une plaque rocheuse par couplage EF/ED (d'après Oñate et Rojek [135]).

Parmi plusieurs exemples dans la famille du couplage entre EF/ED, la figure 1.9 présente un exemple typique. Un essai afin d'étudier l'impact d'un projectile sur une plaque rocheuse est réalisé. Le projectile est discrétisé en éléments finis (EF) quadrilatéraux alors que la plaque rocheuse se compose des disques en 2D, *i.e.* par *éléments discrets* (ED). La déformation du projectile ainsi que l'apparition des zones endom-

magées sont affichées sur cette figure. On constate que cette méthode de couplage est véritablement bien adaptée au problème de type dynamique sous impact. Néanmoins, le problème venant des limitations du nombre des particules ED utilisées n'est pas encore réglé.

Une dernière approche de couplage EF/ED, qui est celle que nous développons dans ce travail, pourrait être appelée "**couplage intégral**" bien que ce terme ne soit pas établi. Nous parlerons donc ici plus simplement d'approche multi-échelle numérique, et ce sera l'objet de la section 1.3.3.2. Ce couplage consiste à mener en parallèle deux niveaux de modélisation, ou plus précisément des modélisations à deux niveaux : le macro et le micro, en établissant le lien entre les deux niveaux, idéalement en tout point du domaine macroscopique, et pratiquement non pas en tout point mais en un nombre discret de points, qui seront les points d'intégration des éléments dans le cas (qui est le nôtre) où le problème macro est discrétisé en éléments finis. C'est dans l'imbrication complète des deux niveaux de modélisation que le terme de "couplage intégral" pourrait trouver sa justification. Cette approche est présentée dans la section suivante.

### 1.3 Approches multi-échelle

#### 1.3.1 Différentes échelles dans la modélisation numérique

On a vu que le comportement global des matériaux granulaires était fortement lié à leur comportement microscopique. De plus, leur comportement microscopique est hétérogène par nature, il est donc intéressant d'envisager une méthode multi-échelle afin de prendre en compte tous les aspects du matériau. Les différentes échelles dans l'approche multi-échelle sont généralement illustrées sur la figure 1.10.

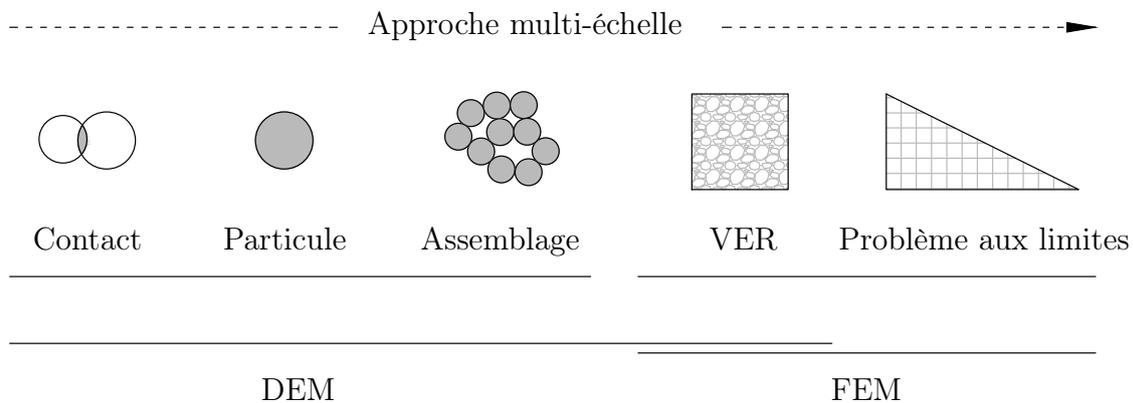


FIGURE 1.10 – Différentes échelles dans la modélisation multi-échelle.

On remarque que chaque méthode numérique est appropriée à certaines échelles. La DEM est bien adaptée à l'échelle des contacts et à l'échelle d'un Volume Élémentaire

Représentatif (VER) tandis que la FEM est absolument nécessaire lors de la résolution numérique d'un problème aux limites à l'échelle d'un ouvrage.

L'échelle la plus petite dans ce schéma (figure 1.10) est celle des particules et des contacts entre elles. La relation entre les particules est décrite sous forme de leurs interactions, et des cinématiques relatives dues à ces échanges locaux.

L'échelle macroscopique (globale) permet de résoudre le problème aux limites en utilisant les lois constitutives décrivant le comportement global du matériau. Ces lois constitutives sont définies sur un VER. Le choix d'un VER constitue donc un point important dans la modélisation multi-échelle.

Afin de relier les différentes échelles, les *techniques d'homogénéisation* ont été développées. L'objectif de ces techniques consiste, en particulier, à définir un modèle de comportement à l'échelle du VER, utilisable par exemple dans une modélisation de type éléments finis, à partir du comportement défini à l'échelle plus petite dite échelle micro, *i.e. l'échelle du grain dans un matériau granulaire* (Caillerie et Cambou dans Cambou et Jean [30], Cambou et Danescu dans Cambou *et al.* [31]); ou à étudier simultanément des phénomènes dans toutes les échelles concernées. Ces méthodes d'homogénéisation sont divisées en deux grandes familles : les méthodes (semi) analytiques et les méthodes numériques. Les techniques d'homogénéisation peuvent être appliquées à un milieu aléatoire ou supposé périodique. Pour le premier cas, on parlera d'homogénéisation statistique ; le deuxième concerne l'homogénéisation périodique.

### 1.3.2 Homogénéisation statistique dans les milieux granulaires

L'homogénéisation statistique ne permet pas d'obtenir une solution exacte, mais des solutions approchées. Son schéma général est résumé sur l'image 1.11. Comme le montre la figure, les passages entre les échelles se font par des opérateurs d'homogénéisation et de localisation<sup>2</sup>.

La figure 1.11 illustre le schéma général du changement d'échelle dans les milieux granulaires. Les techniques d'analyse cinématique ou statique nous permettent d'effectuer ce passage de l'échelle. Les déformations  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , et les contraintes  $\boldsymbol{\sigma}$  sont respectivement les variables cinématiques et statiques de haut niveau ; alors que les déplacements  $\boldsymbol{u}$ , les rotations  $\boldsymbol{\omega}$  des particules et les forces de contact  $\boldsymbol{F}$  sont les variables cinématiques et statiques à petite échelle. Les variables de l'échelle macroscopique sont reliées par une loi constitutive macroscopique alors qu'à l'échelle microscopique, la liaison entre les variables est assurée par la loi constitutive microscopique.

Ce schéma a l'avantage de construire une loi de comportement globale du matériau en se basant sur les interactions locales. Pour définir cette loi associée à la loi locale, il suffit d'utiliser les opérateurs de passage entre ces deux niveaux. Suite à cela, deux possibilités peuvent être envisagées : la première consiste à construire une loi de type  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\varepsilon})$  dans

2. Dans le contexte des méthodes d'homogénéisation, le mot "localisation" désigne l'opération inverse de l'homogénéisation et il n'a pas le même sens que dans l'étude de la déformation localisée.

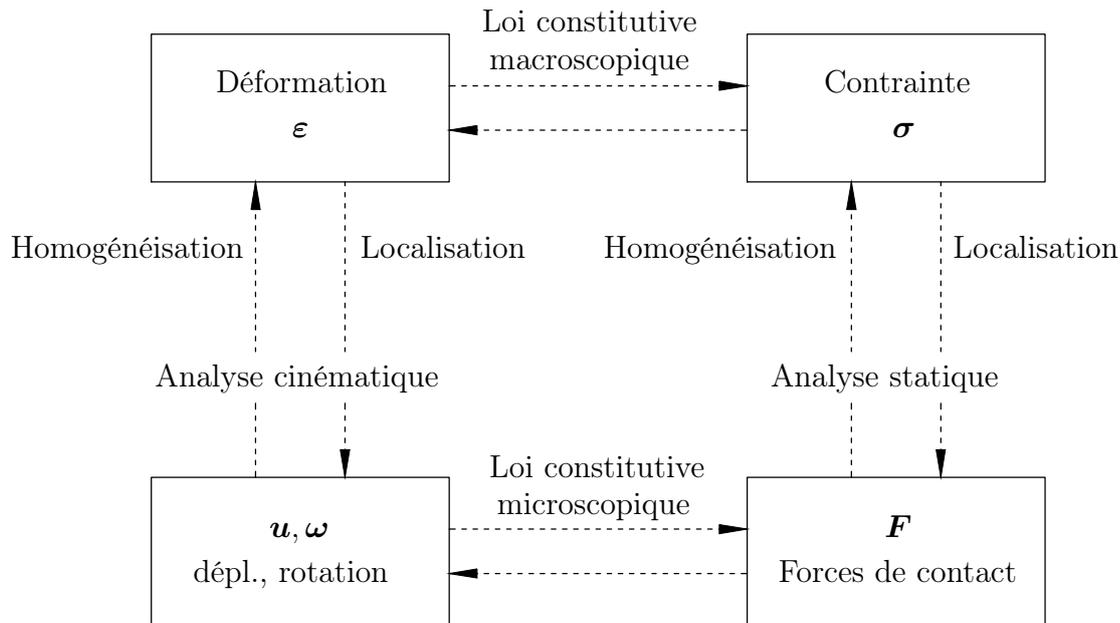


FIGURE 1.11 – Principe de changement d’échelle dans les milieux granulaires (d’après Cambou [29]).

laquelle le tenseur des contraintes est fonction du tenseur des déformations. En revanche, le second est une relation inverse sous forme  $\epsilon = f(\sigma)$ .

On trouve dans la littérature plusieurs approches de ce type d’homogénéisation. Parmi celles-ci, dans un article de revue publié en 1994, Chang et Liao [39] ont proposé deux modèles afin d’étudier le comportement élastique d’un milieu granulaire : le premier est basé sur une hypothèse de localisation cinématique tandis que le deuxième suit une démarche statique. Dans la première proposition, ils ont défini le déplacement relatif à partir de la déformation globale et la force de contact. Le tenseur de contraintes était évalué par l’intermédiaire d’un opérateur de moyenne ; dans le deuxième modèle, en se basant sur une hypothèse de localisation statique, les efforts de contacts sont estimés à partir des variables statiques. La loi de contact permet ensuite de définir les déplacements relatifs entre les particules en contact et l’opérateur de moyenne et conduit à un tenseur de déformations.

Dans leurs travaux, Cambou *et al.* [29] et Emeriault *et al.* [73] ont estimé les paramètres de comportement élastique linéaire d’un milieu granulaire, le module d’Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ .

### 1.3.3 Homogénéisation périodique dans les milieux granulaires

#### 1.3.3.1 Approche analytique

En mécanique des milieux continus, afin de traiter un milieu hétérogène à structure périodique, on suppose que ce milieu est finement périodique, c’est-à-dire  $l \ll L$  où  $l$

et  $L$  sont respectivement les dimensions des hétérogénéités (petite échelle) et du milieu (grande échelle). Un paramètre de séparation d'échelles est ainsi défini  $\varepsilon = l/L$  (voir la figure 1.12). Ce milieu périodique peut être homogénéisé en utilisant la méthode de convergence mathématique ou les développements asymptotiques (Caillerie et Cambou dans Cambou et Jean [30]).

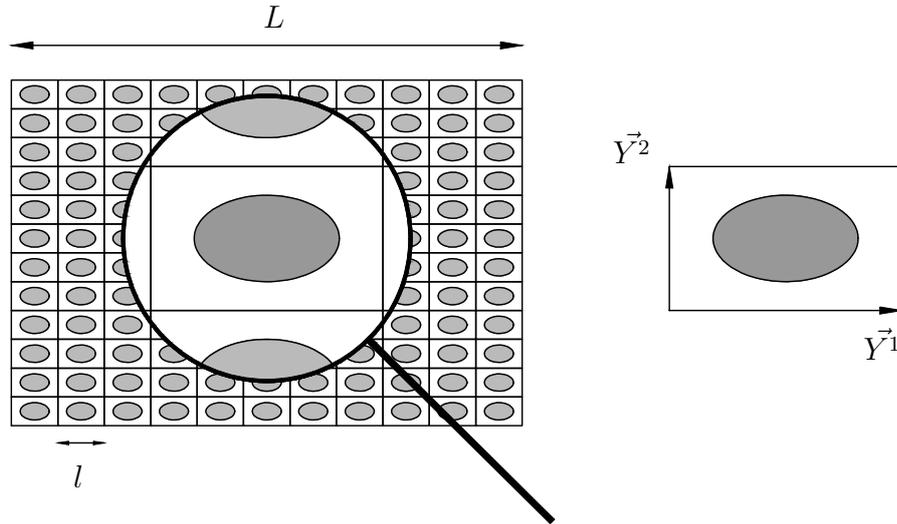


FIGURE 1.12 – Milieu périodique et cellule de référence  $Y$  définie par les deux vecteurs  $\vec{Y}^1$  et  $\vec{Y}^2$  (d'après Caillerie [25]).

Dans ce contexte, la méthode d'homogénéisation asymptotique, introduite dans Bensoussan *et al.* [12] et Sanchez-Palencia [159], a été largement utilisée. Comme l'indique son nom, cette méthode est basée sur un développement asymptotique des champs par rapport à un paramètre tiré de la séparation d'échelles représentant le rapport entre les échelles impliquées (Caillerie [25]).

La théorie de l'homogénéisation des milieux périodiques fait appel à deux techniques : le développement asymptotique et l'utilisation de deux variables spatiales (variables à double échelle)  $x$  (variable macroscopique) et  $y = \varepsilon^{-1}x$  (variable microscopique). Ces deux variables sont parfois appelées la variable lente  $x$  et la variable rapide  $y$ . La solution recherchée pour un problème donné est souvent écrite sous la forme :

$$f = f^{(0)} + \varepsilon f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (1.8)$$

où chaque terme  $f^{(i)} = f^{(i)}(x, y)$  est périodique en  $y$ . On peut considérer que la solution est trouvée en prenant la limite de la fonction  $f$  lorsque  $\varepsilon$  tend vers 0.

Cette technique a été étendue à des structures discrètes constituées de barres (Caillerie *et al.* [26]) et appliquée aux problèmes : statique (Tollenaere [169]), flambage (Moreau

et Caillerie [121]) et dynamique (Boutin et Hans [21]) des structures. Le but de l'homogénéisation est dans ce cas de déterminer un modèle continu équivalent au milieu discret. Les étapes à suivre sont présentées dans Tollenaere et Caillerie [169], et qui consistent à discrétiser l'équilibre de la structure sous les vibrations harmoniques et effectuer ensuite les développements asymptotiques. Pour avoir plus de détails sur cette méthode, nous vous invitons à consulter les références citées ci-dessus.

### 1.3.3.2 Approche numérique

#### Méthode des éléments finis au carré FEM<sup>2</sup>

Cette méthode s'inscrit dans la catégorie des approches multi-échelle. Elle fut initialement développée par Miehe *et al.* [117] qui a proposé un modèle pour décrire le comportement plastique des matériaux polycristallins ; et par Feyel et Chaboche [75] qui ont appliqué cette méthode à la modélisation des matériaux composites de type SiC/Ti. Dans cette approche, les équations constitutives sont écrites à l'échelle microscopique. Les équations d'homogénéisation et de localisation sont utilisées pour déterminer la déformation macroscopique et la contrainte que l'on en déduit de l'état mécanique de petite échelle. Le principe de cette méthode est schématisé sur la figure 1.13.

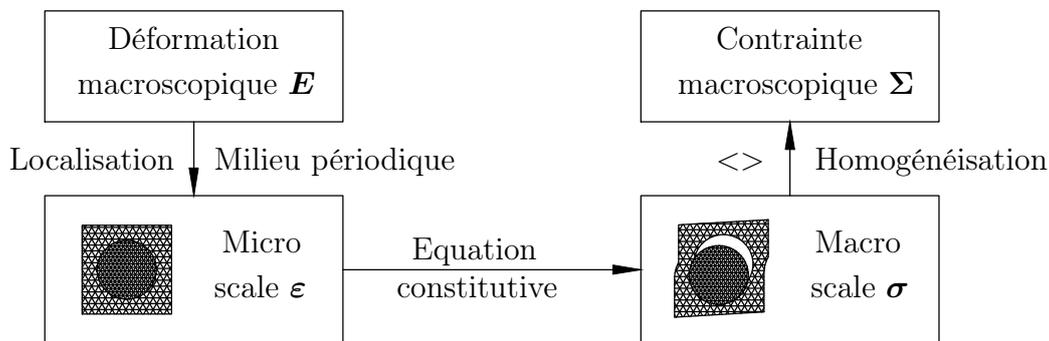


FIGURE 1.13 – Principe de la méthode FEM<sup>2</sup> (d'après Feyel et Chaboche [75]).

Les contributions importantes suivantes sont également citées : Feyel [74] a étendu la méthode (FEM<sup>2</sup>) à une description microscopique d'une structure hétérogène ; Kouznetsova *et al.* [101], [102], [103] l'ont appliquée au problème mécanique pur afin d'obtenir le comportement macroscopique des matériaux hétérogènes. Dans ces développements, un gradient de transformation et son gradient ont été imposés à une microstructure avec les conditions limites périodiques, ce qui permettrait d'évaluer la taille nécessaire du volume élémentaire représentatif (VER) pris en compte.

Les développements antérieurs et plus récents ont appliqué cette approche à des problèmes du génie civil impliquant des couplages hydromécaniques (Frey [81], Marinelli [112]). Ces auteurs ont créé des microstructures 2D par éléments finis, composées de

grains (hyper)élastiques, d'interface cohésives, d'une circulation fluide intergranulaire, et puis déduit la réponse macroscopique d'une analyse microscopique afin de comprendre les phénomènes d'endommagement de la roche à proximité de la paroi lors du creusement des ouvrages de stockage souterrain.

### **Méthode d'homogénéisation numérique par couplage EF/ED**

Une méthode d'homogénéisation numérique combinant la méthode des éléments finis (FEM) à l'échelle macroscopique et la méthode des éléments discrets à l'échelle microscopique a été développée plus récemment (Meier *et al.* [114], Miehe *et al.* [116]). Le schéma général de cette approche est similaire à celui présenté dans la figure 1.13, sauf que la méthode employée à petite échelle est celle des éléments discrets (DEM). Dans ces travaux, les auteurs ont utilisé des techniques d'homogénéisation quasi-statique et ils ont calculé analytiquement la matrice tangente consistante dans la méthode de Newton.

## **1.4 Conclusion**

L'étude bibliographique qui a été menée avait pour but de définir succinctement le cadre dans lequel se place notre travail sur une approche multi-échelle numérique adaptée au milieu granulaire frottant-cohésif. Un bref rappel sur le comportement des matériaux granulaires a donc été introduit, mettant en lumière notamment les aspects multi-échelle du comportement, et avec eux un phénomène très intéressant dit localisation de la déformation.

On a ensuite évoqué sans les détailler les approches FEM et DEM, avant de rappeler le principe des méthodes de changement d'échelle existantes et d'introduire celle que nous allons développer dans la suite.



---

## Modèle micromécanique

---

*Ce chapitre donne une synthèse des lois de contact locales utilisées dans ce travail de thèse. On présente tout d'abord leurs caractéristiques. Ensuite les influences des paramètres des lois sont étudiées par le biais d'essais biaxiaux en compression.*

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>26</b>
<b>2.2</b>	<b>Lois de contact</b>	<b>26</b>
2.2.1	Contact avec frottement sans cohésion (contact de type 1)	27
2.2.2	Milieu cohésif-frottant : Prise en compte de la cohésion dans un modèle numérique	28
2.2.3	Mécanisme de dissipation de l'énergie au niveau du contact	33
<b>2.3</b>	<b>Conditions aux limites périodiques</b>	<b>35</b>
2.3.1	Conditions aux limites de type forces	35
2.3.2	Conditions aux limites de type parois souples ou rigides	35
2.3.3	Conditions aux limites périodiques (CLP)	36
<b>2.4</b>	<b>Simulation des expériences du laboratoire par DEM : Essai biaxial en compression</b>	<b>38</b>
2.4.1	Génération d'un échantillon numérique	38
2.4.2	Compression isotrope	39
2.4.3	Échantillons numériques utilisés	41
2.4.4	Compression biaxiale modélisée en DEM	44
<b>2.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>59</b>

---

## 2.1 Introduction

Les matériaux granulaires sont formés par des particules dont le comportement dépend des interactions mécaniques entre les particules. Afin d'étudier leur réponse sous chargement par la méthode des éléments discrets (DEM), il est nécessaire de définir les lois d'interaction au niveau des contacts. Ces lois décrivent la relation entre les forces de contact et les déplacements des grains en contact. Dans notre étude, on se limite dans ce cas les grains de forme circulaire 2D.

Afin d'effectuer des simulations par DEM, plusieurs types de conditions aux limites peuvent être employés. Un bref rappel sur ces conditions sera présenté et puis concentré sur les conditions aux limites périodiques (CLP) qui seront utilisées au niveau du VER dans ce travail.

Enfin, des essais biaxiaux seront menés par la DEM dans l'objectif d'étudier les influences des différents paramètres du modèle micromécanique sur le comportement mécanique du matériau idéalisé.

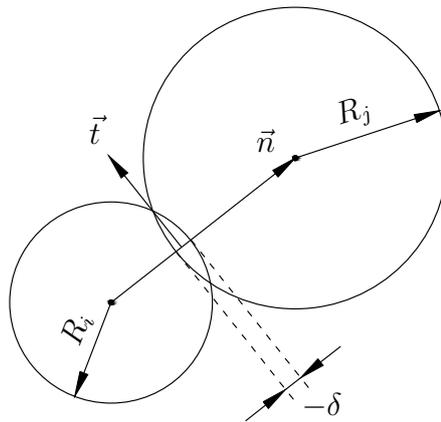


FIGURE 2.1 – Deux grains ( $i$  et  $j$ ) en contact.

## 2.2 Lois de contact

Pour définir les lois de contact, on considère deux grains circulaires  $i$  et  $j$  en contact (figure 2.1),  $R_i$  et  $R_j$  étant respectivement les rayons des particules. On suppose que les grains gardent leur forme (grains parfaitement rigides) et on leur permet de s'interpénétrer d'une distance  $\delta$ . Si  $\delta \geq 0$  il n'y a pas de contact, le contact est présent si  $\delta < 0$ . Par la suite, deux types de lois de contact seront abordés.

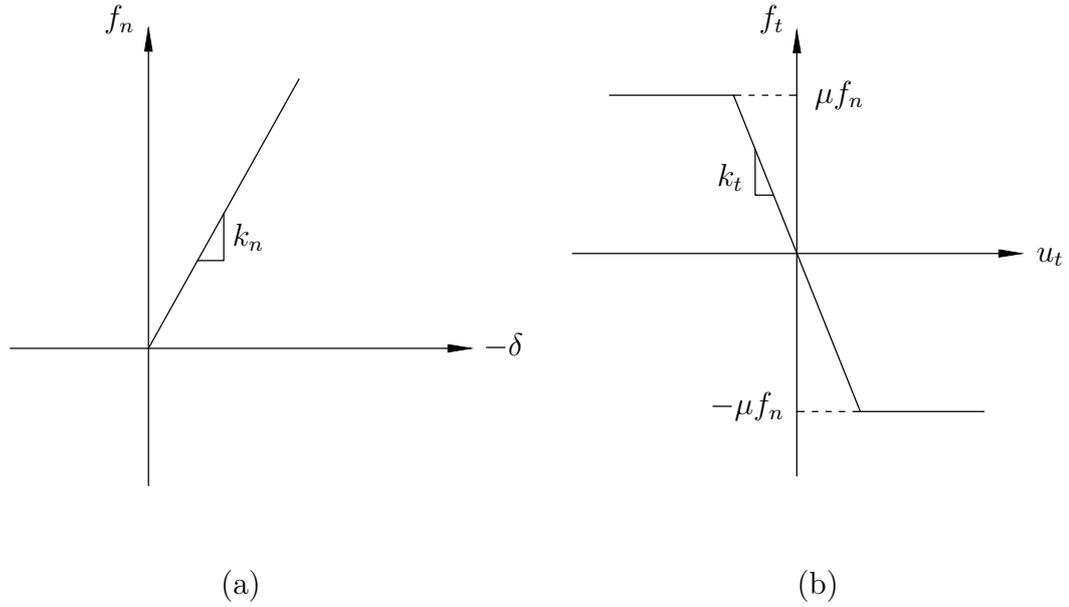


FIGURE 2.2 – Loi de contact type 1 purement frottant : (a) Force normale et (b) Force tangentielle.

### 2.2.1 Contact avec frottement sans cohésion (contact de type 1)

Dans les contacts non cohésifs, nous utiliserons une loi de contact que nous appellerons "contact non cohésif" ou "de type 1" dans le texte de ce mémoire. La force normale est définie proportionnellement à  $\delta$  via une raideur normale  $k_n$  (équation (2.1)). L'interpénétration  $\delta$  est supposée faible devant la taille des grains, *i.e.*  $\delta \ll (R_i, R_j)$ . Les régions de contact se réduisent à un point, qui ne peut pas transmettre un moment. Le phénomène de résistance au roulement (Iwashita et Oda [93], Tordesillas et Stuart [170]) n'est donc pas pris en compte.

$$f_n = f_{el} = -k_n \cdot \delta \quad (2.1)$$

Pour les lois de contact régissant les efforts tangentiels, plusieurs approches sont possibles : l'utilisation d'un modèle de force de frottement visqueux borné par le critère de Coulomb (Dury *et al.* [71], Ristow [152]) ou l'introduction d'une raideur tangentielle au contact (Cundall et Strack [52]). On s'intéresse ici à celle proposée par Cundall et Strack [52]. Cette loi introduit une raideur tangentielle  $k_t$  au niveau du contact. La force tangentielle présentée dans le contact à l'instant  $T + \Delta T$  est définie par :

$$f_t^{T+\Delta T} = f_t^T + \delta f_t^{\Delta T} \quad (2.2)$$

où  $f_t^T$  est la force tangentielle à l'instant  $T$  et  $\delta f_t^{\Delta T} = -k_t \cdot \delta u_t$  est l'incrément de force tangentielle fonction de la raideur tangentielle  $k_t$  et du déplacement relatif tangential

incrémental  $\delta u_t$ . Ce déplacement relatif incrémental  $\delta u_t$  peut être calculé :

$$\delta u_t = \left[ (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \vec{t} - (R_i \dot{\theta}_i + R_j \dot{\theta}_j) \right] \cdot \Delta T \quad (2.3)$$

Où  $\vec{v}_i$ ,  $\dot{\theta}_i$  et  $\vec{v}_j$ ,  $\dot{\theta}_j$  sont les vitesses et la vitesse angulaire des particules  $i$  et  $j$ ;  $\vec{t}$  est le vecteur tangentiel au contact (voir la figure 2.1), donc :  $\vec{n} \cdot \vec{t} = 0$  avec  $\vec{n}$  qui est le vecteur normal dans ce contact.

Dans ce modèle, la force tangentielle est bornée par la condition de Coulomb (équation (2.4)) avec  $\mu$  qui est le coefficient de frottement intergranulaire.

$$|f_t| \leq \mu \cdot f_n \quad (2.4)$$

Ces équations ci-dessus sont illustrées par la figure 2.2.

### 2.2.2 Milieu cohésif-frottant : Prise en compte de la cohésion dans un modèle numérique

Dans les contacts frottant-cohésifs, plusieurs types de cohésion peuvent être envisagés, car différents phénomènes physiques peuvent être à la source de la cohésion.

- Dans le cas d'une cohésion induite par la présence de fluides retenus au niveau du contact (ménisques), la cohésion pourra être considérée comme résultant d'une simple attraction additionnelle entre les grains ; on appellera ces contacts "attractifs purs", ou encore "de type 2" dans ce mémoire.
- La cohésion peut aussi résulter d'une cimentation des grains, par des dépôts de matière autour des contacts, pouvant résulter de différents processus physico-chimiques. On devra alors prendre en compte, en plus d'une résistance accrue du contact à la traction et au cisaillement, une résistance au roulement. On appellera ces contacts "cohésifs cimentés" ou encore "de type 3" dans ce texte.

#### 2.2.2.1 Cohésion dans les matériaux granulaires : le point de vue macro

L'origine de la cohésion macroscopique vient des propriétés microscopiques du matériau, c'est-à-dire les interactions interparticulaires. À ce niveau, la présence de la cohésion empêche les déplacements relatifs des particules.

En mécanique des sols et des roches, dans l'approche macroscopique, la cohésion apparaît comme un paramètre de résistance dans les critères de plasticité et les fonctions de charge qui en découlent. Le modèle de Mohr-Coulomb, par exemple, se caractérise par deux paramètres : un angle de frottement interne  $\varphi$  et une cohésion macroscopique  $C$ . Le critère de rupture est présenté sur la figure 2.3 dans le plan de Mohr.

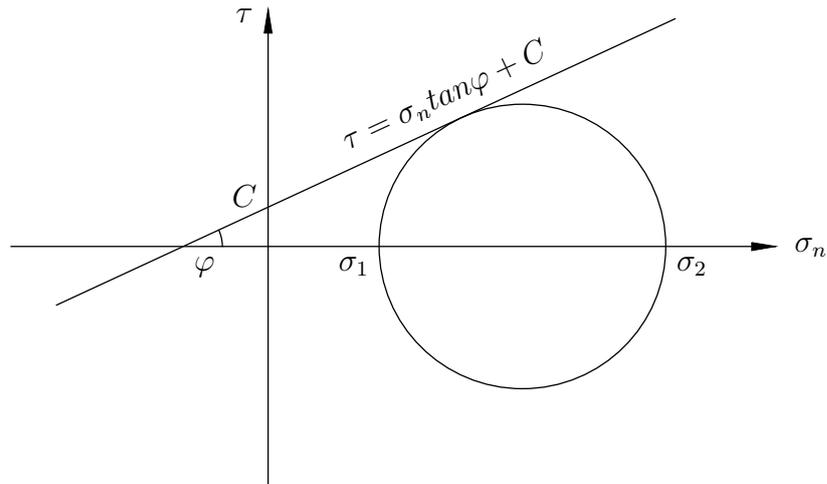


FIGURE 2.3 – Critère de Mohr-Coulomb dans le plan de Mohr.

### 2.2.2.2 Contact avec frottement et cohésion attractive pure (contact de type 2)

Pour les milieux avec cohésion liée à la présence de ménisques, nous utiliserons une loi de contact que nous appellerons "attractif pur" ou "de type 2" dans le texte de ce mémoire. En suivant Rognon *et al.* [153], Gilabert *et al.* [85], on enrichit la loi de contact frottant pur en ajoutant un terme attractif (cohésion normale  $f_{n0}$ ) à la partie élastique ( $f_{el}$ ) calculée par l'équation (2.1). Dans ce cas, la force normale totale (prise en compte de la cohésion) est donc égale à :

$$f_n = f_{el} + f_{n0} = -k_n \cdot \delta + f_{n0} \quad (2.5)$$

Par conséquent, à l'équilibre, une paire de grains isolée est maintenue en contact avec une déflexion  $\delta_0 = -f_{n0}/k_n$ .

La force tangentielle est modélisée de la même façon que celle l'équation (2.2). Néanmoins, l'inégalité de Coulomb devrait être changée. Dans le cas où deux particules sont en contact sans cohésion, la force normale  $f_n$  est positive (répulsive). Si les particules ne glissent pas l'une par rapport à l'autre, l'amplitude de la force tangentielle  $f_t$  est inférieur à un seuil  $\mu \cdot f_n$  qui est proportionnel à la force normale au contact ;  $\mu$  étant le coefficient de frottement intergranulaire (équation (2.4)).

Pour le cas du milieu cohésif avec une cohésion normale unique au niveau du contact, afin de tirer une inégalité de Coulomb appropriée on considère trois grains en contact comme le montre la figure 2.5. Ces grains se touchent et sont liés par des cohésions normales entre eux (axe horizontal). Si on essaie de pousser le grain au milieu, la cohésion normale ne joue aucun rôle pour empêcher le déplacement de ce grain, elle n'a donc aucune influence sur le glissement au contact entre les grains. Dans ce cas, la force

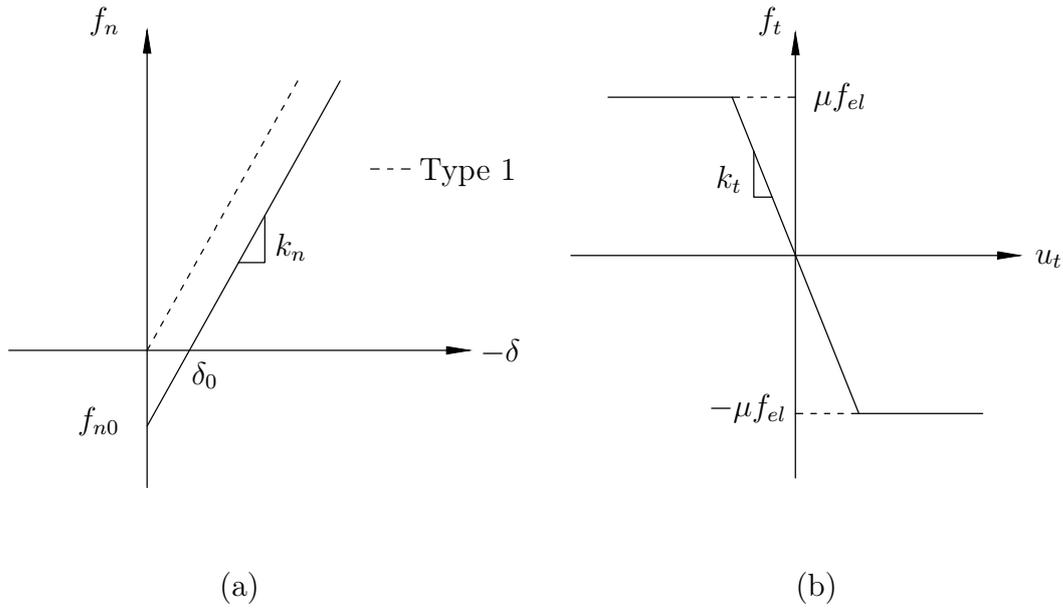


FIGURE 2.4 – Loi de contact (type 2) prenant en compte la cohésion normale : (a) Force normale et (b) Force tangentielle.

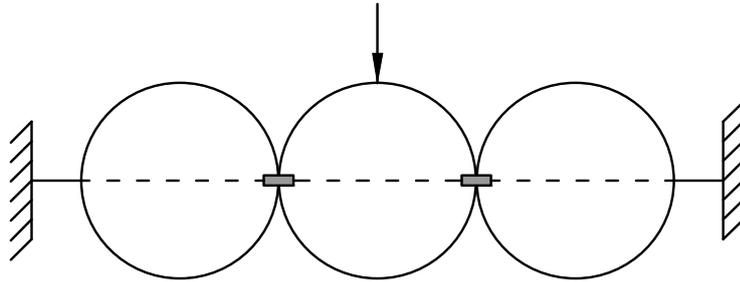


FIGURE 2.5 – Rôle de la cohésion normale sur le glissement au contact.

normale qui doit être utilisée dans l'inégalité de Coulomb est en fait la force répulsive ( $f_{el}$ ). Lorsque le terme cohésif  $f_{n0}$  n'est pas nul, le seuil de glissement est posé à  $\mu \cdot (f_n + f_{n0}) = \mu \cdot f_{el}$ . La condition de Coulomb s'écrit :

$$|f_t| \leq \mu \cdot f_{el} = \mu \cdot (f_n - f_{n0}) \quad (2.6)$$

En absence des forces extérieures, le contact entre les deux grains peut transmettre une force tangentielle qui atteint une valeur maximale égale à  $\mu |f_{n0}|$ . Cette valeur est trouvée si la force normale totale  $f_n$  est nulle, et donc  $f_{el} = -f_{n0}$ .

La force de cohésion normale  $f_{n0}$  pourrait être comparée aux forces de la pression moyenne  $\bar{a} \cdot \sigma_0$  (comme suggéré par Gilabert *et al.* [85], Roux et Chevoir dans Radjai et Dubois [145]) :

$$p^* = \frac{-f_{n0}}{(\bar{a} \cdot \sigma_0)} \quad (2.7)$$

avec  $\bar{a}$  est le diamètre moyen des grains dans l'assemblage granulaire,  $\sigma_0$  est la contrainte isotrope en 2D.  $p^*$  est donc un rapport mesurant la partie cohésive de la contrainte moyenne à la partie répulsive qui vient de l'interpénétration entre particules.

La dégradation de la cohésion est prise en compte en considérant la disparition de la partie cohésive  $f_{n0}$  dans les équations ci-dessus une fois le contact perdu. Dans ce cas-là, cette loi revient au cas de la loi de type 1 (figure 2.4) (contact purement frottant).

### 2.2.2.3 Modèle micromécanique adapté aux milieux granulaires cimentés (contact de type 3)

La physique des milieux granulaires cimentés conduit à introduire une nouvelle résistance dans le contact : la résistance au roulement.

#### Résistance au roulement

Les modèles micromécaniques décrits dans la section 2.2.2.2 considèrent que la région de contact se réduit à un seul point. Dans l'objectif de modéliser les matériaux granulaires cimentés, un effet de résistance au roulement sera pris en compte au niveau de contact. Géométriquement, les contacts entre nos grains sont et resteront ponctuels. En tant que tels ils ne génèrent pas naturellement une résistance au roulement. Nous allons en introduire une comme expliqué ci-après, mais il faut noter que de ce fait, nous introduisons de facto une notion de largeur du contact.

Avec la résistance au roulement, les contacts sont autorisés à transmettre un moment  $M_\gamma$ , qui s'oppose au roulement ; en deçà d'un critère de rupture à définir, le roulement est soumis à une raideur en rotation relative  $k_R$  ; au delà, il devient libre. On adopte ici l'approche proposée par Iwashita et Oda [93]. Dans cette approche, un coefficient de frottement de roulement  $\mu_R$  est introduit : le moment maximal exercé par le contact est  $\mu_R \cdot f_n$ , où  $f_n$  est la force normale au contact.  $\mu_R$  a la dimension d'une longueur. Si on définit une longueur de contact  $l$  (longueur virtuelle, en ce sens que la géométrie reste celle d'un contact ponctuel), le ratio entre  $\mu_R$  et  $l$  est un scalaire sans dimension. La raideur en rotation quant à elle doit être d'ordre  $l^2$ . Gilabert *et al.* [85] proposent de lier  $k_R$  et  $\mu_R$  à  $l$  comme suivant :

$$k_R = k_n \cdot l^2 \quad (2.8)$$

$$\mu_R = \mu \cdot l \quad (2.9)$$

avec  $\mu$  le coefficient de frottement intergranulaire.

Pour simplifier, on propose d'évaluer  $l$  à partir du diamètre moyen de l'assemblage granulaire tel que :  $l = \varepsilon \cdot \bar{a}$  avec  $\varepsilon$  est une petite valeur devant  $\bar{a}$  qui est le diamètre moyen des grains constituant l'assemblage.

Les efforts à chaque contact sont recalculés pour chaque pas du calcul. Les forces d'interaction normale ( $f_n$ ) et tangentielle ( $f_t$ ) sont déterminées comme dans les lois qui sont présentées précédemment. En prenant en compte la résistance au roulement, le moment transmis par la région de contact est  $M_\gamma^{T+\Delta T} = M_\gamma^T + k_R \cdot d\gamma^{\Delta T}$  avec  $d\gamma^{\Delta T}$  est la rotation relative incrémentale pour l'incrément  $\Delta T$  du temps.

### Critère de rupture

Afin de modéliser la rupture possible de la cohésion intergranulaire, on utilise ici une extension du critère de type parabololoïde, ayant été retenu pour la modélisation numérique lors des travaux de Delenne [57] et Delenne *et al.* [59].

Le critère de rupture est formulé de façon suivante :

$$\zeta = \left( \frac{f_t}{f_{t0}} \right)^n + \left( \frac{M_\gamma}{M_{\gamma 0}} \right)^n + \left( \frac{f_n}{f_{n0}} \right)^n - 1 \quad (2.10)$$

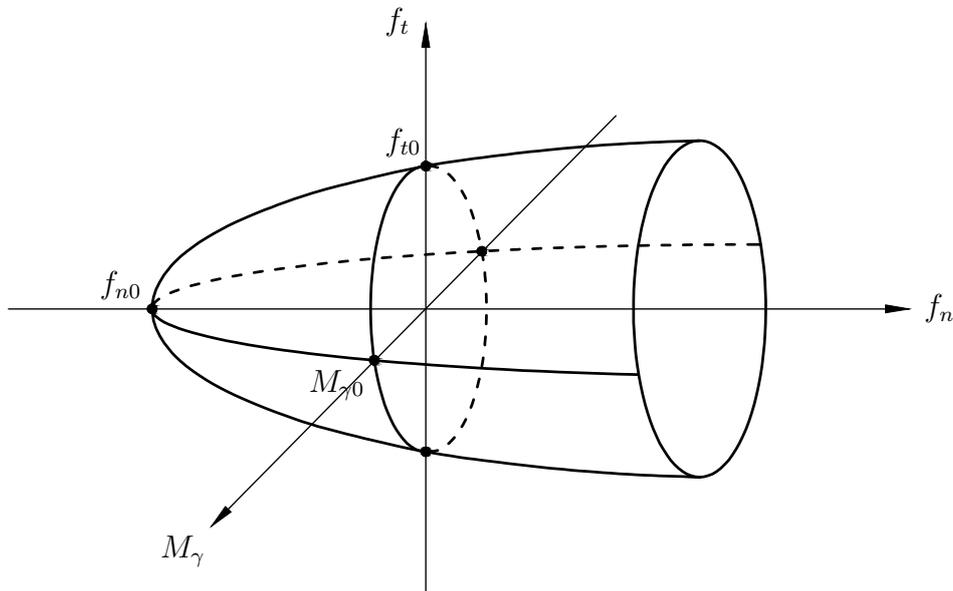


FIGURE 2.6 – Critère de rupture du contact de type 3.

Dans une première tentative, les résistances en traction ( $f_{n0}$ ), en cisaillement ( $f_{t0}$ ) et au roulement ( $M_{\gamma 0}$ ) sont calculées ainsi :

$$f_{n0} = -p^* \cdot (\bar{a} \cdot \sigma_0) \quad (2.11)$$

$$f_{t0} = -\lambda \cdot f_{n0} \quad (2.12)$$

$$M_{\gamma 0} = -\mu_R \cdot f_{n0} \quad (2.13)$$

Les paramètres du modèle sont donc le niveau de cohésion ( $p^*$ ), le rapport entre la résistance en cisaillement et en traction ( $\lambda$ ) et la raideur en rotation ( $k_R$ ) et un coefficient d'exposant du critère  $n$  qui apparaît dans la formule (2.10).

Le critère de rupture est représenté par une surface dans l'espace 3D de la force normale ( $f_n$ ), la force tangentielle ( $f_t$ ) et le moment transmis par l'effet de résistance au roulement ( $M_\gamma$ ) :  $(f_n, f_t, M_\gamma)$  (voir la figure 2.6). La rupture se produit sur la surface ( $\zeta = 0$ ) tandis qu'à l'intérieur, la cohésion est maintenue ( $\zeta < 0$ ).

La forme de surface de rupture évolue en fonction du coefficient d'exposant du critère  $n$ . La figure 2.7 présente les surfaces dans le plan 2D de  $(f_n, f_t)$  et  $(f_n, M_\gamma)$ . À partir de ces dessins, on constate qu'avec  $n = 1$ , une surface linéaire est obtenue. Lorsque  $n$  prend les valeurs de  $n = 2, 4, 6$ , les surfaces non-linéaires de type parabolique ou hyperbolique sont trouvées. Toutes ces surfaces passent par l'axe horizontal et vertical aux endroits correspondant à la résistance en traction ( $f_{n0}$ ), en cisaillement ( $f_{t0}$ ) et en roulement ( $M_{\gamma 0}$ ).

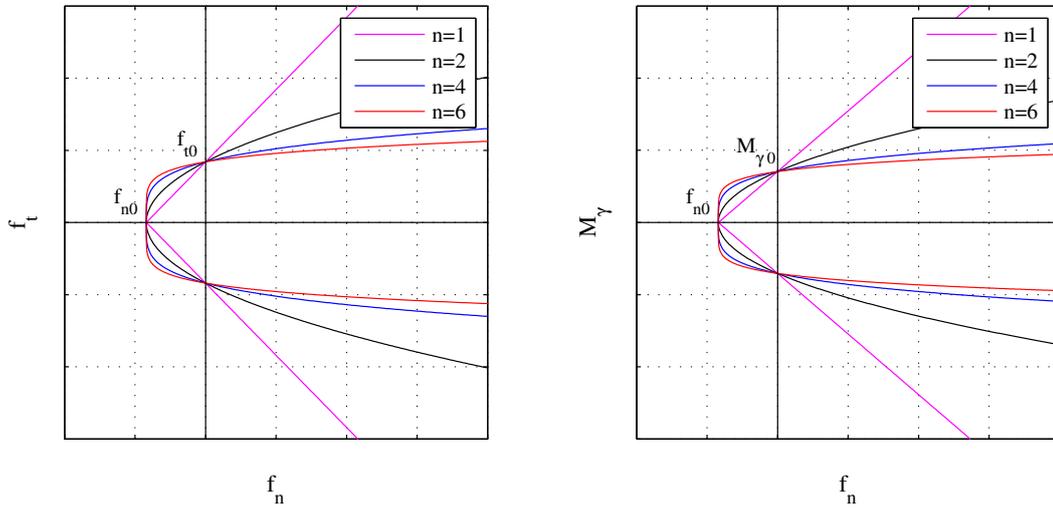


FIGURE 2.7 – Critère de rupture en fonction du coefficient d'exposant  $n$  (contact de type 3) : plan  $(f_n, f_t)$  à gauche et plan  $(f_n, M_\gamma)$  à droite.

### 2.2.3 Mécanisme de dissipation de l'énergie au niveau du contact

La dissipation d'énergie dans le contact est une caractéristique intrinsèque des milieux granulaires et doit être prise en compte dans les modèles de contact. La loi de

contact normal tel qu'elle est présentée dans la section 2.2.1, ne peut donc pas être utilisée directement pour décrire ces milieux car elle ne présente aucune dissipation d'énergie pendant l'interaction des grains. Il existe plusieurs méthodes pour tenir compte de ces effets. La solution la plus classique est d'ajouter une force d'amortissement qui s'oppose à la vitesse relative normale pendant la durée du contact (amortissement local au contact). Dans ce cas, la force normale est modélisée en basant sur le modèle rhéologique de Kelvin-Voigt (Luding [110], Combe [45]) (voir la figure 2.8). On modélise la force normale par une fonction continue de l'interpénétration  $\delta$  et de la vitesse relative normale entre les deux particules  $\vec{v}_n = (v_j - v_i) \cdot \vec{n}$  (équation (2.14)).

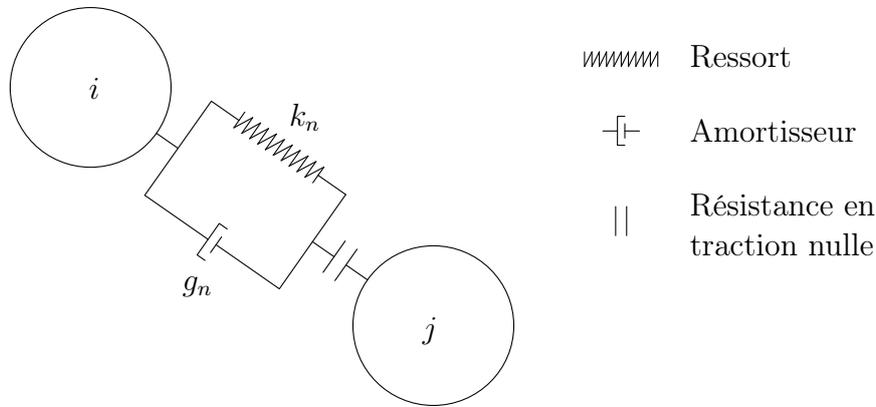


FIGURE 2.8 – Modèle rhéologique de Kelvin-Voigt.

$$f_n = -k_n \cdot \delta - g_n \cdot v_n \quad (2.14)$$

où  $g_n$  est un coefficient d'amortissement visqueux imposée au contact.

Cundall [51] a proposé un amortissement non-visqueux à l'échelle des grains qui agit individuellement sur chaque particule afin de limiter leur oscillation. La force ( $F_i^v$ ) et le moment ( $M_i^v$ ) associés à chaque particule  $i$  sont données par les expressions suivantes.

$$F_i^v = -\alpha \cdot |F_i| \cdot \text{sign}(v_i) \quad (2.15)$$

$$M_i^v = -\alpha \cdot |M_i| \cdot \text{sign}(\omega_i) \quad (2.16)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \text{sign}(x) = -1 & \text{si } x < 0 \\ \text{sign}(x) = 0 & \text{si } x = 0 \\ \text{sign}(x) = 1 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

Dans les équations (2.15) et (2.16),  $F_i$  et  $M_i$  sont les forces et les moments qui résultent au centre de la particule  $i$ ;  $v_i$  et  $\omega_i$  sont les vitesses de la particule  $i$  considéré.  $0 < \alpha < 1$  étant un coefficient d'amortissement.

## 2.3 Conditions aux limites périodiques

L'influence des conditions aux limites est plus importante dans la modélisation que dans l'expérimentation. Cela vient principalement à cause de nombre réduit de grains simulé par rapport à l'expérience. On peut classer trois types de conditions aux limites, souvent rencontrés dans la modélisation discrète des matériaux granulaires :

- Conditions aux limites de type forces,
- Conditions aux limites de type parois souples (membranes) ou rigides,
- *Conditions aux limites périodiques*

Les deux premiers types seront présentés d'une manière brève. On se concentre sur les conditions limites périodiques qui seront employées tout au long de ce travail pour traiter le problème à l'échelle du VER.

### 2.3.1 Conditions aux limites de type forces

Les conditions aux limites de type forces consistent exercer sur les grains du bout de l'échantillon des forces afin d'exercer une pression sur l'ensemble de grains. Assez peu utilisées, on ne rentrera pas dans le détail, le lecteur intéressé pourra néanmoins se référer à l'article de Ouaguenouni et Roux [141] (assemblages hexagonaux).

### 2.3.2 Conditions aux limites de type parois souples ou rigides

Ce type de conditions aux limites permet de reproduire d'une façon la plus exacte possible l'essai triaxial de révolution de laboratoire, qui utilise les membranes en caoutchouc. Les limites dites flexibles sont définies par les grains aux bords en noir (voir la figure 2.9.a). La pression de confinement est appliquée en ajoutant une force surfacique à ces grains aux limites. En fait, ce type des conditions aux limites est peu employé dans les modélisations discrètes. Les principales contributions sont celles de Bardet et Proubet [10], Iwashita *et al.* [92], Oger *et al.* [138].

Les parois rigides peuvent être placées comme ce qui est indiqué sur la figure 2.9.b. Les parois (numérotées 1, 2, 3, 4) déterminent la taille de l'échantillon et se déplacent sous applications de forces ou de déplacement. La rigidité des parois est à l'origine d'effets de bords qui perturbent la structure granulaire. Dans le cas de compression isotrope, avec la prise en compte du frottement intergranulaire une certaine prudence est recommandée car on observe des effets de voûtes qui empêchent la propagation des forces appliquées sur les parois au centre de l'assemblage de grains (Combe [45]). Les

conditions aux limites de ce type sont souvent utilisées, car elles correspondent à des dispositifs expérimentaux de cisaillement existants.

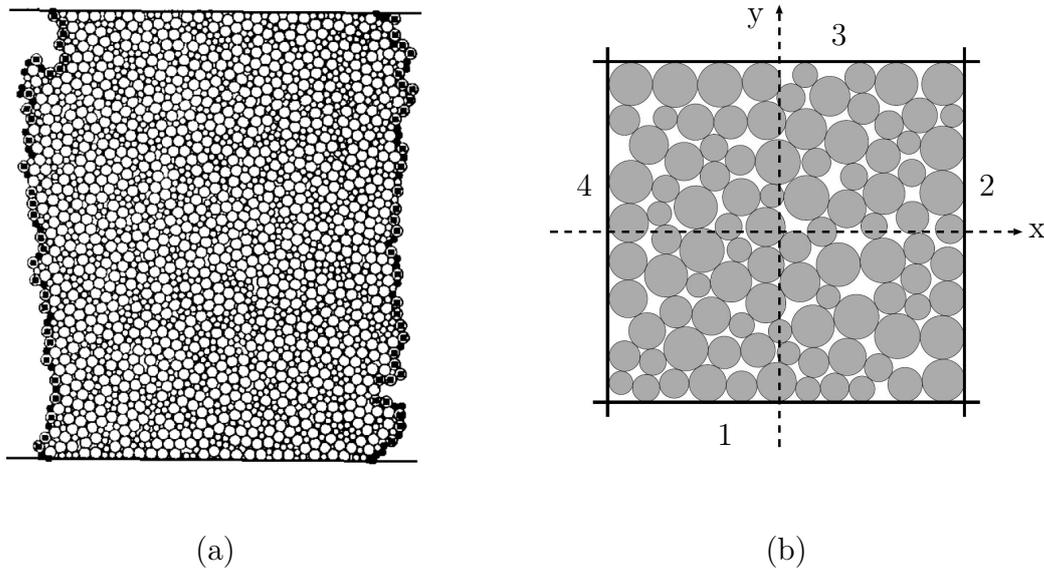


FIGURE 2.9 – Conditions aux limites : (a) type membranes (Bardet [10]) et (b) type parois rigides (Combe [45]).

### 2.3.3 Conditions aux limites périodiques (CLP)

Dans la pratique, la condition d'homogénéité et de représentative n'est pas toujours satisfaite, parce que les effets de mur induisent des perturbations dans la structure granulaire. Ces effets indésirables des limites de la paroi rigide peuvent être éliminés à l'aide de conditions aux limites périodiques. L'utilisation de la cellule périodique permet la prédiction des réponses mécaniques sans contact de particules de frontières avec la paroi rigide. En outre, les CLP sont observées pour produire de manière satisfaisante homogène, isotrope (pour des contraintes isotropes) et l'état d'équilibre statique (Borja et Wren [20], Radjai et Dubois [145]).

#### 2.3.3.1 Périodicité en position

Considérons un assemblage granulaire périodique, c'est-à-dire constitué par la répétition spatiale périodique d'une cellule élémentaire, comme sur la figure 2.10. La cellule élémentaire en gris se compose de  $N$  particules circulaires (on se limite ici au cas 2D). Les vecteurs de périodicité de la cellule sont notés  $\vec{u}$  et  $\vec{v}$ .

Pour une configuration donnée,  $\vec{r}(n)$  étant la position "réelle" de particule  $n$ . Les coordonnées  $\vec{r}(n')$  des images  $n'$  d'une particule  $n$  sont déterminées par :

$$\vec{r}(n') = \vec{r}(n) + \sum_{k=1}^2 i_k \cdot \vec{a}_k \quad (2.17)$$

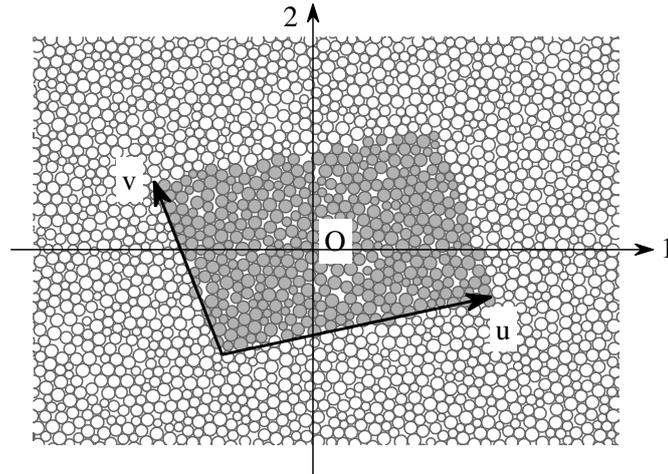


FIGURE 2.10 – Définition d'une cellule élémentaire. VER en 2D avec CLP.

où  $(i_1, i_2)$  sont deux indices entiers correspondant à une translation de la cellule élémentaire par le vecteur  $i_1 \cdot \vec{a}_1 + i_2 \cdot \vec{a}_2$  et  $a_k$  sont les vecteurs de base qui définissent le domaine élémentaire.

Pour les particules dans la cellule élémentaire  $i_1 = i_2 = 0$ ; pour les images dans les cellules voisines  $i_k = (-1, 0, 1)$ . En effet, à la frontière, la particule  $m$  dans la cellule élémentaire peut interagir avec la particule  $n$ , et aussi avec les images  $n'$  de la particule  $n$ . Au cours de l'évolution du milieu, une particule  $n$  peut quitter la cellule élémentaire mais l'une de ses images entre en même temps dans cette cellule, *i.e.*  $n$  devient  $n'$  et  $n'$  devient  $n$ .

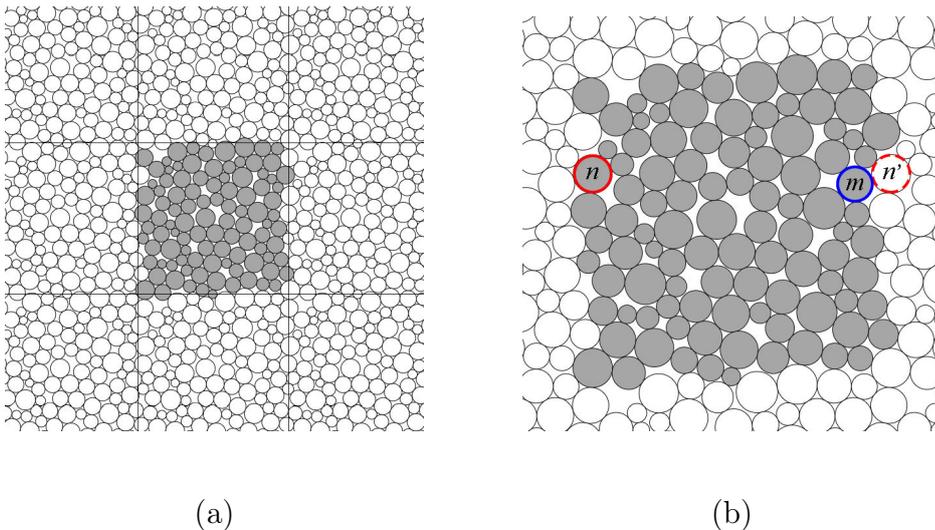


FIGURE 2.11 – Conditions aux limites périodiques : (a) Cellule élémentaire (en gris) et ses voisines; (b) vue détaillée d'une cellule.

### 2.3.3.2 Coordonnées réduites

Ayant défini une matrice de passage  $\mathbf{h}$  dont les composantes sont simplement les vecteurs de la cellule élémentaire décrivant la forme du VER, les coordonnées réduites  $\vec{s}(n)$  sont données par :

$$\vec{r}(n) = \mathbf{h} \cdot \vec{s}(n) \quad (2.18)$$

Avec la matrice de passage :

$$\mathbf{h} = (\vec{u} \ \vec{v}) \quad (2.19)$$

Ou bien :

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

### 2.3.3.3 Périodicité en vitesse

La position est donc périodique. On trouve la même propriété avec la vitesse en dérivant l'équation (2.18) de position :

$$\dot{\vec{r}} = \dot{\mathbf{h}} \cdot \vec{s} + \dot{\vec{s}} \cdot \mathbf{h} \quad (2.21)$$

## 2.4 Simulation des expériences du laboratoire par DEM : Essai biaxial en compression

### 2.4.1 Génération d'un échantillon numérique

La génération d'un échantillon numérique est nécessaire et indispensable avant le chargement isotrope. Cette génération est faite en créant des grains et en définissant des conditions aux limites de l'échantillon. Pour ce faire, plusieurs méthodes sont possibles. On cite ici les méthodes d'assemblage des particules par des règles géométriques (méthodes d'assemblages par dépôt balistique initiées par les travaux de Vold [178], [179], [180] et continuées par Watson [182], Bratberg [22]; méthodes d'assemblage à potentiel de configuration (Radjai et Dubois [145], Knight *et al.* [98]), ou bien les méthodes d'addition de façon séquentielle aléatoire (Torquato [172], [171]) qui consiste à placer les particules dans un espace interstitiel sans interpénétration entre les particules de manière successive et aléatoire. Néanmoins, on constate que l'assemblage construit par ces méthodes n'est pas dans un état mécanique stable. Une étape de relaxation dynamique est alors nécessaire afin d'obtenir un état mécanique stable. En utilisant cette méthode dynamique, les étapes suivantes sont à suivre :

- Etape 1 : Les positions des particules sont générées suivant un quadrillage régulier de pas 1. Elles sont centrées au  $(0, 0)$ .
- Etape 2 : Les rayons des particules sont tirés aléatoirement en suivant une loi uniforme. Les bornes minimale et maximale des rayons sont définies avant.
- Etape 3 : L'échantillon est ensuite mélangé : on impose à chaque particule une vitesse. Pour bien mélanger l'assemblage granulaire, il faut qu'on ne dissipe pas de l'énergie mécanique à ce stade. En principe, il est possible d'utiliser la dynamique moléculaire, mais le grand nombre de collisions rend cette méthode peu efficace. On préfère donc faire un calcul Dynamique des Contacts (DC) (proposé par Jean [94], Jean et Moreau [95]) avec un choc de restitution égal à 1 (Combe [46]).
- Etape 4 : On écrit dans un fichier correspondant à une configuration initiale pour faire une simulation par la suite.

### 2.4.2 Compression isotrope

Dans l'expérimentation, un essai biaxial est toujours effectué en deux étapes (Desrues [60], Desrues et Viggiani [69]) : étape de compression isotrope et étape de chargement biaxial. Dans la première étape, l'échantillon est en compression jusqu'à atteindre la contrainte isotrope voulue  $\sigma_0$ . Dans cette section, on va se concentrer sur une technique numérique afin d'obtenir un assemblage granulaire à l'état de contrainte isotrope en l'absence de la gravité.

Pour effectuer une compression isotrope, on part d'une configuration initiale donnée qui est obtenue grâce à la technique décrite dans section 2.4.1 puis on applique la contrainte voulue sur l'échantillon. Afin d'obtenir un échantillon dense, il suffit de diminuer le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$ . L'évolution de la densité de l'échantillon en fonction de  $\mu$  est représentée sur la figure 2.12. Cette figure montre qu'un échantillon est dense si  $\mu = 0$ . En augmentant  $\mu$ , l'échantillon est de plus en plus lâche. Pour le cas d'un milieu cohésif, il convient d'effectuer successivement deux étapes : la première consiste à réaliser une compression isotrope sans cohésion. En deuxième lieu, on effectue une compression isotrope avec prise en compte de la cohésion au niveau de contact.

L'indice des vides de l'échantillon varie de  $e = 0.182$  à  $e = 0.272$  pour la distribution de taille de grains considérée, le rapport entre le rayon maximal et le rayon minimal est  $r_{max}/r_{min} = 0.5/0.3$ , lorsque  $\mu$  varie de 0.0 à 1.0. Parallèlement, le nombre de contacts diminue de façon asymptotique vers une valeur finale (de 20508 à 14425 contacts, équivalent à un nombre de coordination diminue de 4.1 (dense) à 2.88 (lâche)).

La figure 2.13 donne les évolutions des contraintes  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  au cours d'une compression isotrope  $\mu = 0$  (dense) et  $\mu = 1$  (lâche). On remarque que les contraintes atteignent rapidement leurs valeurs voulues. Ensuite, l'échantillon prend du temps pour s'équilibrer au mieux suivant des critères choisis.

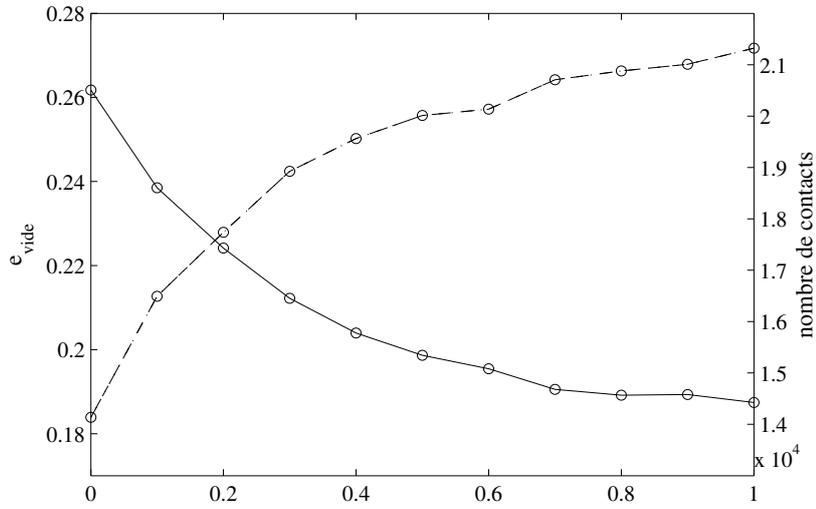


FIGURE 2.12 – Évolution de l'indice des vides  $e$  (trait pointillé) et le nombre de contacts (trait continu) en fonction du coefficient de frottement interne  $\mu$  après une compression isotrope pour un échantillon de 10000 grains et CLP.

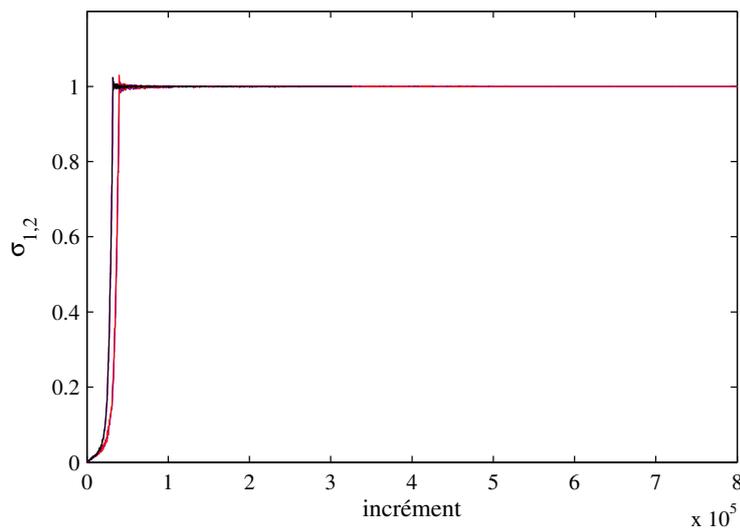


FIGURE 2.13 – Évolution de la contrainte pendant la compression isotrope d'un échantillon très dense ( $\mu = 0$ ) :  $\sigma_1$  (bleu),  $\sigma_2$  (rouge) ; et d'un échantillon lâche ( $\mu = 1$ ) :  $\sigma_1$  (noir),  $\sigma_2$  (rose).

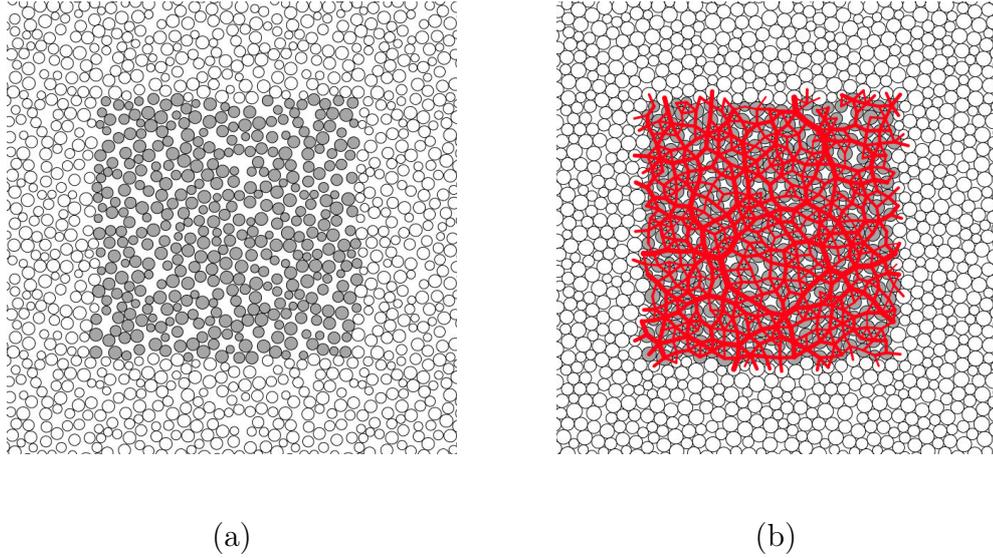


FIGURE 2.14 – VER avec CLP : (a) Configuration initiale et (b) après la compression isotrope.

Un exemple d'un VER avec CLP avant et après la compression isotrope est montré sur la figure 2.14. La figure à gauche représente le VER à l'état initial, c'est-à-dire à la fin de la phase de génération de l'échantillon numérique (voir la section 2.4.1). La figure à droite représente l'échantillon après la compression isotrope avec la cohésion. À cet instant, un réseau de contact est bien construit. Le trait en rouge relie les centres des particules en contact et son épaisseur est proportionnel à la force élastique ( $f_{el}$ ).

### 2.4.3 Échantillons numériques utilisés

Les échantillons sont préparés suivant le processus décrit aux paragraphes 2.4.1 et 2.4.2 avec une compression isotrope sans frottement interne afin d'obtenir des échantillons très dense. Le rapport entre le rayon maximal et le rayon minimal vaut  $r_{max}/r_{min} = 0.5/0.3$ . Les nombres des particules choisis sont 400, 3600, 6400, 10000 et 22500. Les caractéristiques du VER à l'état isotrope sont présentées dans le tableau 2.1.

TABLE 2.1 – Caractéristiques des VER à l'état isotrope.

Etiquette	Nombre				Indice des vides
	de grains	de contacts	de contacts collés	de coordination	
VER400	400	809	809	4,04	0,1871
VER3600	3600	7353	7353	4,09	0,1855
VER6400	6400	13124	13124	4,10	0,1842
VER10000	10000	20508	20508	4,10	0,1839
VER22500	22500	46151	46151	4,10	0,1832

On trouve que plus le nombre de grains est élevé, plus les conditions d'isotropie et d'homogénéité sont bien vérifiées. En effet, les orientations de contact sont presque isotropes si le nombre de grains est supérieur à 6400; de plus, l'homogénéité de la densité de contact est également observée. Entre les échantillons préparés, la différence en terme d'indice des vides ou de nombre de coordination est négligeable. C'est-à-dire, avec n'importe quel nombre de grains, on peut toujours obtenir un échantillon très dense après une compression isotrope. Il suffit d'effectuer cette étape avec une valeur nulle du coefficient de frottement intergranulaire  $\mu = 0$ .

Les distributions de taille et les orientations de contact sont représentées comme sur les figures 2.15 et 2.16.

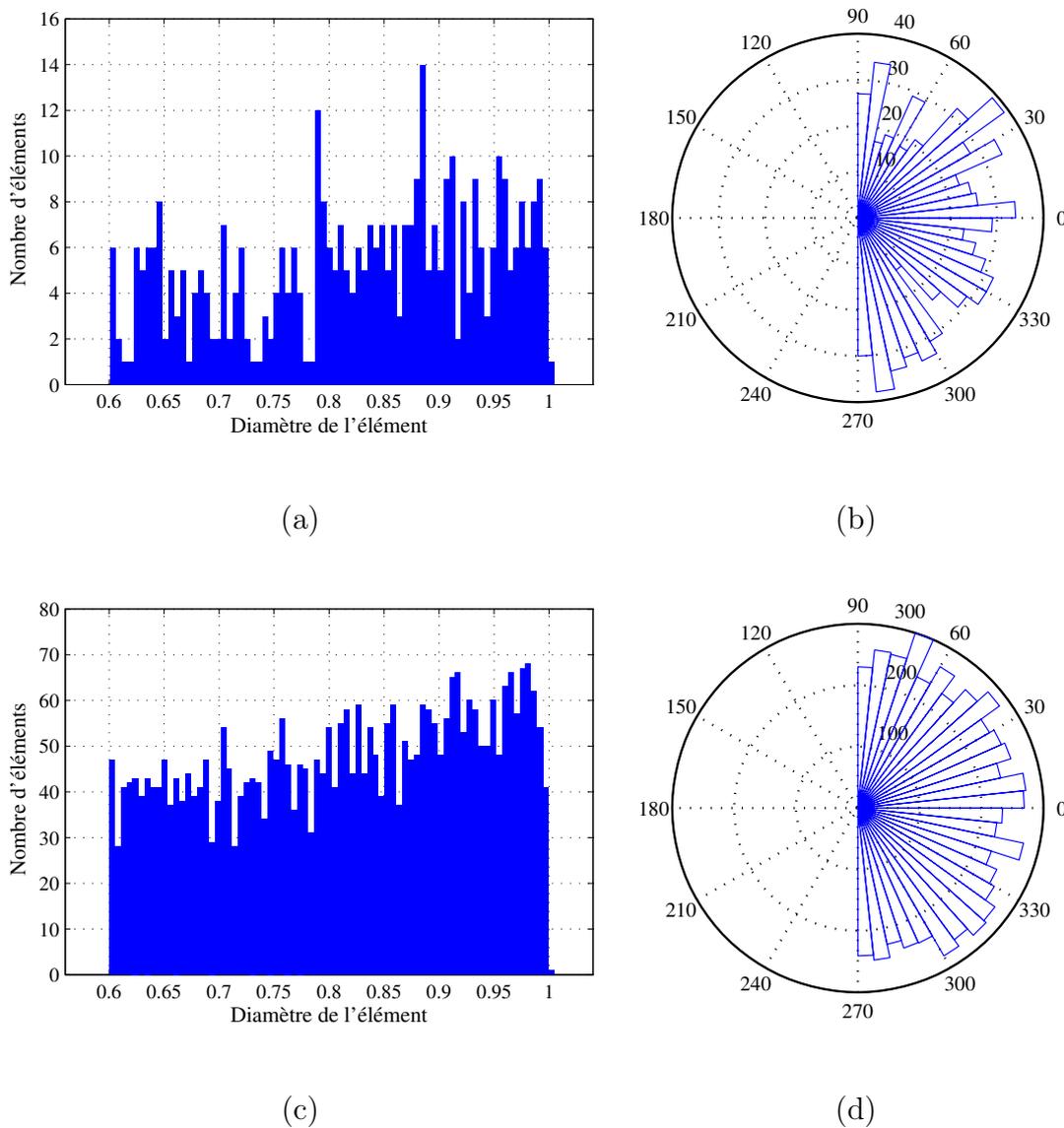
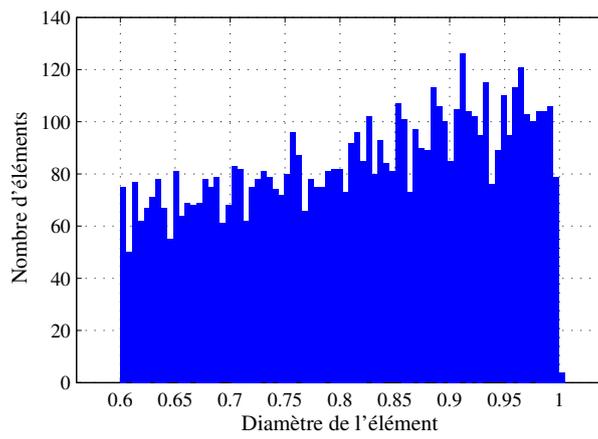
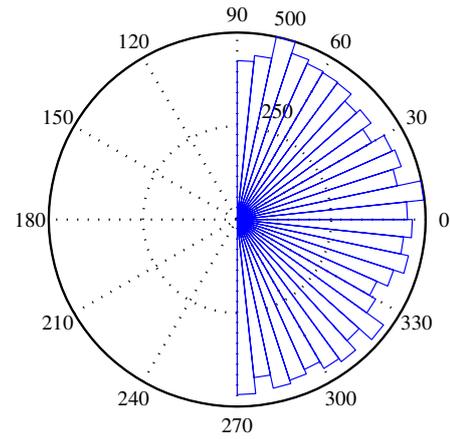


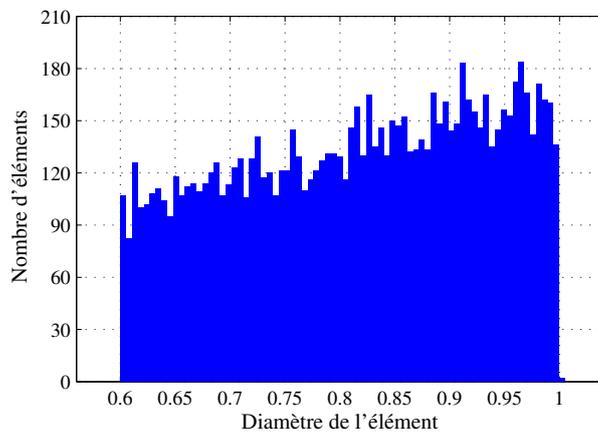
FIGURE 2.15 – Distribution de tailles de grains et les orientations du contact du VER : (a,b) VER400; (c,d) VER3600.



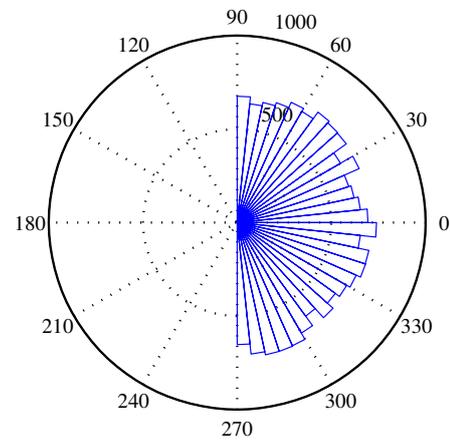
(a)



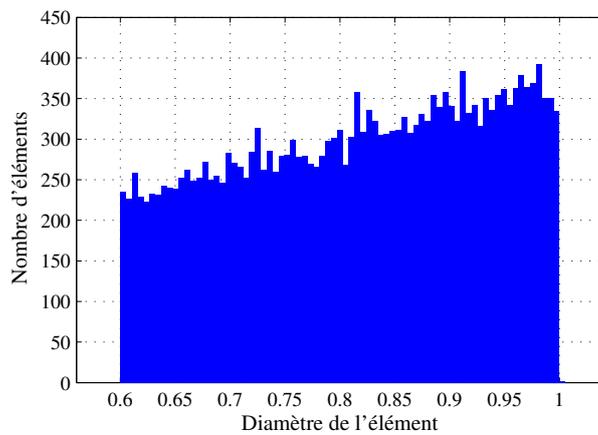
(b)



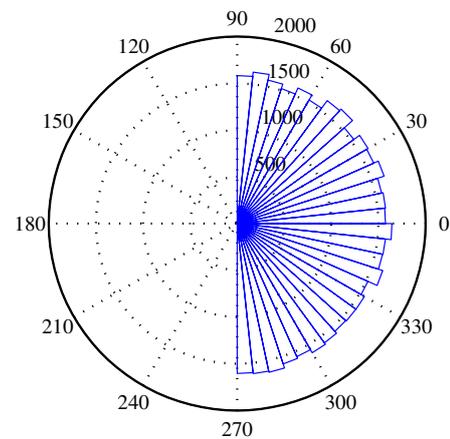
(c)



(d)



(e)



(f)

FIGURE 2.16 – Distribution de tailles de grains et les orientations du contact du VER : (a,b) VER6400 ; (c,d) VER10000 ; (e,f) VER22500.

Chareyre [40] a réalisé une série de simulations biaxiales sur des assemblages granulaires purement frottants en changeant le nombre de grains suivant les cas, et en fixant la taille des grains avec les conditions aux limites de type parois rigides. Il a constaté que quand le nombre de grains augmentait la dispersion des résultats d'un essai biaxial diminuait. Il a montré aussi qu'avec un échantillon de 4000 grains, le résultat d'un biaxial était acceptable.

## 2.4.4 Compression biaxiale modélisée en DEM

### 2.4.4.1 Principe

On considère un VER soumis à un chargement biaxial avec une pression de confinement constante et une vitesse de déformation axiale imposée constante (figure 2.17).

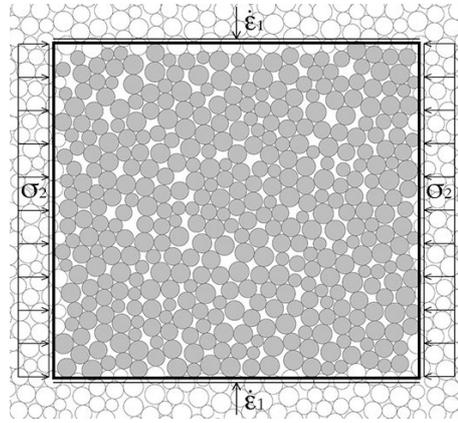


FIGURE 2.17 – Principe de l'essai biaxial avec CLP.

Le nombre d'inertie  $I$  est défini comme la racine carrée du rapport entre la force statique moyenne entre les particules (l'ordre de  $P\bar{a}^{D-1}$ ) et la force cinétique moyenne due à une vitesse de déformation imposée ( $m\bar{a}\dot{\epsilon}^2$ ) :

$$I = \dot{\epsilon} \sqrt{\frac{m}{P\bar{a}^{D-2}}} \quad (2.22)$$

Dans l'équation 2.22,  $P$ ,  $\bar{a}$ ,  $D$  sont respectivement la pression de confinement ( $P = \sigma_2$ ), le diamètre moyen de l'assemblage granulaire et la dimension du problème. En 2D,  $D = 2$ , cette équation se réduit à :

$$I = \dot{\epsilon} \sqrt{\frac{m}{P}} \quad (2.23)$$

Les expériences et simulations numériques montrent que le régime quasi-statique existe pour des valeurs de  $I$  inférieures à  $10^{-4}$ . En imposant une valeur de  $I$  suffisamment faible, on en déduit la déformation imposée  $\dot{\epsilon}$ .

### 2.4.4.2 Étude sur le nombre de grains

Comme évoqué dans la section 2.4.3, l'utilisation d'un nombre suffisant de grains est nécessaire dans les simulations numériques par la DEM afin d'obtenir un comportement indépendant du nombre de grains.

Une suite des calculs identiques a été menée en changeant le nombre de grains du VER. Les paramètres microscopiques choisis sont :  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$  et  $\mu = 0,5$ . Ici  $p^* = 1$  (voir la définition de  $p^*$  dans section 2.2.2.2). La force de cohésion est donc égale à :  $f_{n0} = \bar{a} \cdot \sigma_0$  avec  $\bar{a}$  est le diamètre moyen des grains dans l'ensemble de la microstructure et  $\sigma_0$  est la contrainte isotrope.

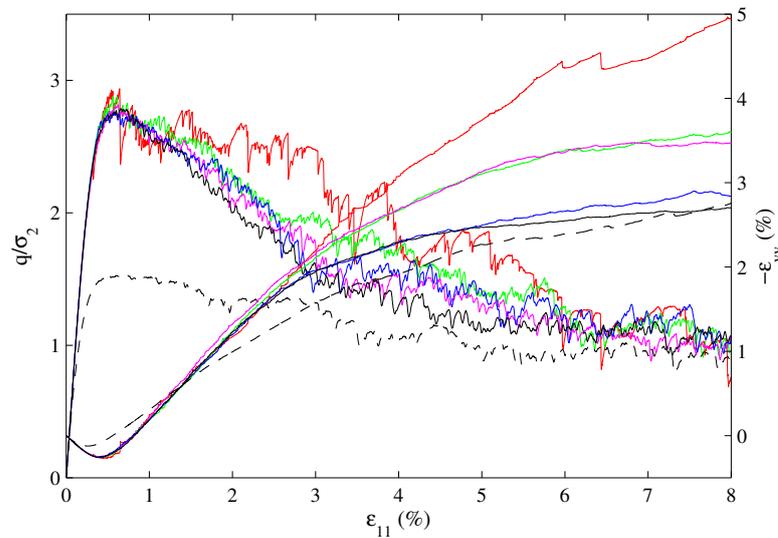


FIGURE 2.18 – Réponses macroscopiques des essais biaxiaux en compression : VER400 (rouge), VER3600 (vert), VER6400 (rose), VER10000 (bleu) et VER22500 (noir). La réponse en noir pointillé est celle du cas sans cohésion du VER10000, avec :  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ ,  $\mu = 0.5$  et  $p^* = 0$ .

On constate que plus le nombre de grains est élevé, plus la réponse est lisse. Avec un VER de 400 grains (courbe rouge), la courbe contrainte déformation est très bruitée ; son pic est difficilement trouvé. À partir de 3600 grains, on obtient un pic bien marqué et puis la réponse descend vers un plateau (figure 2.18). Pour les 5 calculs, les courbes convergent vers un même plateau. Les deux calculs avec VER10000 et VER22500 grains sont très similaires, ce qui montre qu'avec un nombre de grains suffisant, la réponse mécanique tend vers à peu près une même solution.

Sur la figure 2.18, on voit bien que le VER est d'abord contractant suivi d'une phase de dilatance. Leur réponse est identique dans la première phase. Les VER400, VER3600 et VER6400 sont plus dilatant que ceux de VER10000 et VER22500. En plus, les réponses cinématiques des VER10000 et 22500 montrent que la déformation volumique tend vers un plateau en même temps que les évolutions de contraintes. Cet

événement n'a pas été observé avec un VER se composant de moins de grains. En fait, cela vient du fait de l'apparition d'un phénomène dit *localisation de la déformation*. Une fois la localisation de la déformation est produite, le VER est dominé par des bandes de cisaillement et on peut imaginer l'existence de blocs rigides qui glissent l'un sur l'autre. La déformation volumique du VER devient inchangeable. Il est important de noter que ce phénomène est rencontré si le VER contient un nombre suffisant de particules, *i.e.* 6400 grains d'après ce qui a été montré.

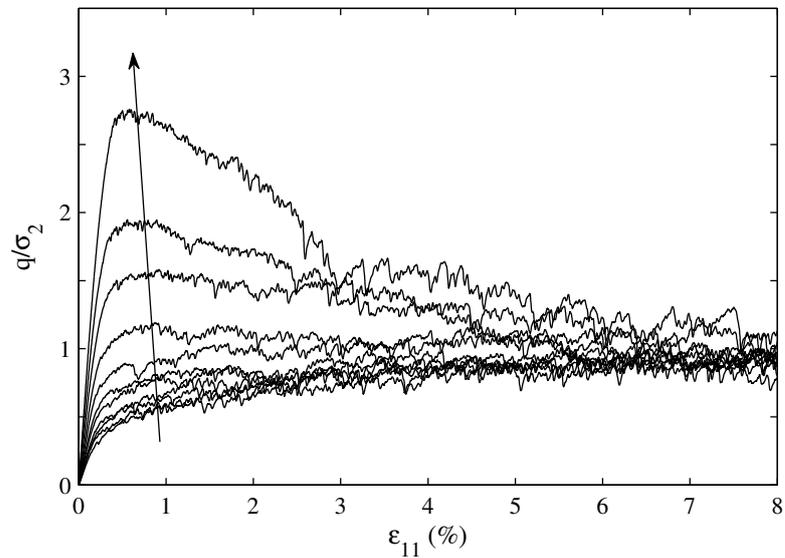
Cette figure présente aussi la réponse d'un échantillon sans cohésion. La comparaison avec les échantillons cohésifs montre clairement l'influence de la cohésion au niveau du contact sur la réponse macroscopique de l'échantillon. On obtient un pic plus marqué et son amplitude est plus grande. Ces deux échantillons (avec et sans cohésion) tendent vers un même état en grandes déformations lorsque tous les contacts collés sont cassés. En ce qui concerne la déformation, l'échantillon avec la cohésion est plus contractant en première phase de l'essai et plus dilatant par la suite.

Suite aux analyses montrées ci-dessus, le VER qui contient 10000 grains est choisi pour effectuer les études paramétriques suivantes.

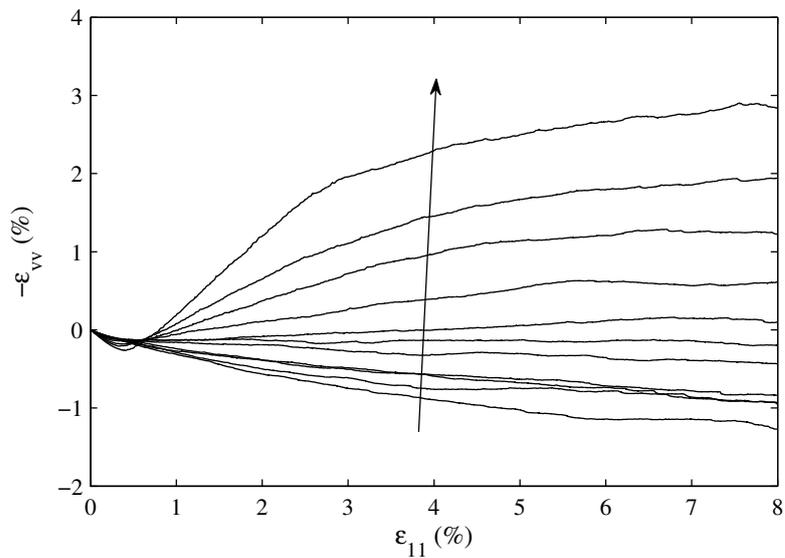
#### 2.4.4.3 Influence de l'indice des vides sur les résultats

L'utilisation de différentes valeurs du coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  dans la partie de compression isotrope donne des échantillons à différents niveaux de compacité. Les échantillons lâches ou denses se comportent de manière très différente.

Les réponses mécaniques de ces échantillons sont montrées sur la figure 2.19. Les flèches classent les courbes suivant la compacité initiale croissante qui est obtenue à l'issue de la compression isotrope. On obtient ici la gamme de comportements typique des sables. Concernant la contrainte, le pic augmente avec la compacité du VER. Un VER "très lâche" ne présente pas de pic. Pour des grandes déformations, tous les échantillons tendent vers un même palier. Ces simulations confirment alors la théorie de l'état critique : l'état interne du matériau s'approche d'un certain état dit "l'état critique", indépendamment de l'état initial lorsqu'il est soumis en grandes déformations. Une fois l'état critique est atteint, la déformation plastique peut augmenter infiniment, à une contrainte déviatorique constante. Si le phénomène de localisation de la déformation est observé, l'état critique du matériau se trouve à l'intérieur des bandes de cisaillement. Simultanément avec les contraintes, les évolutions cinématiques sont aussi très typiques. Les échantillons denses représentent des comportements contractants et puis dilatants, alors que ceux des échantillons lâches sont purement contractants.



(a)



(b)

FIGURE 2.19 – Influence de l'indice des vides  $e$  sur les résultats. Paramètres micro-mécaniques :  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ ,  $\mu = 0.5$  et  $p^* = 1$  : (a) contrainte déviatorique  $q$  normalisée par contrainte de confinement  $\sigma_2$  versus déformation axiale  $\varepsilon_{11}$  ; (b) déformation volumique  $\varepsilon_{vv}$  versus la déformation axiale  $\varepsilon_{11}$ .

#### 2.4.4.4 Étude paramétrique sur les raideurs de contact

Les premiers calculs sont faits afin de tester l'influence du rapport  $k_n/k_t$  sur la réponse mécanique. Dans le domaine élastique, les raideurs normale et tangentielle peuvent être reliées par le coefficient de Poisson ( $\nu$ ) dans le modèle simplifié de l'élasticité Hertz-Mindlin :

$$\frac{k_n}{k_t} = 2 \cdot \left( \frac{1 - \nu}{2 - \nu} \right) \quad (2.24)$$

On peut montrer facilement que si le rapport  $k_n/k_t < 1$ , le coefficient de Poisson est négatif ce qui correspond aux matériaux auxétiques. En mécanique des sols, on ne considère que le cas où ce rapport est supérieur ou égal à 1. La raideur normale  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$  est gardée constante et on varie le rapport  $k_n/k_t$ . Le rapport entre  $k_n/k_t$  vaut alors alternativement 1, 1.3, 2, 2.5, 3.3 et 4. Dans tous ces calculs, le coefficient de frottement intergranulaire est constant et égal à  $\mu = 0.5$ . Leurs résultats sont montrés sur la figure 2.20.

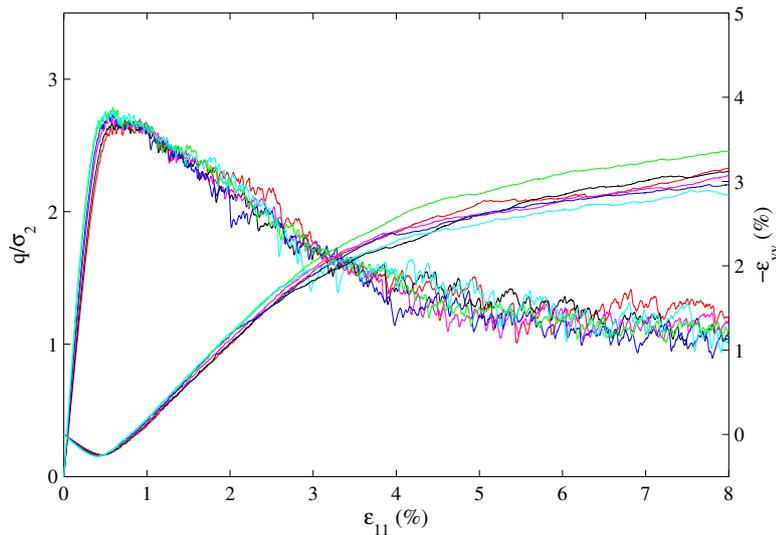


FIGURE 2.20 – Étude sur le rapport  $k_n/k_t$  :  $k_n/k_t = 4$  (rouge) ;  $k_n/k_t = 3.3$  (noir) ;  $k_n/k_t = 2.5$  (rose),  $k_n/k_t = 2.0$  (bleu),  $k_n/k_t = 1.3$  (vert),  $k_n/k_t = 1.0$  (cygan). Autres paramètres micromécaniques :  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$ ,  $\mu = 0.5$ ,  $p^* = 1$ .

Il est montré par Combe [45] que lorsque  $k_n/k_t < 2$ , les mesures des déformations macroscopiques sont sensiblement identiques. Sur la figure 2.20, on remarque que  $k_n/k_t$  ne semble pas beaucoup influencer la réponse macroscopique. Par contre, sur la figure 2.21, la différence entre ces simulations est plus nette. On retrouve ici une même conclusion avec Combe [45] : si  $k_n/k_t > 2$ , la réponse commence à s'éloigner. En plus, Roux et Combe [156] distinguent deux régimes de déformations : type I, celle qui provient de la déformation des contacts ; et type II, celle qui résulte de réarrangements du réseau en raison des instabilités microscopiques. Tous les échantillons utilisés ici sont préparés en

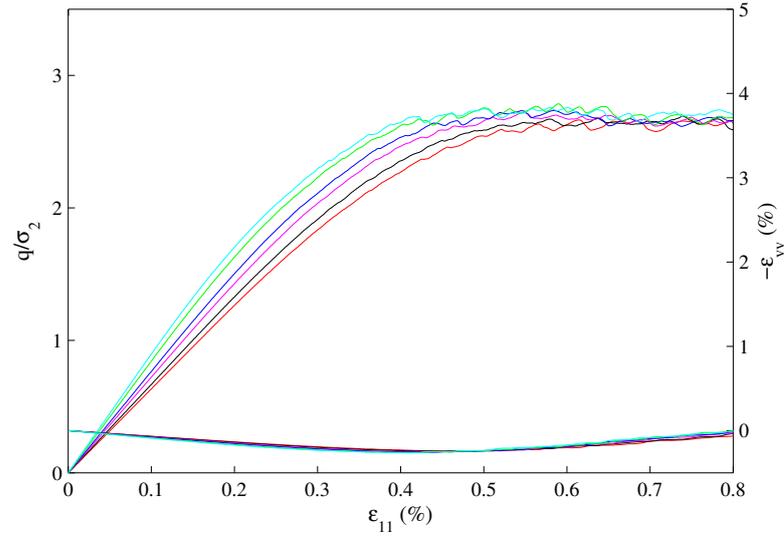


FIGURE 2.21 – Zoom de la figure 2.20 dans la zone  $\varepsilon_{11} = 0 - 0.8\%$  :  $k_n/k_t = 4$  (rouge) ;  $k_n/k_t = 3.3$  (noir) ;  $k_n/k_t = 2.5$  (rose),  $k_n/k_t = 2.0$  (bleu),  $k_n/k_t = 1.3$  (vert),  $k_n/k_t = 1.0$  (cygan).

négligeant le frottement intergranulaire ( $\mu = 0$ ) dans la phase de compression isotrope. On obtient alors une configuration de coordination très élevée, un échantillon numérique très dense. Ils sont donc capables de résister à une contrainte déviatorique importante, représente une déformation de type I bien que la réponse ne soit pas élastique (Roux [154]) en raison du frottement intergranulaire. Une fois la rupture du réseau de contact se produit, on observe alors des déformations de type II.

Ensuite, on considère le cas où  $k_n/k_t = 1$ .  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a})$  prendra les valeurs 500, 750, 1000 et 1250 dans les calculs suivants. On effectue des mêmes essais biaxiaux en compression avec  $\mu = 0.5$  et  $p^* = 1$ . La figure 2.22 présente leurs réponses mécaniques. On voit clairement que le pic est retardé si on diminue le niveau de raideur (c'est-à-dire, la réponse avec  $\kappa$  plus élevé est plus raide). En ce qui concerne la déformation volumique, l'échantillon est plus contractant (au début) et moins dilatant (après) si  $\kappa$  est faible. Toutes les courbes tendent vers un même plateau, les réponses en bleu ( $\kappa = 500$ ), rouge ( $\kappa = 750$ ) et noir ( $\kappa = 1000$ ) sont mélangées. La réponse en rose ( $\kappa = 1250$ ) est la plus dilatant et atteint un plateau plus élevé.

Suite aux analyses ci-dessus, il est préférable de choisir  $\kappa = (750 - 1500)$  et  $k_n/k_t \leq 2$  pour les calculs suivants.

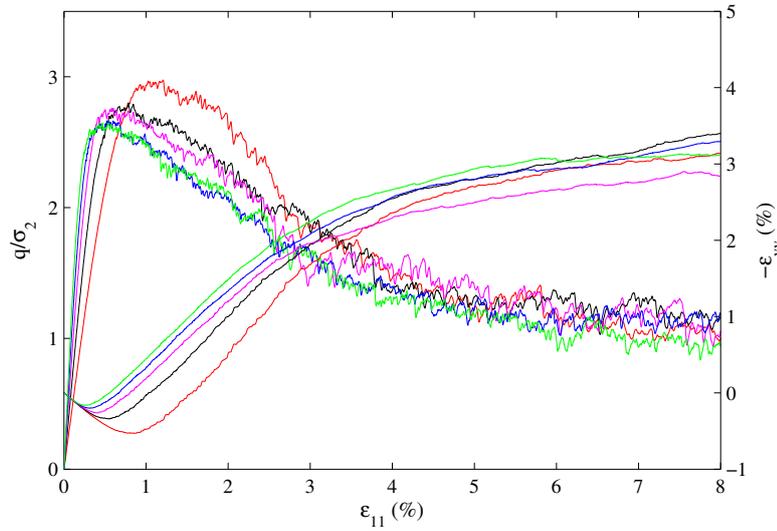


FIGURE 2.22 – Influence des valeurs  $\kappa$ ,  $k_n/k_t = 1$  :  $\kappa = 500$  (rouge) ;  $\kappa = 750$  (noir) ;  $\kappa = 1000$  (rose) ;  $\kappa = 1250$  (bleu) ;  $\kappa = 1500$  (vert). Autres paramètres micromécaniques :  $\mu = 0.5$ ,  $p^* = 1$ .

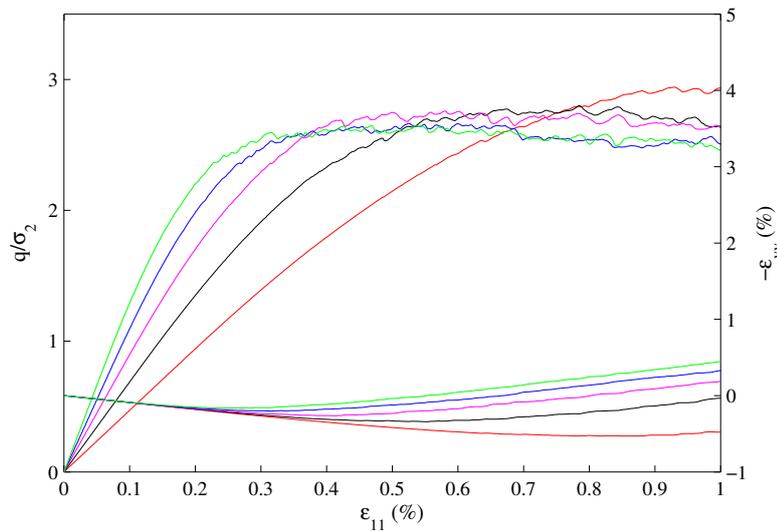


FIGURE 2.23 – Zoom sur la figure 2.22 dans la zone  $\epsilon_{11} = 0 - 1\%$ ,  $k_n/k_t = 1$  :  $\kappa = 500$  (rouge) ;  $\kappa = 750$  (noir) ;  $\kappa = 1000$  (rose) ;  $\kappa = 1250$  (bleu) ;  $\kappa = 1500$  (vert).

### 2.4.4.5 Étude paramétrique sur le coefficient de frottement intergranulaire

Dans cette section, on va varier le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  en gardant les autres paramètres  $\kappa = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ . Il est pris à  $\mu = 0.3, 0.5, 0.7$ . Les évolutions de contrainte déviatorique  $q = \sigma_1 - \sigma_2$  normalisée par la pression de confinement et de déformation volumique versus la déformation axiale sont ensuite montrées.

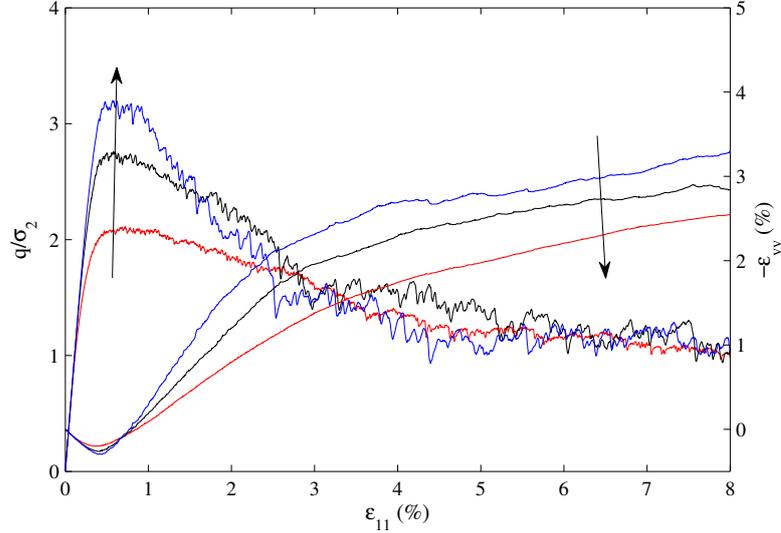


FIGURE 2.24 – Étude du coefficient de frottement intergranulaire :  $\mu = 0.3$  (rouge),  $\mu = 0.5$  (noir),  $\mu = 0.7$  (bleu). Paramètres microscopiques  $\kappa = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ ,  $p^* = 1$ .

Sur la figure 2.24, on constate que plus  $\mu$  est élevé, plus on obtient un pic important et marqué. Pour les grandes déformations ( $\varepsilon_{11} > 5\%$ ), le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  n'influence pas beaucoup l'évolution de la contrainte macroscopique. En effet, en grandes déformations, la forme des grains joue un rôle beaucoup plus important que celui de coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  (CEGEO *et al.* [33]). Elle décide donc le plateau du matériau à l'état critique, c'est pour cette raison qu'on a trouvé un palier identique. Néanmoins, la différence de variation de volume est très nette. Dans ces trois calculs, la phase contractante est assez similaire, mais la phase dilatante dépend fortement de ce coefficient. Plus  $\mu$  est grand, plus l'échantillon est dilatant. En fait, ce coefficient joue un rôle important dans l'inégalité de Coulomb et il empêche le glissement d'un grain sur l'autre.

### 2.4.4.6 Étude paramétrique sur $p^*$

Dans l'objectif d'éclairer le rôle du niveau de cohésion sur le comportement macroscopique du matériau, on cherche à faire varier les valeurs de  $p^*$  (équation (2.7)). D'après l'équation (2.7) on peut déduire que :  $f_{n0} = p^* \cdot (\bar{a} \cdot \sigma_0)$ .  $f_{n0}$  est alors la force se compare aux forces liées à la contrainte de confinement. Si  $p^* \ll 1$ , la force due au confinement joue un rôle principal et les effets de cohésion sont négligeables. La cohésion agit sur

la structure de différentes manières : l'augmentation des interpénétrations au niveau de contacts ( $p^*$  augmente), les résistances du matériau en présence de la cohésion seront modifiées.

En prenant différentes valeurs de  $p^*$  ( $p^* = 0, 0.5, 1.0, 2.0, 3.0$ ), une étude paramétrique est réalisée. Les résultats sur la figure 2.25 montrent une forte influence de ce paramètre. Lorsque  $p^*$  augmente, le pic de la contrainte augmente et est atteint pour des déformations axiales ( $\varepsilon_{11}$ ) plus grandes. Cette observation explique l'influence de  $p^*$  sur la résistance du matériau : une valeur plus importante de  $p^*$  produit une résistance plus élevée du matériau. En toute logique, cela conduit à une zone plus grande du régime de déformation de type I. De plus, le changement entre le régime de type I et le régime de type II est observé au pic de la contrainte. Celui-ci correspond à la résistance maximale du matériau atteinte ; ce qui explique le pic à des déformations axiales plus grandes si  $p^*$  augmente. On note ici que la courbe en rouge correspond au cas d'un milieu non-cohésif ( $p^* = 0$ ).

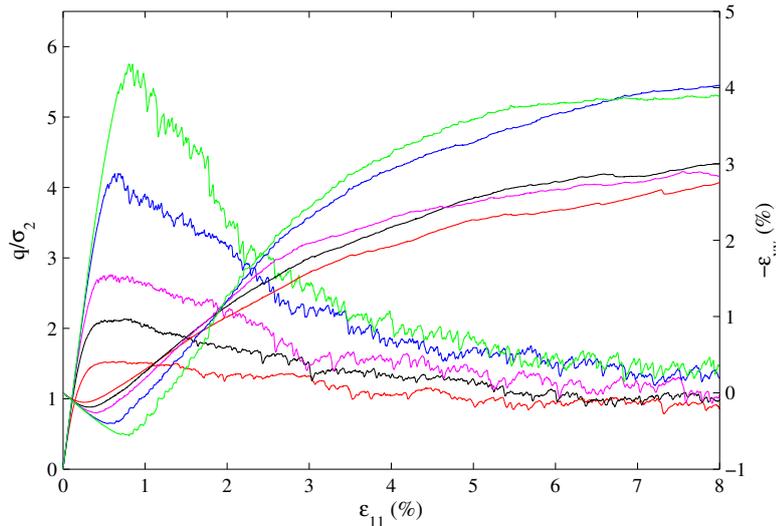


FIGURE 2.25 – Étude du coefficient  $p^*$  :  $p^* = 0.0$  (rouge),  $p^* = 0.5$  (noir),  $p^* = 1.0$  (rose),  $p^* = 2.0$  (bleu),  $p^* = 3.0$  (vert). Autres paramètres microscopiques :  $\kappa = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ ,  $\mu = 0.5$ .

Pour une faible cohésion ( $p^* \leq 1$ ), on retrouve presque la même valeur de l'angle de frottement interne  $\varphi$ . Une fois la cohésion devient plus grande ( $p^* > 1$ ), une valeur plus importante de ce coefficient est obtenue ce qui explique une forte contractance dans la première phase suivie d'une plus grande dilatance du matériau dans la dernière phase. Comme le critère de Mohr-Coulomb le confirme, plus la force de cohésion est grande, plus le pic trouvé est élevé.

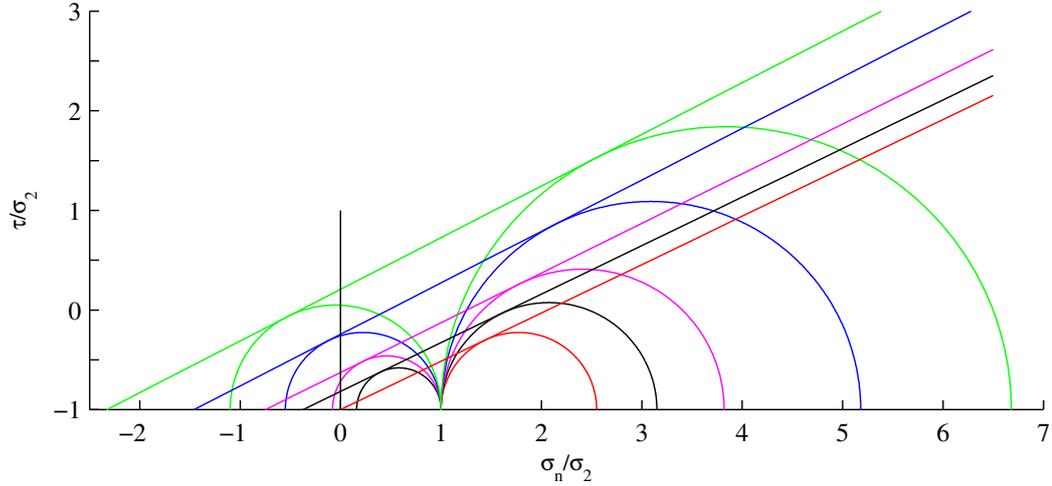


FIGURE 2.26 – Cercles de Mohr au pic :  $p^* = 0.0$  (rouge),  $p^* = 0.5$  (noir),  $p^* = 1.0$  (rose),  $p^* = 2.0$  (bleu),  $p^* = 3.0$  (vert).

Les paramètres phénoménologiques du critère Mohr-Coulomb ( $C$ ,  $\varphi$ ) peuvent être identifiés grâce aux différents types d'essai tel que l'essai de cisaillement ou biaxial. On considère ici deux essais biaxiaux en compression et en traction. Les cercles de Mohr au pic dans le plan de contraintes sont ensuite tracés (voir la figure 2.26). À partir de cette figure, les valeurs de  $C$  et  $\varphi$  sont résumées dans le tableau 2.2 et représentées sur la figure 2.27. On constate que la cohésion macroscopique augmente avec  $p^*$ . En effet, la cohésion macroscopique vient principalement des liens cohésifs à petite échelle. Concernant l'angle de frottement interne  $\varphi = 25 \pm 0.5^\circ$ , et ne dépend pas de  $p^*$ . Ce résultat est logique dans la mesure où  $\mu$  est identique dans toutes les simulations. Une légère augmentation de  $\varphi$  avec  $p^*$  s'explique simplement par une légère augmentation du nombre de coordination  $z$  avec le niveau de cohésion  $p^*$ .

TABLE 2.2 – Paramètres du critère Mohr-Coulomb correspondant à  $p^*$ .

$p^*$	$C/\sigma_2$	$\varphi$ ( $^\circ$ )	Couleur
0.0	0.00	25	rouge
0.5	0.15	25	noir
1.0	0.31	25	rose
2.0	0.61	25.5	bleu
3.0	0.96	25.5	vert

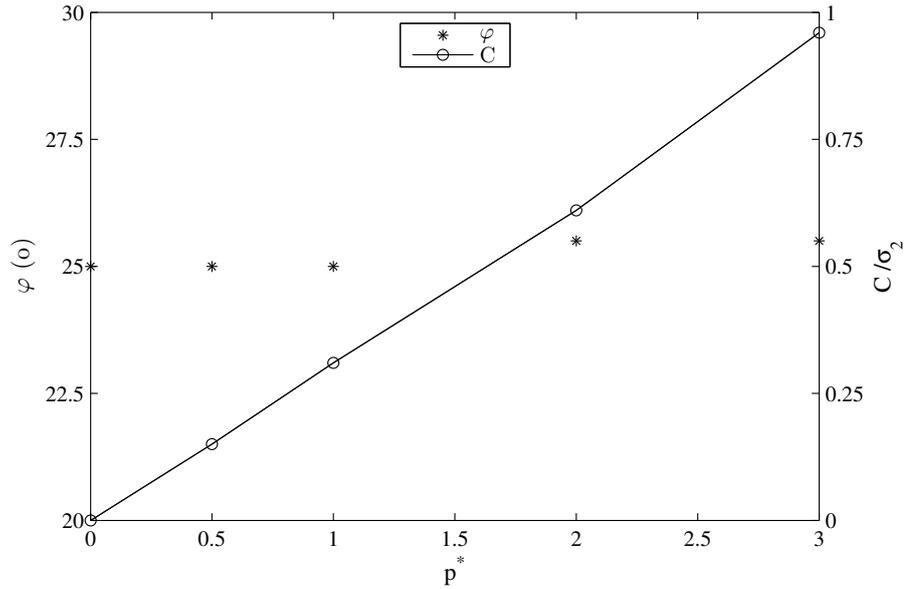


FIGURE 2.27 – Valeurs de  $C$  et  $\varphi$  au pic correspondant à  $p^*$ .

#### 2.4.4.7 Localisation dans les milieux granulaires cohésifs modélisés en éléments discrets

On présente ci-dessous les chaînes de forces relativement à un échantillon qui se compose de 22500 grains soumis à un chargement biaxial. À l'instant initial (après la compression isotrope) son indice des vides  $e = 0.199$ . Les paramètres micromécaniques utilisés pendant le chargement biaxial sont  $\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a}) = 1000$ ,  $k_n/k_t = 1$ ,  $\mu = 0.5$  et  $p^* = 1$ . La figure 2.28 montre l'évolution de contrainte et de déformation volumique.

La figure 2.29 présente la carte des chaînes des forces aux points indiqués sur la figure 2.28. Le modèle micromécanique qu'on utilise ici, est capable de produire la rupture de la cohésion au niveau du contact. Tous les contacts sont initialement collés, mais le chargement cause des ruptures de cohésion, notamment en grandes déformations. Une fois la colle est cassée, elle ne rétablit pas la cohésion même si un nouveau contact se forme (colle fragile). C'est pourquoi on distingue dans les figures ci-dessous deux cas : le contact avec cohésion et le contact sans cohésion. La force élastique ( $f_{el}$ ) est représentée telle que la largeur des traits joignant les centres des particules en interactions est proportionnelle à la valeur de cette force élastique.

On constate que les contacts qui perdent la cohésion sont concentrés dans les bandes de couleurs vertes. Les positions des bandes sont périodiques en raison des CLP appliquées aux VER. Au pic (point 1), l'apparition de la bande n'est pas très claire bien qu'il y ait déjà un nombre important de contacts ayant perdu leur cohésion. La visualisation est plus nette à partir du point 3 (équivalent à une déformation axiale  $\varepsilon_{11} = 3\%$ ). Au point 5 ( $\varepsilon_{11} = 6\%$ ) et point 6 ( $\varepsilon_{11} = 8\%$ ), on voit clairement des zones où les contacts sans cohésion forment des bandes. L'hétérogénéité du milieu est évidente.

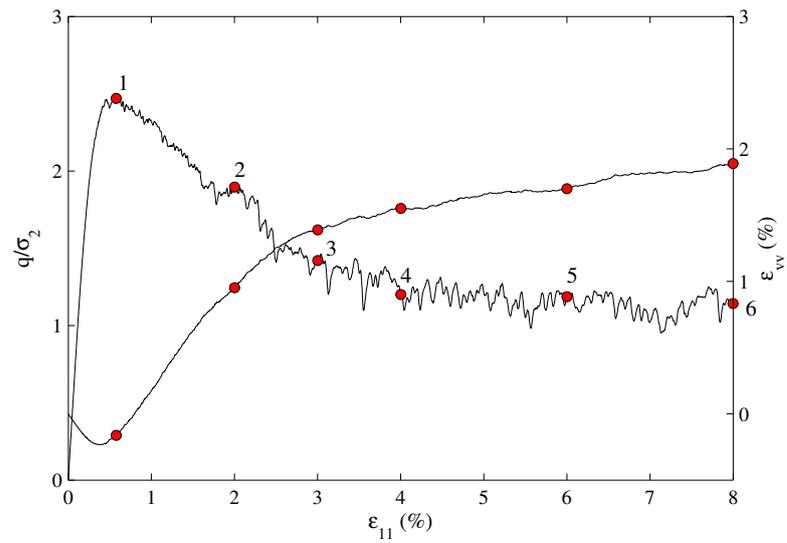


FIGURE 2.28 – Réponse du VER22500 : Les points étudiés sont numérotés.

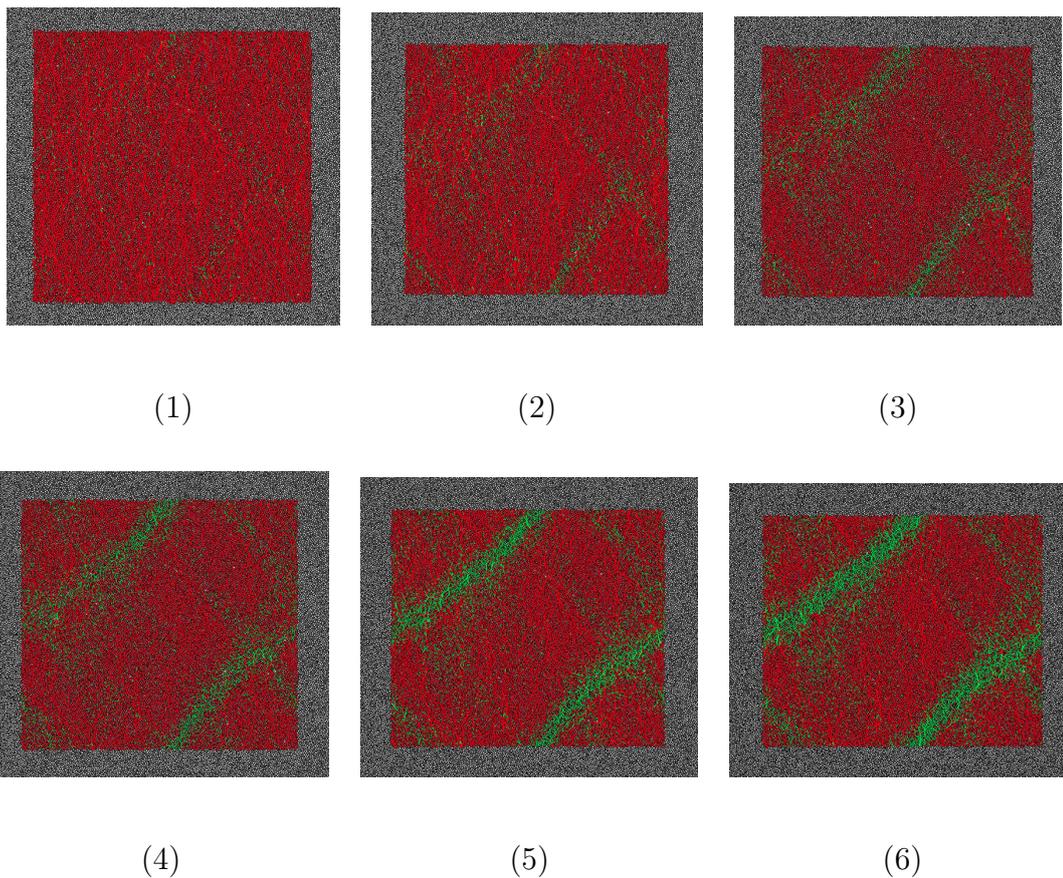


FIGURE 2.29 – Chaînes des forces. L'épaisseur du trait proportionne aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisés avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ), cohésion locale détruite.

## Fluctuations de déplacement des grains

### Définition

La fluctuation de déplacement (Roux et Combe [156]) est définie comme la différence entre les déplacements des grains et le produit entre le champ de déformation prévu par la Mécanique des Milieux Continus (MMC) et la position des grains. Son expression peut s'écrire :

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} \quad (2.25)$$

Avec :

- $\delta \mathbf{u}$  : fluctuation de déplacement
- $\mathbf{u}$  : déplacement du grain
- $\boldsymbol{\varepsilon}$  : champ de déformation prévu par MMC
- $\mathbf{r}$  : position du grain

### Calcul du champ de déformation prévu par MMC

Pour la détermination de la fluctuation, comme définie ci-dessus, il est nécessaire de calculer le champ de déformation pour un milieu continu équivalent. Les transformations linéaires  $a, b, c, d$  considérées sont détaillés sur la figure 2.30.

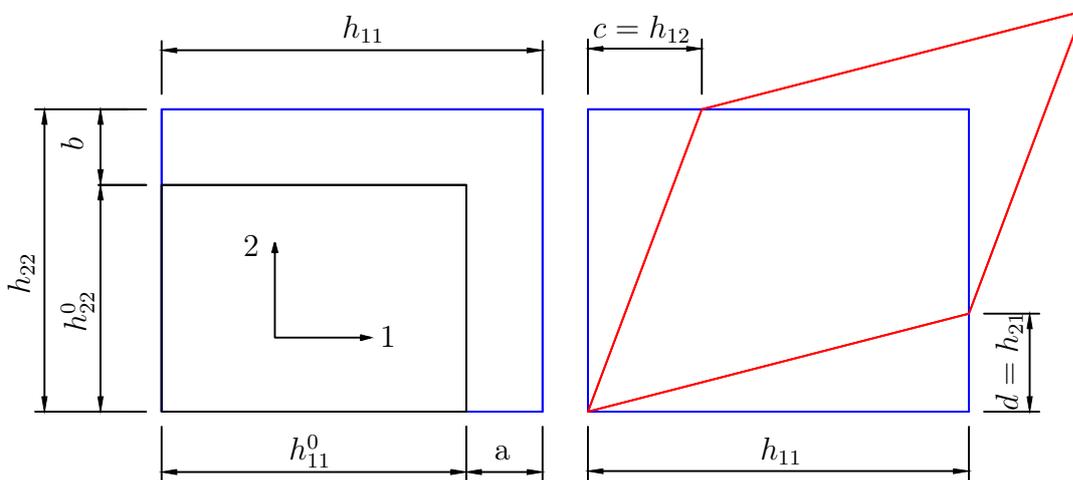


FIGURE 2.30 – Transformations linéaires planes. Les couleurs sont respectivement : état initial (noir), intermédiaire (bleu), final (rouge).

Sur cette figure,  $h_{11}^0$  et  $h_{22}^0$  représentent les dimensions initiales et  $h_{11}$ ,  $h_{12}$ ,  $h_{21}$  et  $h_{22}$  sont les dimensions finales. On cherche à calculer le champ du gradient de déformation correspondant à ces transformations. Pour ce faire, on détermine le champ de déplacements  $\mathbf{u} = (u_1 \ u_2)$  :

$$\begin{cases} u_1 = \frac{ax_1}{h_{11}^0} + \frac{bx_2}{h_{22}^0} \\ u_2 = \frac{cx_1}{h_{11}^0} + \frac{dx_2}{h_{22}^0} \end{cases} \quad (2.26)$$

Ensuite, on détermine le champ du gradient de déplacement  $\text{grad } \mathbf{u}$  :

$$\text{grad } \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{a}{h_{11}^0} & \frac{b}{h_{22}^0} \\ \frac{c}{h_{11}^0} & \frac{d}{h_{22}^0} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

Le champ de déformation  $\boldsymbol{\varepsilon}$  peut être calculé :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{a}{h_{11}^0} & \frac{1}{2} \left( \frac{b}{h_{22}^0} + \frac{c}{h_{11}^0} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{b}{h_{22}^0} + \frac{c}{h_{11}^0} \right) & \frac{d}{h_{22}^0} \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

Les dimensions à l'état final et à l'état initial sont reliées par  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  :

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} - h_{11}^0 & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} - h_{22}^0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Ensuite, la fluctuation de déplacement est calculée et représentée sur la figure 2.31. Cette figure montre des vecteurs aux centres des particules indiquant la fluctuation entre l'état considéré et la configuration initiale.

Les fluctuations montrées sur la figure 2.31 sont bien en accord avec les chaînes des forces présentés ici. Les bandes apparaissent et se développent dans les mêmes endroits. Pourtant, il semble que l'affichage des bandes par les fluctuations est plus clair. À l'intérieur des bandes, les vecteurs de fluctuations des grains sont opposés comme il y a deux blocs qui glissent l'un sur l'autre.

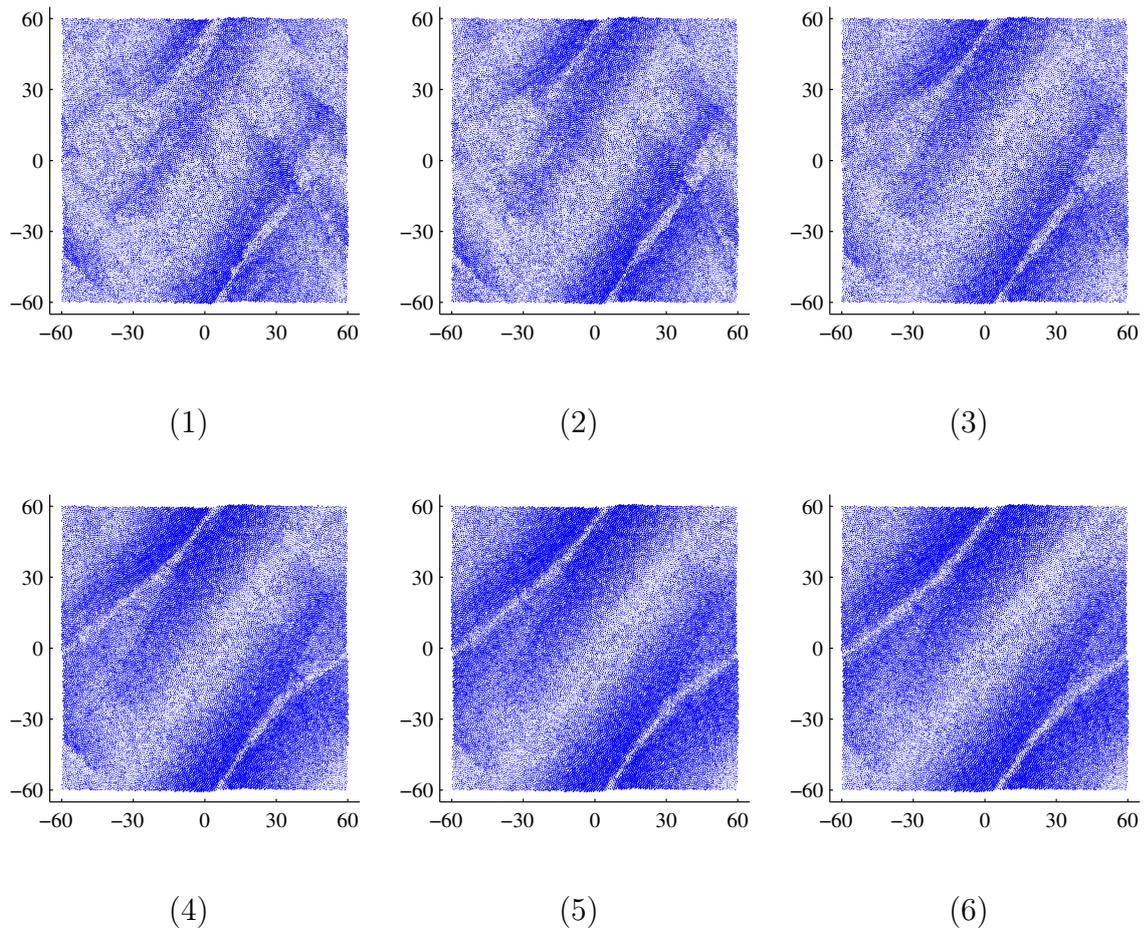


FIGURE 2.31 – Fluctuation totale de déplacement d'un échantillon VER22500 à différents états de déformations (comme l'indique la figure 2.28).

## 2.5 Conclusion

En premier lieu, les lois de contact de la DEM ont été discutées. Ensuite, nous avons présenté les modèles micromécaniques utilisés dans ce mémoire. Les CLP employées dans les simulations ont été utiles et efficaces pour éviter les effets de bords.

En second lieu, la génération d'un échantillon numérique ainsi que l'étape de chargement isotrope ont été expliquées. Les simulations numériques par DEM avec bi-CLP ont été réalisées avec succès afin d'éclairer les influences des paramètres microscopiques (le niveau de raideur  $\kappa$ , le rapport  $k_n/k_t$ , le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$ , le niveau de cohésion  $p^*$ ) sur les résultats lors du chargement biaxial.

Finalement, nous avons étudié comment se manifeste le phénomène de localisation de la déformation dans les milieux granulaires cohésifs modélisés en DEM. Nous avons considéré les chaînes de forces représentant les ruptures de cohésion, c'est-à-dire l'aspect statique, et les vecteurs de fluctuation de déplacement dans l'échantillon, c'est-à-dire l'aspect cinématique. Les deux aspects révèlent une cinématique des grains caractéristiques de la localisation en bandes de cisaillement et un mécanisme de dégradation de l'assemblage de grains dans ces bandes.



---

## Méthode d'homogénéisation numérique

---

*Une loi numérique de type DEM est d'abord construite par une technique d'homogénéisation. Ensuite, l'intégration numérique de cette loi est présentée ainsi que les formulations macroscopiques concernées. Enfin, une application à des problèmes d'ouvrages souterrains est simulée et analysée.*

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>62</b>
<b>3.2</b>	<b>Construire une loi par homogénéisation</b>	<b>62</b>
3.2.1	Loi numérique DEM	62
3.2.2	Enveloppe de réponse incrémentale	65
3.2.3	Matrice tangente à la loi	70
3.2.4	Tenseur acoustique	73
3.2.5	Analyse de la formation de bande de cisaillement	74
<b>3.3</b>	<b>Formulation macroscopique</b>	<b>83</b>
3.3.1	Loi de comportement macroscopique	83
3.3.2	Intégration numérique de la loi de comportement DEM	84
<b>3.4</b>	<b>Implémentation de la loi DEM dans ACTIV</b>	<b>85</b>
<b>3.5</b>	<b>Application à la modélisation d'ouvrages souterrains</b>	<b>87</b>
3.5.1	Introduction	87
3.5.2	Détermination des paramètres des modèles	87
3.5.3	Notations du calcul	90
3.5.4	Chemins de contraintes à proximité de la paroi d'une galerie	91
3.5.5	Chemin à rotation des axes principaux	98
<b>3.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>100</b>

---

## 3.1 Introduction

Ce chapitre a pour but de construire une loi numérique équivalente en se basant sur les interactions entre les grains dans un assemblage granulaire.

En utilisant la méthode des éléments discrets (DEM<sup>1</sup>) (section 1.2.2), et en appliquant une technique d'homogénéisation numérique sur un assemblage granulaire, une routine numérique est construite qui donne un incrément de contrainte en réponse à un incrément du gradient de déplacement imposé. Cette relation entre la contrainte et le gradient de déplacement est considérée comme une loi équivalente non-linéaire incrémentale pour l'assemblage granulaire étudié. Une fois construite cette loi de type DEM, elle sera implémentée dans le logiciel ACTIV, qui est conçu spécifiquement pour des problèmes au niveau élémentaire. Des applications à la modélisation d'ouvrages souterrains seront menées en utilisant la combinaison ACTIV-DEM.

## 3.2 Construire une loi par homogénéisation

### 3.2.1 Loi numérique DEM

#### 3.2.1.1 Méthode d'homogénéisation

Les matériaux granulaires, qui se composent de particules en contact, sont hétérogènes et discontinus par nature. Leurs propriétés macroscopiques viennent donc des caractéristiques à petite échelle telles que les interactions entre les particules.

À cause de la limitation de la puissance de calcul, la DEM ne permet pas encore de traiter des problèmes contenant de très grands nombres de grains dans le milieu granulaire considéré. L'utilisation d'une approche continue comme la méthode des éléments finis (FEM<sup>2</sup>) reste encore nécessaire. Classiquement, la FEM emploie une loi phénoménologique, souvent écrite sous forme mathématique, dans son utilisation afin de résoudre le problème aux limites. Ces lois qui décrivent le comportement mécanique des matériaux ont pour but de connaître la réponse à une sollicitation donnée. Les variables mises en jeu sont le tenseur de contraintes  $\sigma$  et le tenseur de déformations  $\varepsilon$ . Une loi de comportement est décrite souvent sous forme incrémentale  $\dot{\sigma} = f(\dot{\varepsilon})$ , reliant le taux de déformations et le taux de contraintes.

Pour déterminer la loi de comportement d'un milieu hétérogène, deux voies sont possibles : la première et la plus classique, c'est *l'approche phénoménologique*. En se basant sur les expériences effectuées sur des échantillons du matériau, cette méthode cherche une forme mathématique qui reproduit au mieux les données expérimentales. Néanmoins, cette démarche a des limites parce que la prédiction des paramètres est souvent difficile et surtout parce que le choix d'un cadre théorique de formulation adapté à

---

1. de l'anglais "Discrete Element Method"

2. de l'anglais "Finite Element Method"

la réalité du matériau tel que révélée par les expériences n'est pas toujours évident. En outre, l'utilisation de cette approche implique d'ignorer les propriétés à petite échelle et leurs influences sur la réponse macroscopique. La seconde voie est *l'approche de changement d'échelle*. On peut distinguer les méthodes de changement d'échelle en deux types en suivant les connaissances à l'échelle microscopique (Cambou et Jean [30]) : le premier est l'approche statique où la connaissance de la structure microscopique n'est que partielle ; le deuxième concerne *la méthode d'homogénéisation* dans laquelle la structure microscopique est complètement connue et qui fournit des lois de comportement déterminées par changement d'échelle.

Par les techniques de changement d'échelle, la méthode d'homogénéisation cherche à tirer une loi macroscopique à partir des connaissances (même partielles) à l'échelle plus petite, dite l'échelle microscopique ; cette loi macroscopique est appliquée alors aux problèmes aux limites à l'échelle réelle. Cette approche diffère des lois phénoménologiques dans lesquelles les équations constitutives sont écrites sous forme de formulations mathématiques, prenant en compte certains paramètres identifiés à partir d'essais expérimentaux. Dans la méthode d'homogénéisation, il est nécessaire de déterminer la contrainte à partir des efforts internes au niveau microscopique. Pour le cas des milieux continus, on réfère les lecteurs au livre de Cambou et Jean [30]. On s'intéresse ici au cas des milieux granulaires. Pour ces milieux, les efforts internes sont décrits par les forces interparticulaires.

La méthode d'homogénéisation est effectuée sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Il est élémentaire car il est considéré comme un point matériel du milieu homogénéisé équivalent ; il est représentatif parce qu'il est capable de reproduire un comportement macroscopique en tenant en compte des caractéristiques de ses constituants. Afin de bien répondre aux critères élémentaire et représentatif, le volume doit être ni trop grand ni trop petit. Il est petit devant la dimension de la structure pour qu'il soit élémentaire ; en plus, il est suffisant grand pour induire un ensemble représentatif des hétérogénéités microscopiques du matériau. Donc on a  $e \ll l \ll L$  où  $L$ ,  $l$ ,  $e$  sont respectivement les dimensions caractéristiques de la structure, du VER et des hétérogénéités.

Dans le cadre de ce travail de recherche, on souhaite modéliser le problème aux limites par FEM en utilisant une "loi DEM" au lieu d'une loi phénoménologique en chaque point d'intégration macroscopique. Cette "loi DEM" est construite par une technique d'homogénéisation décrite plus haut en prenant en compte les interactions des grains au niveau de contact par les modèles micromécanique décrits au chapitre 2. Cette technique nous ramène à obtenir un milieu continu équivalent à partir de ce milieu granulaire considéré. Cette "loi DEM" peut être considérée comme similaire à une loi non-linéaire avec un grand nombre de variables internes (*les géométries des grains, le réseau de contact, les forces d'interaction, etc.*)

Ce type de changement d'échelle sera effectué en considérant un VER qui se com-

pose d'un certain nombre de grains  $N$ . En appliquant des déformations au milieu, une contrainte est récupérée, qui nous donne une loi de comportement macroscopique pour ce milieu granulaire.

### 3.2.1.2 Tenseur de contraintes

La détermination des contraintes de Cauchy fait l'objet de cette section. On trouve dans la littérature plusieurs manières pour définir le tenseur des contraintes de Cauchy dans un milieu granulaire. Parmi eux, on se distingue l'approche consistant à séparer le milieu continu en deux sous-parties et à considérer les efforts exercés par l'une de partie sur l'autre : les premiers résultats sont montrés par Cauchy et Poisson, et rappelés par Love [109] dans l'hypothèse de périodicité. Ensuite, en 1966, Weber [183] introduit le tenseur des contraintes dans un milieu granulaire en considérant la résultante des efforts intergranulaires sur une facette pour un milieu granulaire quelconque. Une autre approche utilisant les puissances virtuelles a été développée par Caillerie [23] et Cambou *et al.* [29]. On cite également une méthode utilisée par plusieurs auteurs (Christophersen [43], Cundall [52], Moreau [123]), qui ont pris l'hypothèse de l'équilibre des grains du milieu pour décrire les contraintes.

La méthode proposée par Weber [183] a été choisie pour le présent travail. La contrainte équivalente du milieu peut être déterminée par :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{S} \cdot \sum_{(n,m) \in C} \vec{f}^{m/n} \otimes \vec{r}^{nm} \quad (3.1)$$

avec  $S$  la surface du VER en 2D.  $C$  est la liste des contacts entre les particules du VER.  $\vec{f}^{m/n}$  et  $\vec{r}^{nm}$  sont respectivement la force intergranulaire et le vecteur joignant les centres de grains  $(n, m)$  en contact. Ces valeurs dépendent des lois de contact qui ont été présentées dans le chapitre précédent.

### 3.2.1.3 Routine numérique de la loi

Une routine numérique implémentant la méthode des éléments discrets (DEM) (section 1.2.2) a été développée à l'occasion de cette thèse sur la base des travaux antérieurs de Combe [46]. Elle est appelée DEM-PLC.F dans l'objectif d'indiquer l'utilisation de la méthode DEM avec les conditions aux limites périodiques (PLC pour Periodic Limit Conditions). Cette routine nous permet d'appliquer un gradient de déplacement  $h_{kl}$  à un milieu granulaire qui se compose de grains (VER) et d'obtenir ensuite une contrainte de Cauchy correspondant à l'état actuel du milieu.

Pour ce faire, un schéma de calcul "prédicteur – correcteur" du troisième ordre est utilisé (Allen et Tildesley [1]). L'algorithme utilisé est illustré sur le tableau 3.1.

TABLE 3.1 – Algorithme de la routine numérique de type DEM.

1. Entrée : gradient de déplacement  $\Delta h_{kl}$
2. Prédicteur  $x_p, \dot{x}_p, \ddot{x}_p$  (positions, vitesse, accélération de particules)
3. Détection de contact (à partir d'une liste de grains voisins)
4. Calcul des forces de contact (en utilisant les modèles micromécaniques décrits dans chapitre 2)
5. Correcteur  $x_c, \dot{x}_c, \ddot{x}_c$
6. Vérification des conditions d'équilibre
  - a. Si oui : Goto 7
  - b. Sinon : Goto 2
7. Sortie : contraintes  $\sigma_{ij}$

### 3.2.2 Enveloppe de réponse incrémentale

Gudehus [86] a proposé la notion d'enveloppes de réponses, *response envelopes* comme un outil très puissant pour la représentation graphique des lois constitutives de type incrémental. Pour un incrément de déformations appliqué ( $\Delta\varepsilon$ ), les enveloppes de réponses sont les diagrammes polaires de l'incrément de contraintes ( $\Delta\sigma$ ). En 2D, le principe est illustré sur la figure 3.1.

$$\|\Delta\varepsilon\| = \sqrt{(\Delta\varepsilon_1)^2 + (\Delta\varepsilon_2)^2} \quad (3.2)$$

avec  $\Delta\varepsilon_1 = \|\Delta\varepsilon\| \sin \alpha_d$ ,  $\Delta\varepsilon_2 = \|\Delta\varepsilon\| \cos \alpha_d$  et  $0 \leq \alpha_d \leq 360^\circ$ .

Les enveloppes de réponse visualisent la réponse prévue du modèle considéré suivant différentes directions de  $\Delta\varepsilon$  ; leur forme et leur taille dépendent de la loi de comportement et des variables d'état.

Dans la pratique, la détermination des enveloppes des relations contrainte – déformation est difficile, car elle nécessite de préparer une série des échantillons identiques de tailles, de formes et de propriétés. Il y a très peu de travaux expérimentaux dédiés à ce chantier. On cite ici les études par Royis et Doanh [157], Doanh [70] qui ont étudié expérimentalement cette relation aux états de contraintes axisymétriques sur le sable d'Hostun. Pour chacun de ces états, ils ont réalisé des chemins rayonnants de contraintes et mesuré l'incrément de déformations.

En effet, les simulations numériques peuvent surmonter ces difficultés expérimentales. Les simulations ne sont pas des substituts pour les expériences du laboratoire, mais un moyen pratique pour étudier les origines des non-linéarités par lequel l'état initial du

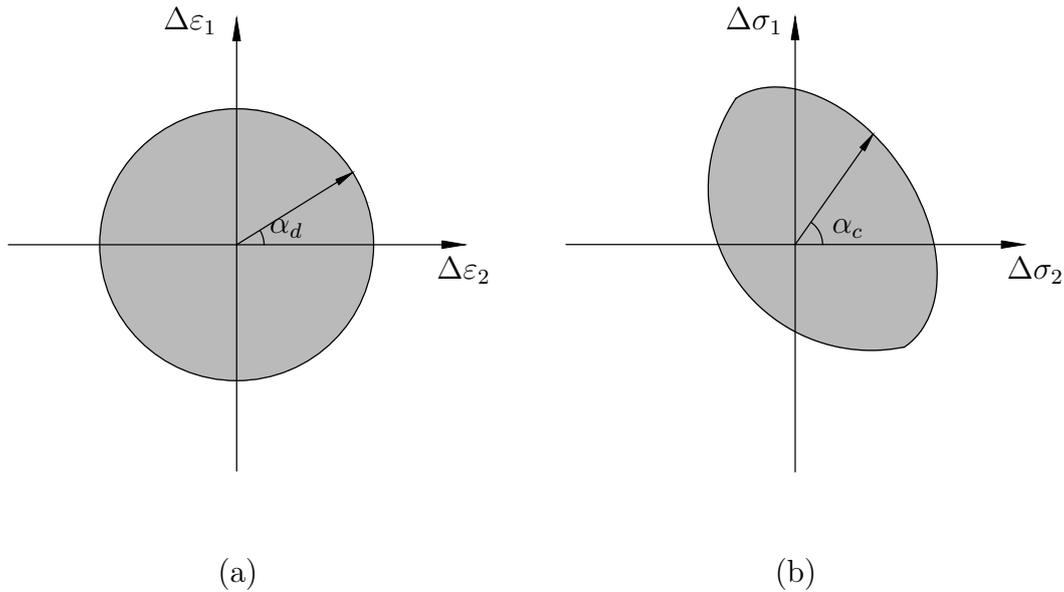


FIGURE 3.1 – Principe de l'enveloppe de réponse : (a) donnée en déformation et (b) sortie en contrainte.

matériau est retrouvé facilement de la mémoire d'ordinateur (Bardet [9]).

Ces dernières années, la méthode des éléments discrets (DEM) a été utilisée pour calculer l'enveloppe de réponse en déformation suite à une application en contrainte. On parle des travaux de Alonso-Marroquin [2], Calvetti *et al.* [28], Sibille *et al.* [161]. En revanche, on se propose d'étudier les incréments de contrainte résultant de déformations de même grandeur, mais de différentes directions.

La figure 3.2 donne la réponse macroscopique d'un VER qui se compose de 400 grains, soumis à un chargement biaxial à vitesse de déformations imposée constante et contrainte latérale constante. On étudiera la réponse incrémentale des points notés en rouges (A, B, C) sur cette figure. Ces trois points correspondent à différents états de contrainte : isotrope, pic et critique. Les contraintes du VER correspondant à ces états sont présentées dans tableau 3.2.

TABLE 3.2 – État de contraintes du VER considéré se composant de 400 grains.

Etat (Point)	Contraintes		
	$\sigma_1/\sigma_0$	$\sigma_2/\sigma_0$	$q/\sigma_0 = (\sigma_1 - \sigma_2)/\sigma_0$
Isotrope (A)	1.0	1.0	0.0
Pic (B)	1.0	3.8	2.8
Critique (C)	1.0	2.0	1.0

La loi de contact utilisée est celle de type 2. Les paramètres microscopiques sont le niveau de raideur  $\kappa = 1000$  ; le rapport entre la raideur normale et la raideur tangentielle  $k_n/k_t = 1$  ; le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu = 0.5$  et le niveau de cohésion

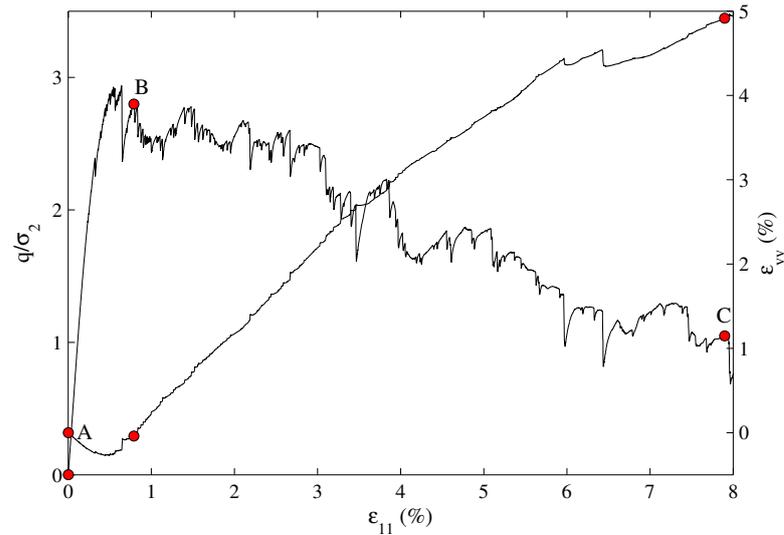


FIGURE 3.2 – Réponse du VER 400. Les points étudiés en rouge : état initial isotrope (A), autour du pic (B), état critique (C).

$p^* = 1$ .

Les figures 3.3, 3.4, 3.5 présentent les enveloppes non-lissées de réponses de l'état isotrope (A), au pic (B) et critique (C) du VER choisi. De différentes valeurs de  $\|\Delta\varepsilon\|$  sont considérées, l'angle  $\alpha_d$  est varié de 0 à  $360^\circ$  afin de pouvoir prendre en compte toutes les directions possibles. Les conventions de signe de la mécanique des sols sont utilisées : ( $\sigma > 0, \varepsilon > 0$ ) en compression et ( $\sigma < 0, \varepsilon > 0$ ) en extension.

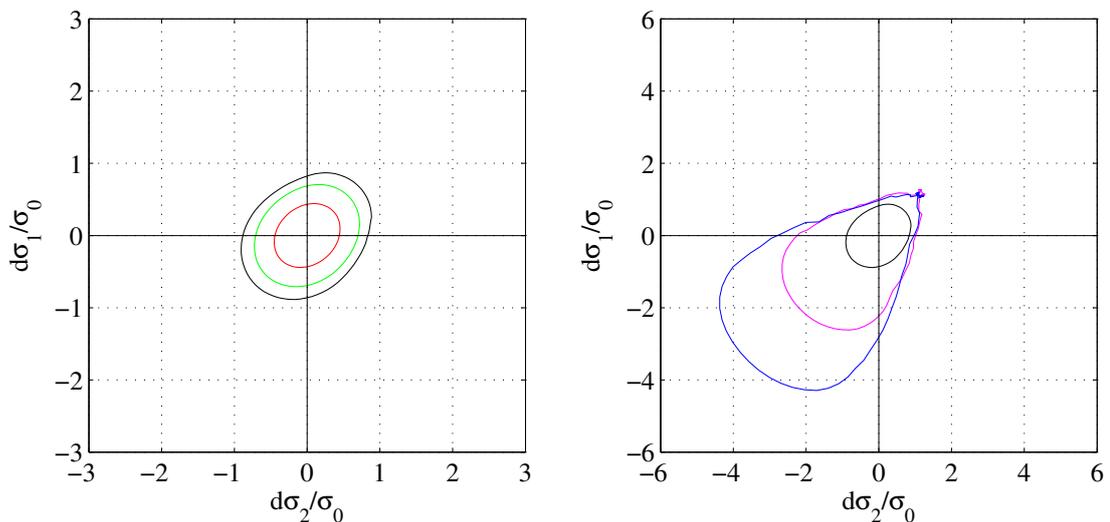


FIGURE 3.3 – Enveloppes de réponses à l'état isotrope (point A) : rouge ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.05\%$ ) ; vert ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.08\%$ ) ; noir ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.1\%$ ) ; rose ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.3\%$ ) ; bleu ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.5\%$ ).

On trouve que, à l'état de contrainte isotrope (point A), avec  $\|\Delta\varepsilon\| = 0.05\%$  et  $\|\Delta\varepsilon\| = 0.08\%$  les enveloppes de réponses sont les ellipses centrées à l'origine du plan de

contraintes, ce qui montrent une relation linéaire (Bardet [9], Gudehus [86]). Tout écart significatif de ce genre de réponse, comme un déplacement des centres des enveloppes de réponses de l'origine, ou une déformée de sa forme, suggère fortement un incrément non-linéaire. Ainsi, sur cette figure 3.3 à droite, à partir de  $\|\Delta\varepsilon\| > 0.1\%$ , la réponse devient non-linéaire.

Au pic (point B) et à l'état critique (point C) les réponses sont toutes non linéaires même avec une petite valeur  $\|\Delta\varepsilon\|$  appliquée. Les enveloppes sont de plus en plus allongées, décentrés et plus plats de l'état de contrainte isotrope (A) à l'état au pic (B) et puis à l'état critique (C) pour une même valeur de  $\|\Delta\varepsilon\|$ . Une forte non-linéarité et irréversibilité du comportement a été observée pour les états de contraintes B et C. Ces résultats montrent que, pour un état de contrainte anisotrope, même pour une petite déformation, la réponse incrémentale est non linéaire, irréversible et cela ne peut pas être négligeable. Les incréments de déformations irréversibles sont conformes à la vitesse de déformations plastique dans la théorie de plasticité classique (la direction d'écoulement). En plus, à partir du pic (point B), on constate une direction de déformation privilégiée (environ de  $30^\circ$  par rapport à l'axe horizontal).

En comparant les réponses pour différents états de contrainte (A : isotrope,  $q = 0$  ; B, C : anisotrope  $q > 0$ ), on constate qu'il y a une réduction de la rigidité élastique venant du changement des propriétés microscopiques. Pour les lois phénoménologiques avec une description continue du milieu, ces effets demandent une dépendance de la rigidité élastique à l'histoire de chargement comme dans la mécanique de l'endommagement (Lemaitre et Chaboche [107]).

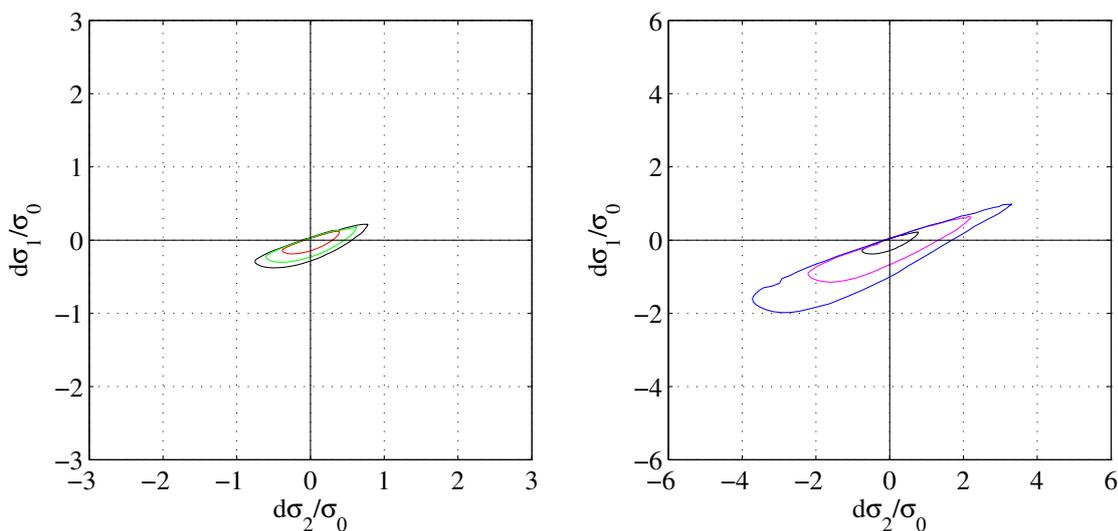


FIGURE 3.4 – Enveloppes de réponses à l'état au pic (point B) : rouge ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.05\%$ ) ; vert ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.08\%$ ) ; noir ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.1\%$ ) ; rose ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.3\%$ ) ; bleu ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.5\%$ ).

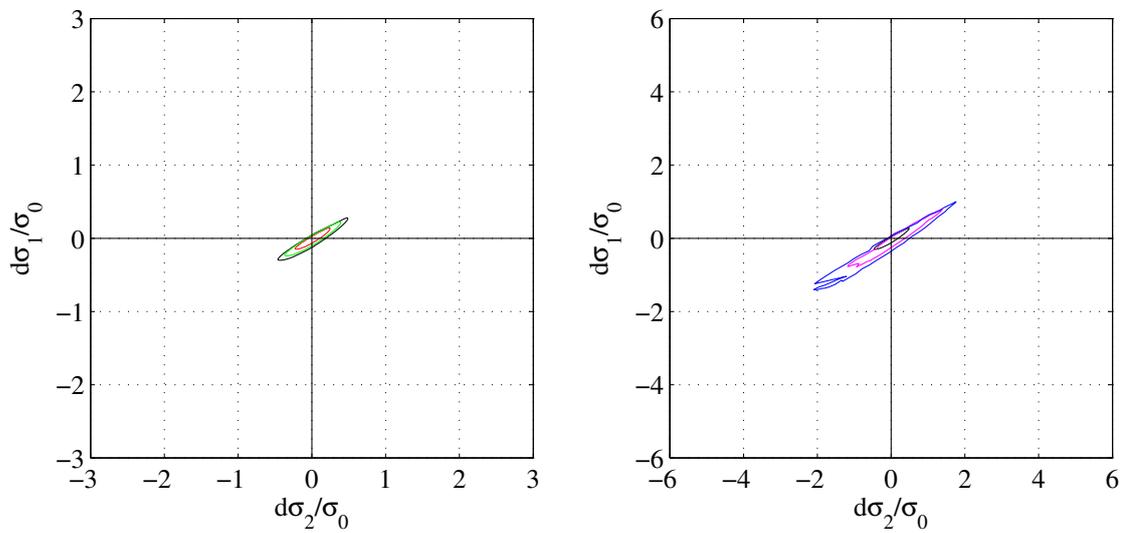


FIGURE 3.5 – Enveloppes de réponses à l'état critique (point C) : rouge ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.05\%$ ); vert ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.08\%$ ); noir ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.1\%$ ); rose ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.3\%$ ); bleu ( $\|\Delta\varepsilon\| = 0.5\%$ ).

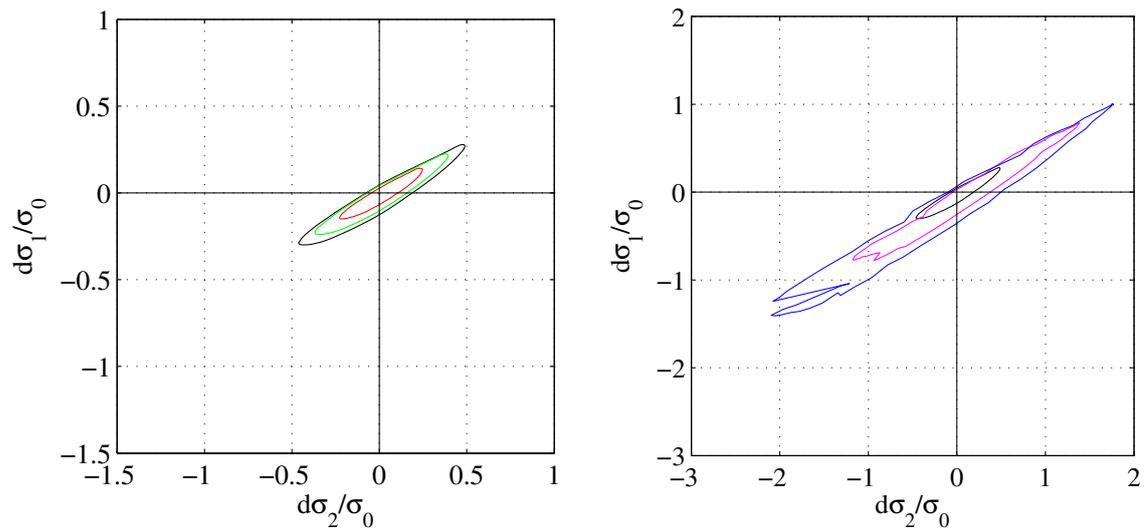


FIGURE 3.6 – Enveloppes de réponses à l'état critique (point C) : zoom sur la figure 3.5.

### 3.2.3 Matrice tangente à la loi

#### 3.2.3.1 Formulation macroscopique

Initiée par les travaux de Hadamard [88], Hill [90], Mandel [111] et Rice [150], qui ont étudié la stabilité élastique, non-élastique et puis plastic du système, une matrice des modules incrémentaux qui relie le taux de déformations et le taux des contraintes Piola-Kirchoff I, est définie par :

$$\dot{P}_{iJ} = L_{ijkl} \cdot \dot{F}_{kl} \quad (3.3)$$

où on appelle  $L_{ijkl}$ , l'opérateur tangent à la loi qui dépend non seulement de la déformation à l'état actuel mais aussi de l'histoire en contrainte et en déformation qui sont caractérisées par les variables d'état (*les coordonnées des grains, les forces de contacts, etc.*)

On présente maintenant la procédure pour la déterminer. Une formulation continue et quasi-statique est considérée à l'échelle macroscopique. La réponse constitutive macroscopique est obtenue grâce au calcul DEM effectué sur un VER. Pour une histoire du gradient de transformation donné  $\mathbf{F}^3$ , la contrainte macroscopique Cauchy  $\boldsymbol{\sigma}$  résulte des forces par une formulation homogénéisée (équation (3.1)).

En terme du tenseur des contraintes Piola-Kirchoff I, le comportement macroscopique exprime cette contrainte en fonction de  $\mathbf{F}$ .

$$\mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T} \quad (3.4)$$

avec  $J = \det(\mathbf{F})$ .

On suppose que, pour un  $\mathbf{F}$  donné à l'instant  $t$ ,  $\mathbf{P}(t)$  est dérivable, noté  $\dot{\mathbf{P}}$ .

$$\dot{\mathbf{P}} = \frac{\mathbf{P}(t + \delta t) - \mathbf{P}(t)}{\delta t} \quad (3.5)$$

À partir de les équations (3.4) et (3.5), nous pouvons écrire :

$$\dot{\mathbf{P}} = \boldsymbol{\Theta}(\dot{\mathbf{F}}) \quad (3.6)$$

En général,  $\boldsymbol{\Theta}$  est non-linéaire. Pour un taux du gradient de transformation donné  $\dot{\mathbf{F}}^0$ , supposons que la fonction  $\boldsymbol{\Theta}$  est différentiable en  $\dot{\mathbf{F}}^0$ , on peut construire donc la matrice tangente à la loi relative à  $\dot{\mathbf{F}}^0$  :

$$\mathbf{L} = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\Theta}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \right|_{\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}^0} \quad (3.7)$$

---

3. On utilise des lettres en gras pour désigner les vecteurs, les tenseurs et les matrices.

Ou bien en notation indicielle :

$$L_{ijkl} = \left. \frac{\partial \Theta_{ij}}{\partial \dot{F}_{kl}} \right|_{\dot{F}_{kl} = \dot{F}_{kl}^0} \quad (3.8)$$

### 3.2.3.2 Procédure numérique

Une procédure linéarisée est adoptée pour résoudre le problème non-linéaire. La fonction constitutive  $\Theta$  et ses dérivées seront calculées numériquement. On présente ici cette démarche numérique.

Pour chaque incrément du temps de  $t$  à  $t + \Delta t$ , l'incrément du gradient de transformation  $\Delta \mathbf{F} = \dot{\mathbf{F}} \Delta t$  est transmis à la microstructure. En utilisant la DEM, on obtiendra la contrainte Cauchy  $\boldsymbol{\sigma}$  et puis la contrainte Piola-Kirchoff I  $\mathbf{P}$ , et aussi la fonction  $\Theta$  correspondante.

$$\dot{\mathbf{P}} = \Theta^d(\dot{\mathbf{F}}) = \frac{\mathbf{P}(t + \Delta t) - \mathbf{P}(t)}{\Delta t} \quad (3.9)$$

L'étape suivante concerne le calcul de la matrice tangente à la loi :  $L_{ijkl}$ . Parce que la dérivée de la relation (3.8) contient la fonction  $\Theta$ , qui est calculée en utilisant l'équation (3.9), la matrice tangente à la loi va donc être calculée numériquement par perturbation numérique :

$$L_{ijkl} \cdot \Delta_{kl} = \frac{\Theta_{ij}^d(\dot{F}_{kl} + \varepsilon \Delta_{kl}^{mn}) - \Theta_{ij}^d(\dot{F}_{kl})}{\varepsilon} \quad (3.10)$$

Dans cette équation,  $\varepsilon \cdot \Delta_{kl}^{mn}$  est la perturbation de  $\dot{F}_{kl}$  avec  $\varepsilon$  une petite valeur d'intensité de perturbation, et  $\Delta_{kl}^{mn}$  un tenseur d'ordre 2 dont les composantes sont définies par :

$$\Delta_{kl}^{mn} = \delta_{mk} \cdot \delta_{nl} \quad (3.11)$$

avec symbole de Kronecker  $\delta_{mk} = \begin{cases} 1 & \text{si } m = k \\ 0 & \text{si } m \neq k \end{cases}$ . En 2D :  $k, l, m, n = 1, 2$ .

Cette procédure numérique est schématisée sur la figure 3.7 qui consiste à effectuer deux étapes des calculs numériques : un chargement  $\alpha$  en appliquant  $\alpha \cdot \Delta \mathbf{F}$  et des chargements perturbés par  $\alpha \cdot \Delta \mathbf{F} + \varepsilon$  avec  $\Delta \mathbf{F}$  qui est l'incrément du gradient de déplacement du pas considéré.

La définition de la matrice tangente à la loi nous ramène à :

$$\Theta(\dot{\mathbf{F}} + \varepsilon \boldsymbol{\Delta}) - \Theta(\dot{\mathbf{F}}) = \varepsilon \cdot \mathbf{L} : \boldsymbol{\Delta} \quad (3.12)$$

Donc en notation indicielle :

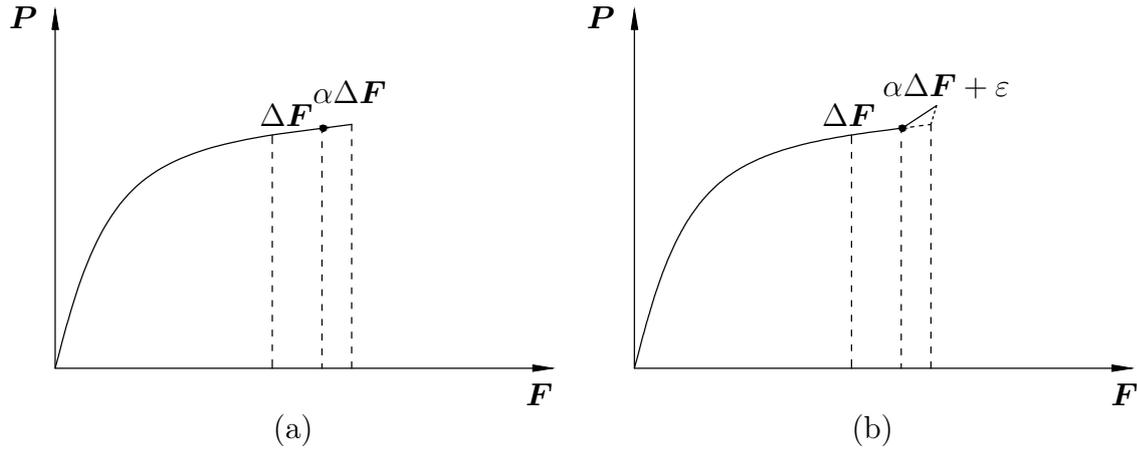


FIGURE 3.7 – Représentation du schéma numérique du calcul de la matrice tangente à la loi : (a) chargement  $\alpha$ ; (b) chargements perturbés.

$$\Theta_{ij}(\dot{F}_{kl} + \varepsilon \Delta_{kl}^{mn}) - \Theta_{ij}(\dot{F}_{kl}) = \varepsilon \cdot L_{ijkl} \cdot \Delta_{kl} \quad (3.13)$$

Pour le cas en 2D, en écrivant les tenseurs sous forme vecteur de colonne, nous avons :  $\Delta^a \cdot \Delta^b = \delta_{ab}$ . On peut tirer alors :

$$\sum_{a=1}^4 \Delta^a \otimes \Delta^a = \mathbf{I} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \sum_{a=1}^4 \Delta^a \otimes \Delta^a = \sum_{a=1}^4 \mathbf{L} \cdot (\Delta^a \otimes \Delta^a) \quad (3.15)$$

$$\mathbf{L} = \sum_{a=1}^4 (\mathbf{L} \otimes \Delta^a) \otimes \Delta^a = \sum_{a=1}^4 \frac{\delta \dot{\mathbf{P}}^a}{\varepsilon} \otimes \Delta^a \quad (3.16)$$

où  $\mathbf{L} \otimes \Delta^a$  désigne l'image de  $\Delta^a$  par l'application linéaire  $\mathbf{L}$  et  $\dot{\mathbf{P}}^a$  est l'incrément du taux de contrainte PK1 due à la perturbation  $\varepsilon \cdot \Delta^a$ .

Nous définissons donc les vecteurs de colonne  $\Delta^1, \Delta^2, \Delta^3$  et  $\Delta^4$  indépendants (condition nécessaire) et orthonormés (condition suffisante). Nous pouvons calculer  $\delta \dot{\mathbf{P}}^a / \varepsilon$  due à l'application de  $\varepsilon \cdot \Delta^a$ , avec  $a = 1, 2, 3, 4$  en 2D.

Le problème devient :

$$\text{Déterminer } \mathbf{L} \text{ tel que : } \forall a = 1, 2, 3, 4 \quad \delta \dot{\mathbf{P}}^a = \mathbf{L} \cdot \Delta^a \quad (3.17)$$

4.  $\mathbf{L} \otimes \Delta^a$  désigne l'image de  $\Delta^a$  par l'application linéaire  $\mathbf{L}$ .

### 3.2.4 Tenseur acoustique

Le critère de bifurcation (Rice [150]) détermine la naissance d'une bande de cisaillement, correspondant à l'annulation du déterminant du tenseur acoustique :

$$\det(\mathbf{nLn}) = 0 \quad (3.18)$$

avec  $\mathbf{n}$  étant la normale de la bande.

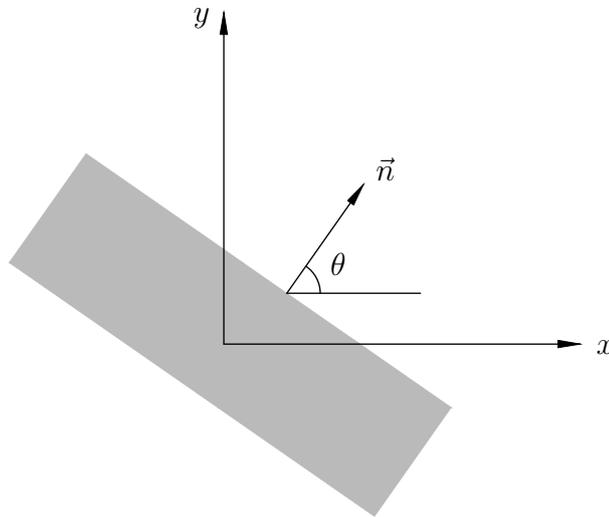


FIGURE 3.8 – L'orientation de la bande : définition de l'angle d'orientation  $\theta$ .

L'équation du tenseur acoustique  $\det(\mathbf{nLn})$  peut être développée analytiquement. Ces calculs analytiques sont présentés dans l'annexe A, on ne donne ici que le résultat final. Avec  $\theta$  qui est l'orientation de la bande (voir la figure 3.8), le tenseur acoustique s'écrit sous forme :

$$\det(\mathbf{nLn}) = A_0 + A_1 \cdot \tan(\theta) + A_2 \cdot \tan^2(\theta) + A_3 \cdot \tan^3(\theta) + A_4 \cdot \tan^4(\theta) \quad (3.19)$$

Dans cette équation,  $A_0, A_1, A_2, A_3, A_4$  sont des paramètres liés à la loi de comportement, et ils sont donnés explicitement grâce aux composantes de la matrice tangente à la loi  $L_{ijkl}$ . En 2D,  $i, j, k, l = 1, 2$  ce qui ramène à :

$$\begin{aligned}
A_0 &= L_{1111} \cdot L_{1221} - L_{1121} \cdot L_{1211} \\
A_1 &= [L_{1111} \cdot (L_{1222} + L_{2221}) + (L_{1112} + L_{2111}) \cdot L_{1221}] - \\
&\quad [L_{1121} \cdot (L_{1212} + L_{2211}) + (L_{1122} + L_{2121}) \cdot L_{1211}] \\
A_2 &= [L_{1111} \cdot L_{2222} + (L_{1112} + L_{2111}) \cdot (L_{1222} + L_{2221}) + L_{2112} \cdot L_{1221}] - \\
&\quad [L_{1121} \cdot L_{2212} + (L_{1122} + L_{2121}) \cdot (L_{1212} + L_{2211}) + L_{2122} \cdot L_{1211}] \\
A_3 &= [L_{2222} \cdot (L_{1112} + L_{2111}) + (L_{1222} + L_{2221}) \cdot L_{2112}] - \\
&\quad [L_{2212} \cdot (L_{1122} + L_{2121}) + (L_{1212} + L_{2211}) \cdot L_{2122}] \\
A_4 &= L_{2112} \cdot L_{2222} - L_{2122} \cdot L_{2212}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

### 3.2.5 Analyse de la formation de bande de cisaillement

Du point de vue théorique, l'apparition de la localisation peut être prévue par un critère basé uniquement sur la loi de comportement du matériau (section 1.1.2.2). Ce critère donne l'orientation critique ainsi que l'état de contraintes et de déformations pour une histoire de chargement donnée.

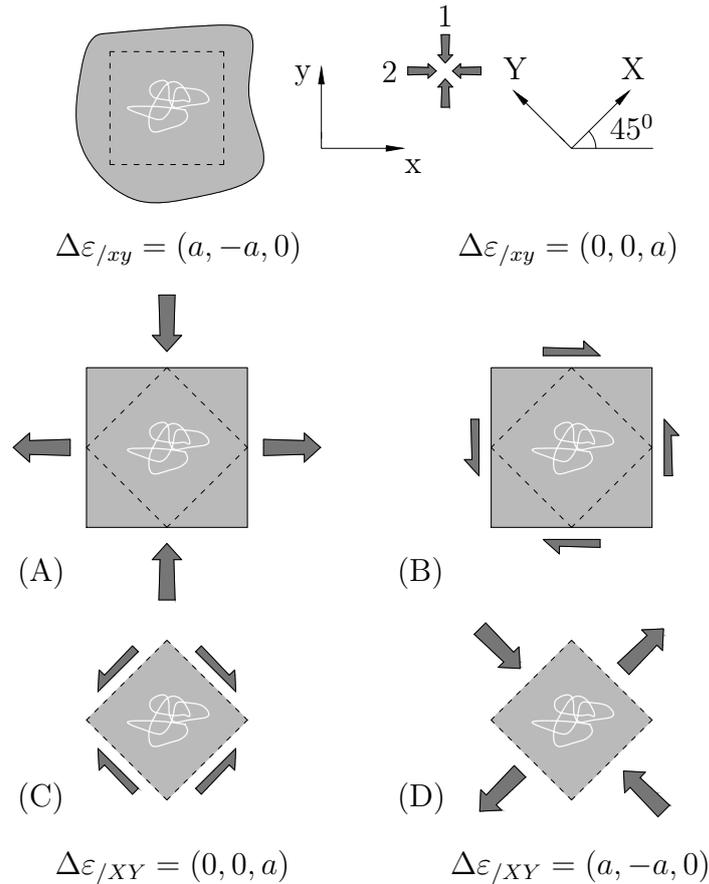


FIGURE 3.9 – Deux différents modes de cisaillement d'après Desrues et Chambon [65].

Desrues et Chambon [65] distinguent deux modes de cisaillement comme indiqué sur la figure 3.9. Ils considèrent un volume élémentaire du matériau (le carré pointillé en

haut, à gauche de la figure) soumis à un état de contrainte  $\sigma$ . Deux types d'incrément de déformations sont définis sous forme  $\Delta\varepsilon = (\Delta\varepsilon_{xx}, \Delta\varepsilon_{yy}, \Delta\varepsilon_{xy})$ , dont explicitement :  $\Delta\varepsilon = (a, -a, 0)$  (à gauche) et  $\Delta\varepsilon = (0, 0, a)$  (à droite), où  $a$  est un scalaire. Le premier incrément de déformations est purement déviatorique, avec ses directions principales coïncidant avec les axes  $xy$  alors que le second est purement déviatorique aussi mais ses directions principales coïncident avec les axes  $XY$ . Il y a une rotation d'axes de  $45^\circ$  entre  $xy$  et  $XY$ . La troisième ligne dans la figure illustre le fait que, si une partie carrée plus petite du corps est considérée, avec ses bords parallèles à  $XY$ , les incréments de déformations écrits dans les axes  $XY$  sont simplement échangés par rapport à ceux dans la deuxième ligne.

Les incréments de déformations (A) et (C) dans la colonne à gauche sont deux expressions d'un même incrément de déformations. Ils sont appelés le mode de cisaillement *en-axes* (A) et (C), en référence à l'axe de contrainte principale ; et le mode de cisaillement *hors-axes* pour (B) et (D).

Les incréments de déformations pour les cas (A,C) et (B,D) ont les mêmes invariants, seules les directions principales sont différentes. Si le matériau se comporte d'une manière isotrope, toutes les directions dans le plan sont équivalentes et les deux différents incréments de déformations donnent une même réponse en contrainte, sauf rotation des axes. Au contraire, si le matériau est anisotrope, les réponses *en-axes* et *hors-axes* modes seront différentes, non seulement en terme de rotation des axes.

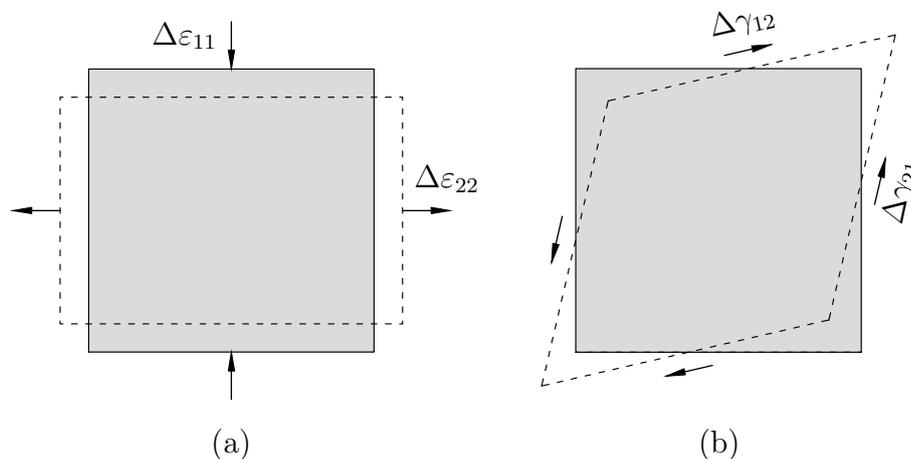


FIGURE 3.10 – Analyse (a) *en-axes* et (b) *hors-axes*.

Dans le paragraphe suivant, la formation des bandes de cisaillement dans ces deux modes de cisaillement sera analysée en étudiant un volume élémentaire soumis à un incrément de déformations  $\Delta\varepsilon$  en utilisant la théorie de bifurcation combinée avec la loi de comportement DEM (cf. section 3.2).

Un VER se composant 400 grains circulaires à l'état de contrainte isotrope est considéré. En appliquant un incrément de déformations  $\Delta\varepsilon$  à l'assemblage granulaire, la

contrainte  $\sigma$  est déterminée par un outil numérique décrite dans la section 3.2.1.3. Différentes perturbations sont ensuite considérées afin de calculer la matrice tangente à la loi. Enfin, le tenseur acoustique correspondant à la loi numérique DEM est évalué et analysé.

Les caractéristiques du VER considéré et les paramètres de la loi de contact sont donnés dans les tableaux 3.3 et 3.4.

TABLE 3.3 – Analyse en bande de cisaillement : Caractéristiques du VER.

		Nombre		Indice
de grains	de contacts	de contacts collés	de coordination	des vides
(npa)	(ncont)	(ncontc)	(z)	(e)
400	843	843	4.2	0,189

On constate que le VER utilisé est initialement très dense ( $e = 0.189$ ) et le nombre de coordination très élevé ( $z = 4.2$ )

TABLE 3.4 – Analyse en bande de cisaillement : Paramètres microscopiques de type 2.

		Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (\sigma_0 \cdot \bar{a})$		Niveau de raideur	1000
$k_n / k_t$		Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$		Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$		Niveau de cohésion	1

### 3.2.5.1 Mode de cisaillement en-axes

La simulation consiste d'imposer un incrément de déformations  $\Delta\varepsilon_{11} = 0.01\%$ ,  $\Delta\varepsilon_{22} = -0.01\%$  et les autres composantes  $\Delta\varepsilon_{ij} = 0$ . Le volume élémentaire est ainsi soumis à une compression isochore (voir la figure 3.10.a).

La matrice tangente à la loi est calculée suivant la procédure numérique décrite dans la section 3.2.3.2. Les simulations sont effectuées avec différentes combinaisons de  $(\alpha, \varepsilon)$ , respectivement  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  et  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$ . Des comparaisons entre les composantes  $L_{ijkl}$  sont données sur la figure 3.11. Les résultats de  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$  (courbe  $\circ$ ) sont différents par rapport aux autres, notamment sur les graphiques (a)  $L_{11kl}$  et (d)  $L_{22kl}$  à cause de l'élasticité au contact lorsque le VER est soumis à un chargement très faible. Dans ce cas, aucun glissement n'a été observé aux contacts. D'autre part, les résultats avec  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  et  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$  sont cohérents entre eux. On choisit donc la matrice tangente à la loi issue du calcul avec  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  pour l'analyse suivante. Ses composantes sont rappelées sur la figure 3.12.

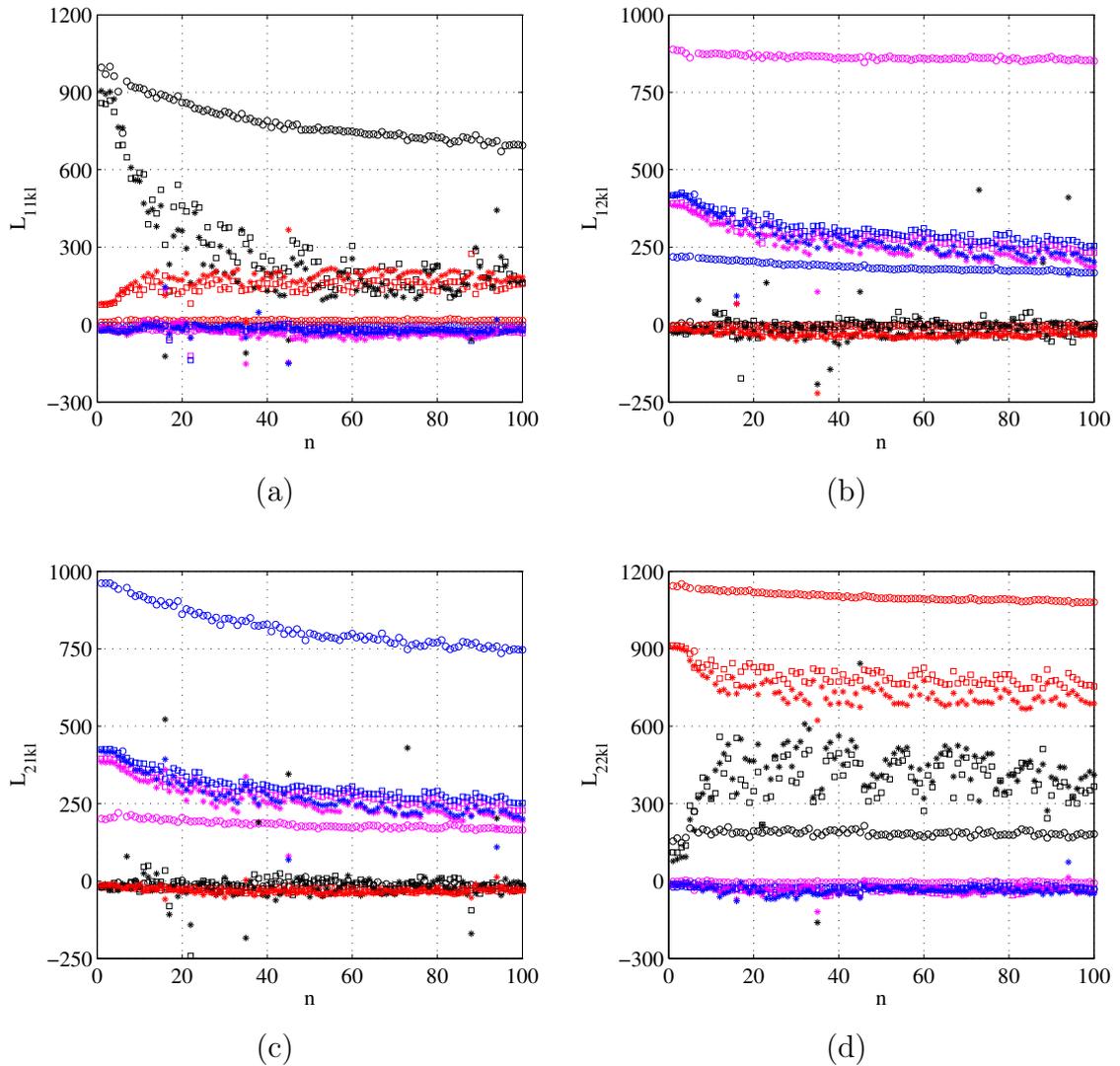


FIGURE 3.11 – Analyse *en-axes*. Comparaison des composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec différentes valeurs de  $(\alpha, \varepsilon)$ . Légende :  $\circ$  –  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $\square$  –  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $*$  –  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ; en couleurs : noir  $kl = 11$ , rose  $kl = 12$ , bleu  $kl = 21$ , rouge  $kl = 22$ .

Notons qu'il existe des moments où les grands modules de la matrice tangente à la loi ont été observés. Cela correspond à la nature du modèle DEM prise en compte. Les sauts de contraintes induisent les sauts de ces modules. On les appelle les "modules perturbés" et ils ne seront pas tenus en compte dans l'analyse du tenseur acoustique.

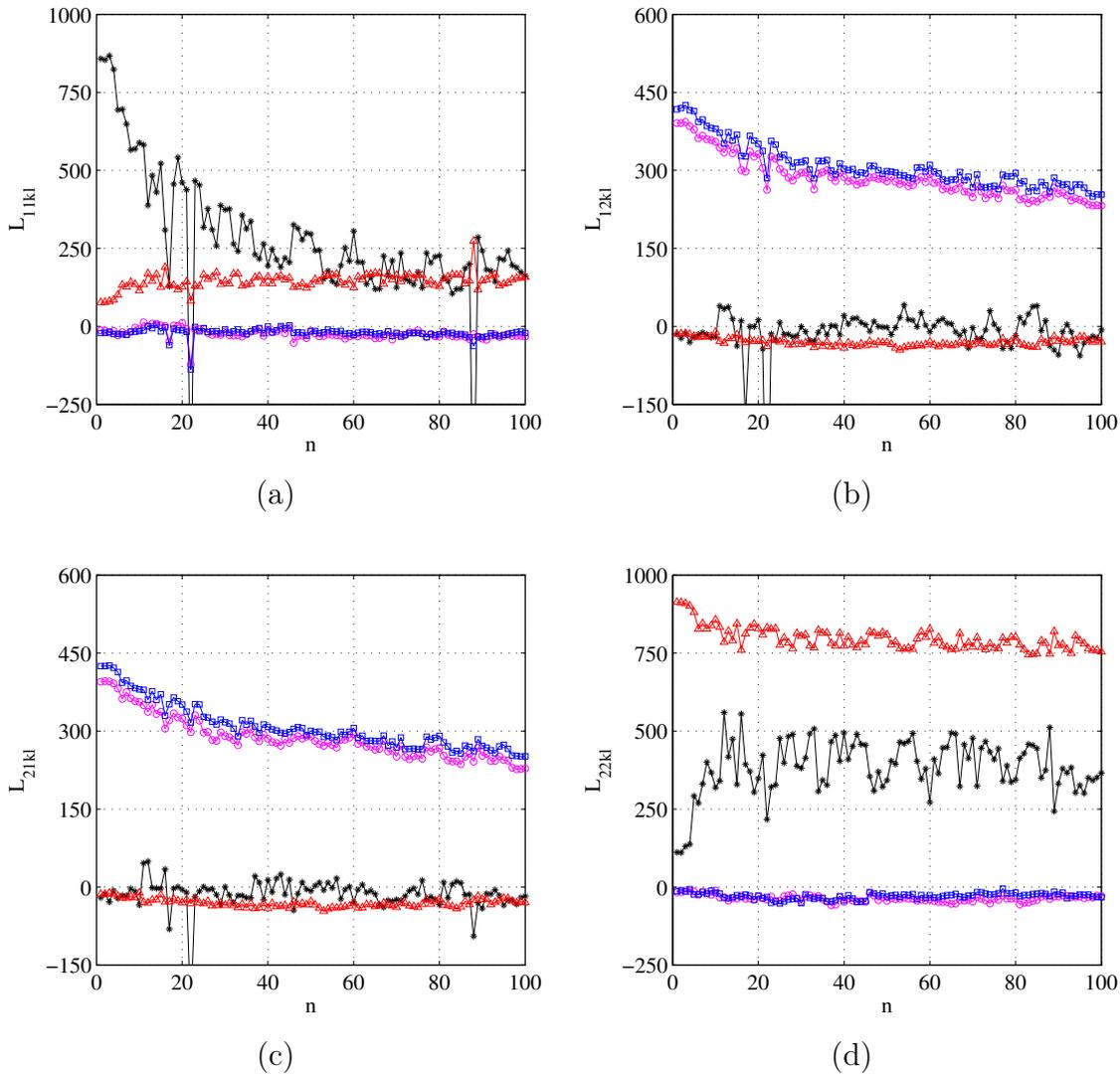


FIGURE 3.12 – Analyse *en-axes*. Composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec ( $\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha$ ). Légende : noir  $kl = 11$ , rose  $kl = 12$ , bleu  $kl = 21$ , rouge  $kl = 22$ .

La figure 3.13.(a, b) donne les évolutions de la déformation (donnée), de la contrainte (sortie) du premier mode d'analyse (*en-axes*). La contrainte  $\sigma_{11}$  augmente progressivement alors que la contrainte  $\sigma_{22}$  d'abord diminue et puis remonte vers la contrainte initiale après une valeur minimale de  $\varepsilon_{11} = 0.2\%$ . En ce qui concerne les composantes de cisaillement, la déformation cisaillement  $\varepsilon_{12} = 0$  reste nulle tandis que la contrainte de cisaillement  $\sigma_{12}$  reste constante pendant le calcul et vaut presque zéro.

La localisation est détectée à une déformation cumulée  $\varepsilon_{11} = 0.65\%$ , (point rouge

sur la figure 3.13.d). Les intervalles correspondants en terme de l'angle d'orientation  $\theta$  sont  $[-35^\circ, -33^\circ]$  et  $[29^\circ, 37^\circ]$  (figure 3.13.c), centrés respectivement sur les valeurs  $-34^\circ$  et  $+34^\circ$ . En fait, on ne peut pas obtenir absolument une valeur nulle pour le tenseur acoustique, mais une valeur proche à zéro est trouvée. Sur cette figure, la courbe de tendance en rouge montre une première valeur nulle du tenseur acoustique à  $\varepsilon_{11} = 0.75\%$ .

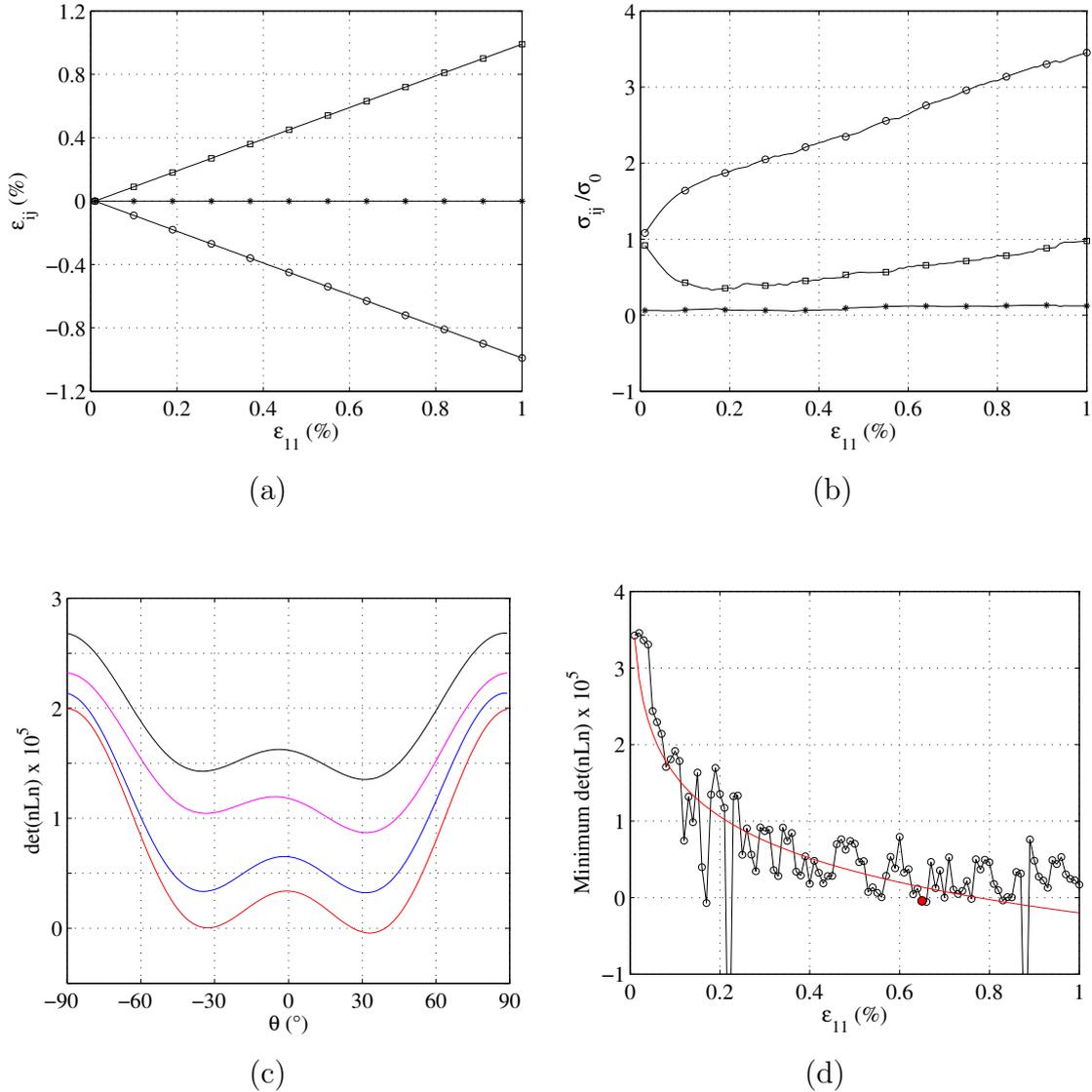


FIGURE 3.13 – Analyse *en-axes*. Analyse du tenseur acoustique : (a) déformation  $\varepsilon_{ij}$  -  $\circ$   $\varepsilon_{11}$ ,  $\square$   $\varepsilon_{22}$ ,  $*$   $\varepsilon_{12}$ ; (b) contrainte  $\sigma_{ij}$  -  $\circ$   $\sigma_{11}$ ,  $\square$   $\sigma_{22}$ ,  $*$   $\sigma_{12}$ ; (c) tenseur acoustique  $\det(nLn)$  à différentes  $\varepsilon_{11}$  - noir ( $\varepsilon_{11} = 0.2\%$ ), rose ( $\varepsilon_{11} = 0.3\%$ ), bleu ( $\varepsilon_{11} = 0.42\%$ ), rouge ( $\varepsilon_{11} = 0.65\%$ ); (d) valeur minimale du tenseur acoustique  $\det(nLn)_{min}$  et la courbe de tendance logarithmique en rouge.

### 3.2.5.2 Mode de cisailment hors-axes

Dans ce cas, le VER est soumis à un chargement dont l'incrément de déformations  $\Delta\gamma_{12} = \Delta\gamma_{21} = 2\Delta\varepsilon_{12} = 0.02\%$ , les autres composantes du tenseur de l'incrément de déformations valent  $\Delta\varepsilon_{ij} = 0$ .

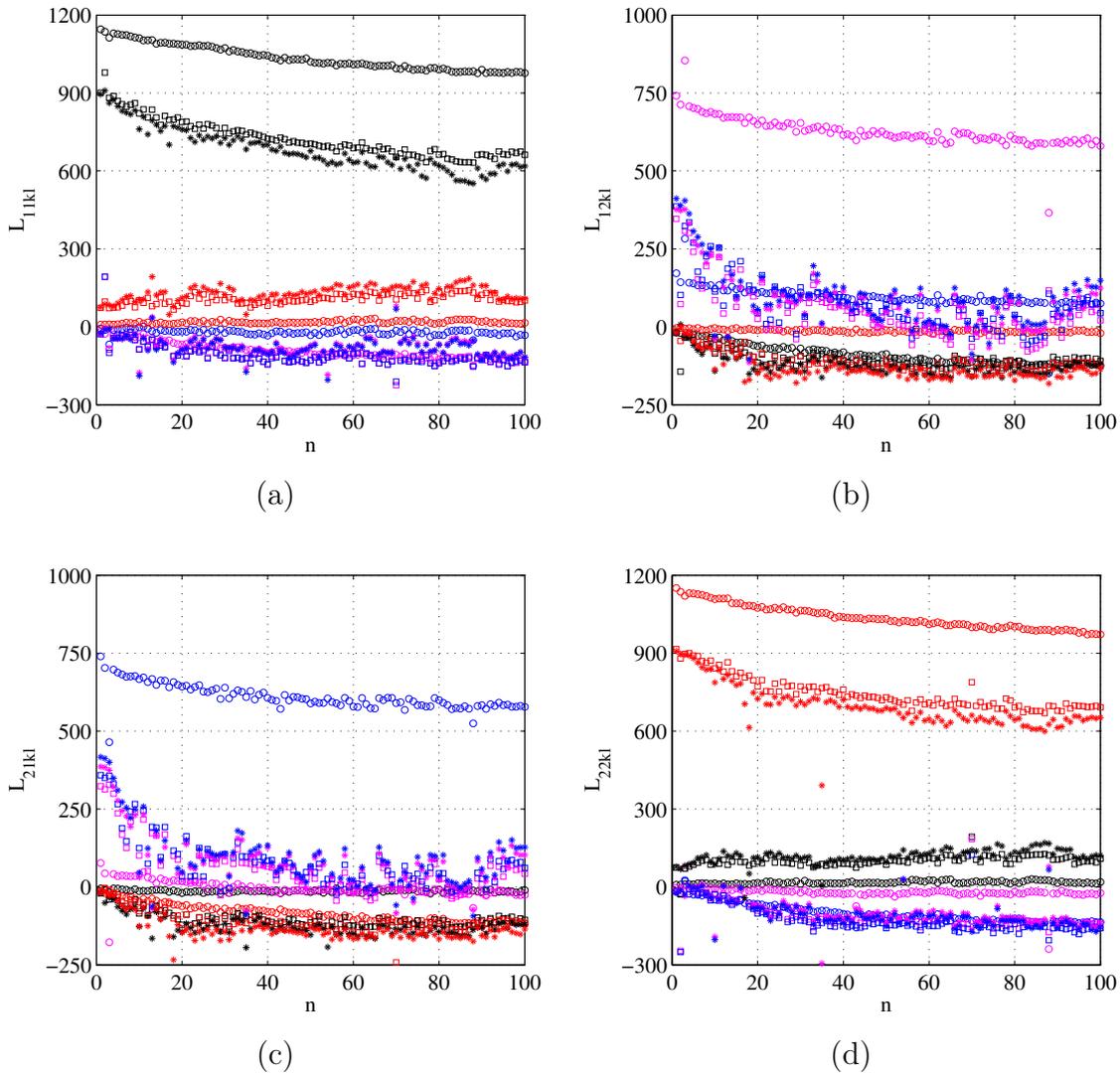


FIGURE 3.14 – Analyse *hors-axes*. Comparaison des composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec différentes valeurs de  $(\alpha, \varepsilon)$ . Légende :  $\circ$  -  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $\square$  -  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $*$  -  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ; en couleurs : noir  $kl = 11$ , rose  $kl = 12$ , bleu  $kl = 21$ , rouge  $kl = 22$ .

Comme dans le cas précédent, la matrice tangente à la loi est calculée avec différentes combinaisons de  $(\alpha, \varepsilon)$ , respectivement  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$ ,  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  et  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$  et leurs résultats sont montrés sur la figure 3.14. À nouveau, les résultats de  $(\alpha = 0.01, \varepsilon = 0.1\alpha)$  (courbe  $\circ$ ) sont différents par rapport les autres, notamment sur les graphiques (a)  $L_{11kl}$  et (d)  $L_{22kl}$ . En plus, les résultats avec  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  et  $(\alpha = 0.2, \varepsilon = 0.1\alpha)$  sont cohérents entre eux. La matrice tangente à la loi issue du calcul

avec  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$  est choisie pour l'analyse du tenseur acoustique qui montre la formation d'une bande de cisaillement. Ses composantes sont rappelées sur la figure 3.15.

Les grands modules apparaissent plus fréquents que dans le cas précédent, *i.e. en-axes analyse*. À nouveau, ces modules ne sont pas pris en compte dans l'analyse du tenseur acoustique.

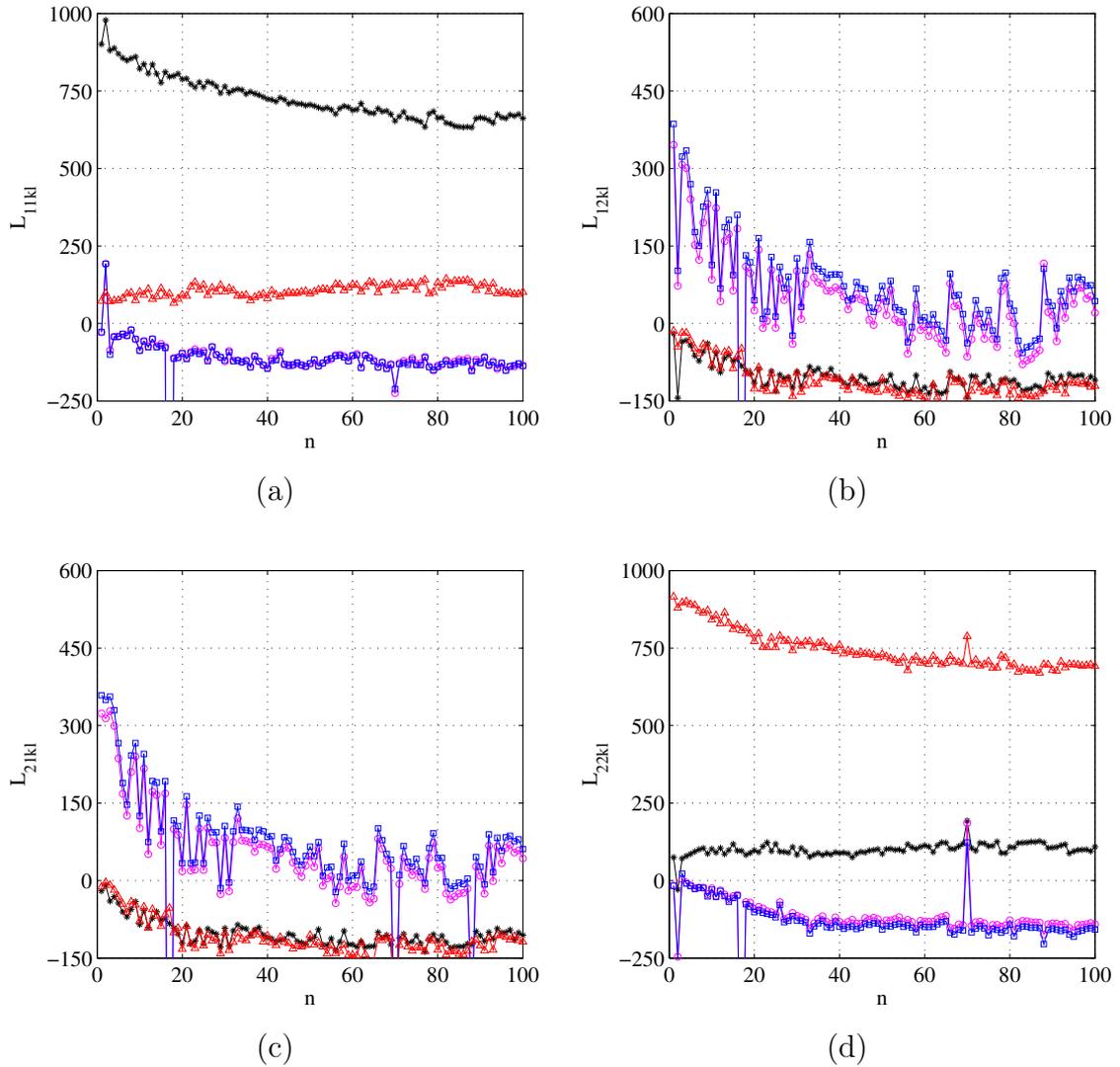


FIGURE 3.15 – Analyse *hors-axes*. Composantes de la matrice tangente à la loi calculées avec  $(\alpha = 0.1, \varepsilon = 0.1\alpha)$ . Légende : noir  $kl = 11$ , rose  $kl = 12$ , bleu  $kl = 21$ , rouge  $kl = 22$ .

En terme de la matrice tangente à la loi, les modules pour le cas *en-axes* et *hors-axes* sont les mêmes au début du calcul car on est parti à partir d'un état de contraintes isotrope. Après les premiers incréments, la distribution des contacts et de leurs orientations dans le VER évolue, une anisotropie du comportement se développe, ce qui donne une évolution différente des modules entre ces deux cas. Cette observation est en accord avec

les propositions de Desrues et Chambon [65].

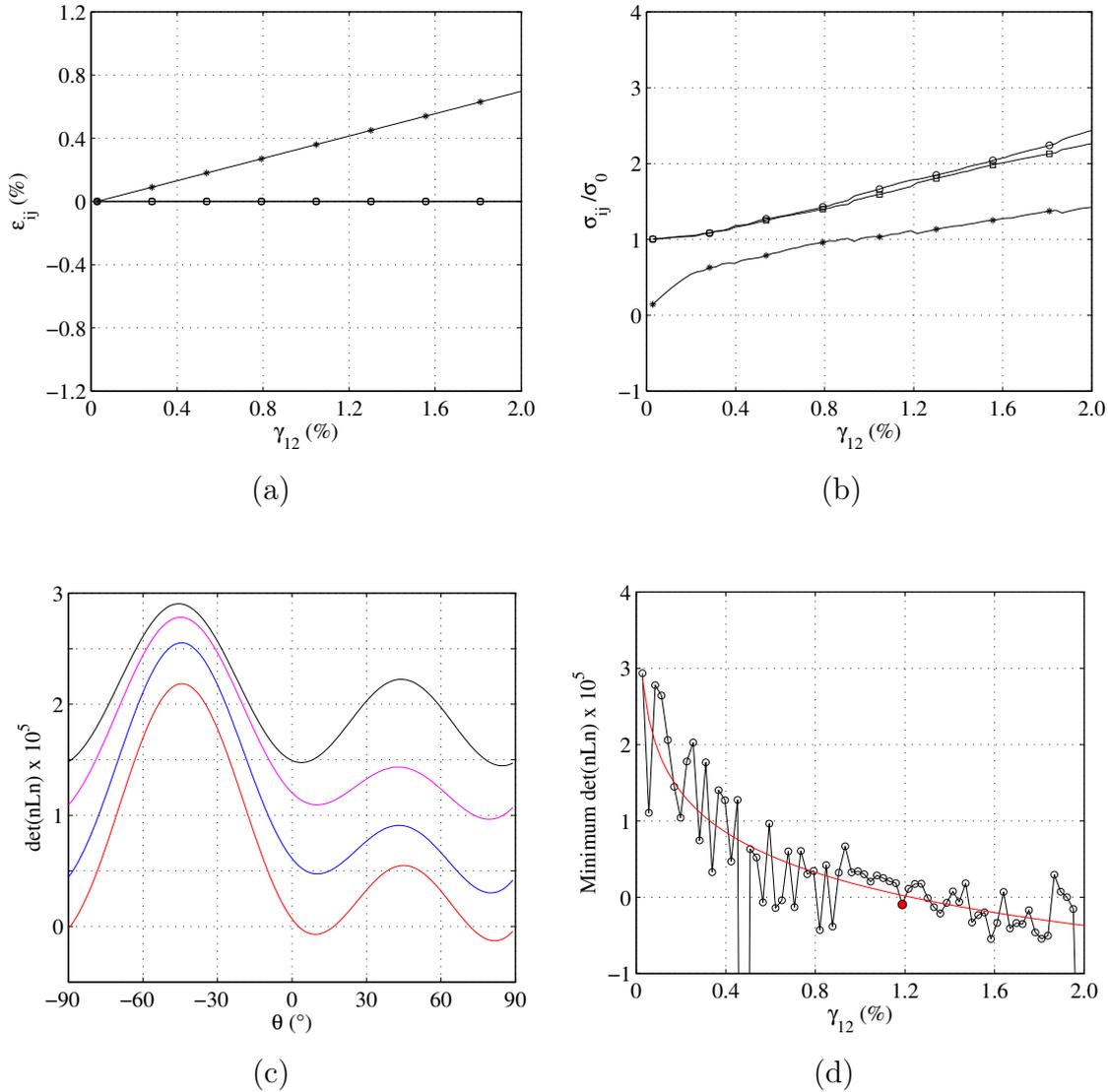


FIGURE 3.16 – Analyse *hors-axes*. Analyse du tenseur acoustique : (a) déformation  $\varepsilon_{ij}$  -  $\circ \varepsilon_{11}$ ,  $\square \varepsilon_{22}$ ,  $* \varepsilon_{12}$ ; (b) contrainte  $\sigma_{ij}$  -  $\circ \sigma_{11}$ ,  $\square \sigma_{22}$ ,  $* \sigma_{12}$ ; (c) tenseur acoustique  $\det(nLn)$  à différentes  $\gamma_{12}$  - noir ( $\gamma_{12} = 0.17\%$ ), rose ( $\gamma_{12} = 0.59\%$ ), bleu ( $\gamma_{12} = 1.02\%$ ), rouge ( $\gamma_{12} = 1.19\%$ ); (d) valeur minimale du tenseur acoustique  $\det(nLn)_{min}$  et la courbe de tendance logarithmique en rouge.

Le matériau modélisé et les conditions initiales sont les mêmes avec l'exemple précédent. Les bandes de cisaillement sont désormais orientées à  $[3^0, 17^0]$  et  $[70^0, 90^0]$ , soit  $10^0$  et  $80^0$  lors d'une déformation de cisaillement cumulée  $\gamma_{12} = 1.19\%$  correspondant au point rouge sur la figure 3.16.d. La forme de la courbe de tendance dans ce cas est très similaire par rapport à celle dans l'analyse *en-axes* et elle donne une valeur zéro à  $\gamma_{12} = 1.25\%$ . En plus, on constate qu'il existe une rotation environ de  $[44^0, 46^0]$  (presque de  $45^0$ ) entre les orientations prévues dans le cas *en-axes* ( $-34^0$  et  $34^0$ ) et ceux dans le

cas *hors-axes* ( $10^0$  et  $80^0$ ). Desrues et Chambon [65] ont prévu une rotation des axes de  $45^0$ ; une petite différence entre les résultats avec la "loi DEM" vient du fait de l'utilisation d'un modèle numérique tel que celui de type DEM, et notamment du nombre de grains très limité (400 grains) dans le VER étudié.

### 3.3 Formulation macroscopique

#### 3.3.1 Loi de comportement macroscopique

En raison en particulier du frottement intergranulaire, le comportement d'un milieu granulaire est non élastique et rentre dans le cadre général des lois pour lesquelles les contraintes à un instant ne dépendent pas que de la valeur des déformations à cet instant, mais de l'histoire des déformations jusqu'à cet instant.

Les problèmes de mécanique impliquant des solides à comportement dépendant du chemin de déformations sont par conséquent des problèmes d'évolution. Cette évolution est souvent suffisamment lente pour que les effets inertiels puissent être négligés et les problèmes considérés sont quasi statiques. Le traitement numérique des problèmes d'évolution quasi-statique est basé en général sur une méthode pas à pas de discrétisation du temps.

Les équations d'équilibre sont écrites à chaque pas de temps et la loi de comportement du milieu est "intégrée", à l'aide une méthode adaptée à la loi, de façon à construire une loi "intégrée" qui est une relation donnant la contrainte en fin de pas en fonction de la déformation en fin de pas.

Le problème au pas de temps  $n$  est un problème d'équilibre du milieu dont la loi de comportement est la loi "intégrée"  $\varepsilon_n \rightarrow \sigma_n$ . Ce problème est de même nature mathématique qu'un problème d'élasticité bien que le comportement du milieu ne soit pas élastique.

Dans le cadre de la modélisation FEM  $\times$  DEM, la loi de comportement du milieu granulaire est obtenue par une simulation DEM du mouvement des grains d'un VER sollicités par une histoire de déformations macroscopique. La loi "intégrée" sur un pas de temps est obtenue par simulation DEM du mouvement des grains du VER pour un chemin de déformation macroscopique complètement déterminé par la déformation macroscopique en fin du pas.

On considère une formulation continue à l'échelle macroscopique (l'échelle du problème aux limites). La réponse constitutive à cette échelle est obtenue grâce au calcul par DEM dans chaque VER associé en chaque point de Gauss considéré. En ce point, un gradient du déplacement  $h_{kl} = \partial u_k / \partial x_l$  est appliqué à ce niveau donnant la contrainte macroscopique Cauchy  $\sigma_{ij}$ . La technique d'homogénéisation consiste à utiliser le modèle DEM à chaque point d'intégration de Gauss pour dériver numériquement la réponse constitutive. Le principe de cette technique est illustré sur la figure 3.17.

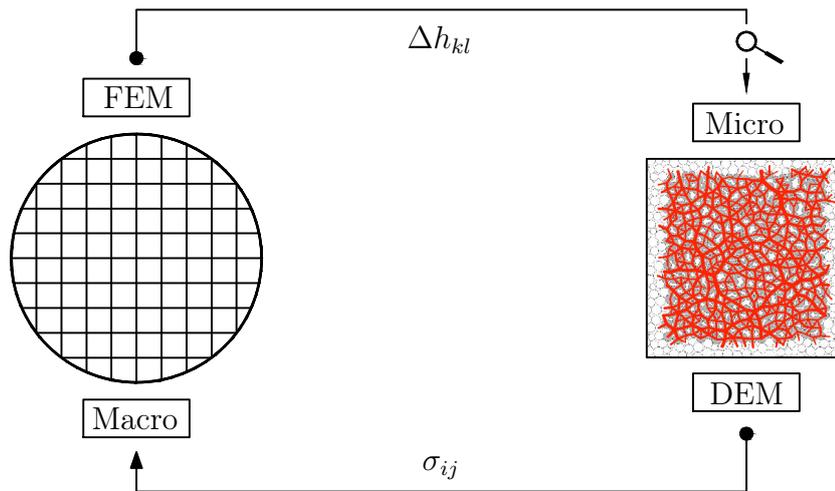


FIGURE 3.17 – Schéma du calcul d'homogénéisation.

Suites aux commentaires discutés plus haut, la loi constitutive peut s'écrire sous forme d'un problème d'évolution dépendant de l'histoire du gradient de déplacement :

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \Gamma^t \{ \mathbf{h}(\tau), \tau \in (0, t) \} \quad (3.21)$$

### 3.3.2 Intégration numérique de la loi de comportement DEM

L'intégration des lois de comportement joue un rôle très important dans un code de calcul par éléments finis. Pour chaque élément, en chaque point de Gauss, cette intégration a pour but de calculer, à partir de l'estimation des déplacements à chaque itération, le tenseur des contraintes qui vérifient la loi de comportement et les variables internes spécifiques à chaque comportement. En effet, le choix du type d'intégration locale détermine la précision des résultats. Lorsque les estimations dépendent de l'histoire du chargement, les erreurs sur ces estimations peuvent se propager d'un incrément à l'autre ce qui donne des résultats de plus en plus divergents de la solution cherchée.

On trouve dans la littérature qu'il existe plusieurs méthodes pour l'intégration de la loi constitutive dont celle d'Euler explicite, Runge-Kutta explicite, Runge-Kutta ou Euler implicite. Les méthodes explicites consistent à déterminer les variables du pas suivant à partir des connaissances du pas actuel alors que les méthodes implicites résolvent un système d'équations qui implique les variables non seulement du pas suivant, mais aussi du pas actuel. Il est montré dans Caillerie [24] que l'intégration explicite des équations différentielles pose des problèmes de stabilité et qu'il est souvent préférable d'utiliser une intégration implicite. Pour plus de détails sur ces questions de convergences et stabilité, le lecteur intéressé pourra se reporter aux Caillerie [24] et Lewis et Schrefler [108]. Dans ce cas, les variables intervenant dans le problème ne sont pas données explicitement, mais implicitement comme solution du système d'équations obtenue en approchant les

équations différentielles.

On choisit donc dans notre approche un algorithme d'intégration selon le schéma d'Euler implicite : supposons que l'on connait les contraintes et les variables d'état à l'instant  $t$  correspondant à l'incrément  $i$ . Pour le cas de la loi DEM, les variables d'état impliquent la géométrie du VER utilisé (positions des grains, leur rayon), de la liste de contacts et des efforts intergranulaires entre les grains en contacts. L'intégration de la loi de comportement revient à calculer les contraintes et les variables d'état à l'instant  $t + \Delta t$  (l'incrément  $i + 1$ ) à partir des connaissances du déplacement aux nœuds qui vérifient la loi de comportement utilisée.

$$(\sigma, \text{variable})^{i+1} = (\sigma, \text{variable})^i + \Delta t \cdot f(t, \sigma, \text{variable})^{i+1} \quad (3.22)$$

La loi "intégrée" DEM  $\varepsilon_n \rightarrow \sigma_n$  est en général non-linéaire et le problème au pas de temps  $t$  est souvent résolu par une méthode de Newton. La méthode Newton classique nécessite la différentiation de la loi "intégrée" ce qui mène à la notion d'opérateur tangent "consistant" pour l'élastoplasticité (voir Simo et Hughes [163]).

Pour le cas de la loi DEM, l'opérateur tangent consistant est défini en sachant un incrément du gradient de déplacement  $h_{kl}$  donné :

$$C_{ijkl} = \frac{d\sigma_{ij}}{dh_{kl}} \quad (3.23)$$

Cet opérateur est calculé à partir de l'état des contraintes en fin du pas et est consistant avec l'algorithme utilisé. S'il existe des incohérences entre l'opérateur et l'algorithme d'intégration, la convergence quadratique de la méthode Newton sera perdue. En plus, plus cet opérateur sera représentatif du comportement mécanique du milieu granulaire sur le pas de chargement en cours, plus le processus itératif de Newton convergera rapidement vers une solution numérique.

Dans la pratique, cet opérateur est souvent évalué numériquement par une méthode de perturbation. Cette question sera détaillée dans le chapitre 4.

### 3.4 Implémentation de la loi DEM dans ACTIV

Pour une première application, l'intégration est menée en utilisant le logiciel "ACTIV" développé au laboratoire 3SR par René Chambon et Jacques Desrues. Ce logiciel travaille au niveau élémentaire, il ne nécessite ni maillage, ni élément, ni définition d'un domaine. Son principe consiste à rechercher la réponse de la loi de comportement sur un chemin défini par n'importe quelle combinaison de contraintes et de déformations : depuis une spécification toute en déformation, jusqu'à une spécification toute en contrainte, en passant par toutes les spécifications mixtes, telles que par exemple celle du triaxial axisymétrique : deux contraintes imposées (latérales), et une déformation (axiale). La réponse est constituée des éléments complémentaires aux éléments spécifiés : par exemple pour le triaxial, deux déformation latérales et une contrainte axiale.

TABLE 3.5 – Algorithme général de l'ACTIV.

1. Entrée des données
  - 1.1. Paramètres de la loi
  - 1.2. État initial
  - 1.3. Chemin de sollicitation qui consiste en un certain nombre de surincrémentations
2. Boucle sur tous les surincrémentations
  - 2.1. Lecture et décodage de la sollicitation
  - 2.2. Diviser le surincrément en incréments
  - 2.3. Boucle sur les incréments
    - Appel de la linéarisation directionnelle de la loi
    - Assemblage du système linéaire à résoudre
    - Résolution du système
    - (\*) • Itération de correction
      - Calculer les contraintes résultantes
      - Comparer aux contraintes de consigne (définie au début de l'incrément actuel)
        - Tester la convergence
          - Oui. Aller à 2.4
          - Non. Continuer
        - Calculer la correction de déformation pour réduire les écarts de contrainte à la consigne
        - Aller à (\*)
  - 2.4. Fin de surincrément actuel?
    - Oui. Aller à 3
    - Non. Aller à 2.1
3. Fin des surincrémentations?
  - 3.1. Oui. Aller à 4
  - 3.2. Non. Aller à 2
4. Fin du calcul

On notera que les composantes de contrainte et de déformation sont données en axes fixes : en états plans de contrainte ou de déformation (xx, yy, zz, xy) ou (11, 22, 33, 12). L'algorithme général du code est détaillé sur le tableau 3.5.

## 3.5 Application à la modélisation d'ouvrages souterrains

### 3.5.1 Introduction

L'objectif est d'être proche des conditions de modélisation des ouvrages de stockage de déchets radioactifs dans l'argilite du Callovo-Oxfordien. Dans le cadre d'un exercice de modélisation, l'ANDRA<sup>5</sup> a volontairement choisi de mettre l'accent sur les chemins de contraintes proches de ceux observés lors d'une excavation (*ex. chemins en extension latérale*) plutôt que des chemins de sollicitation habituellement étudiés (*ex. compression triaxiale*).

Dans cette phase de l'action transversale de modélisation 2012 de l'ANDRA, selon les termes du document de cadrage (Andra [5]) défini par l'agence, il s'agit de s'affranchir des problèmes liés à la modélisation de structure (*i.e. ouvrages*) et aux aspects numériques au sens large. C'est pourquoi les cas tests correspondent aux cas de simulation analytiques ou numériques pouvant être réalisés soit au niveau d'un point matériel soit une petite structure (*ex. un échantillon ou une structure 2D à petite échelle*). Les complexités induites par l'apparition des fractures autour en amont du front de taille lors de l'excavation ne sont pas donc prises en compte explicitement à ce stade. En même temps, ces chemins de sollicitations se distinguent des chemins habituellement utilisés lors de l'élaboration des modèles pour être suffisamment discriminants des mécanismes en jeu.

Pour toutes ces raisons, dans cette partie on va chercher à réaliser des simulations sur un point matériel sur deux grands types de chemins de sollicitations :

- Chemins de contrainte à proximité de la paroi d'un ouvrage souterrain,
- Chemin avec rotation des axes principaux.

### 3.5.2 Détermination des paramètres des modèles

#### 3.5.2.1 Données disponibles

Les données expérimentales sont fournies par l'ANDRA. Les essais sont effectués sur l'argilite du Callovo-Oxfordien. Il s'agit d'essais triaxiaux en nombre limité :

- 3 essais triaxiaux de compression (TC) sous confinement 12 MPa, dont l'un effectué parallèlement au litage (tous les autres essais disponibles sont effectués perpendiculairement au litage),
- 1 essai TC sous 6 MPa,

---

5. Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs, France

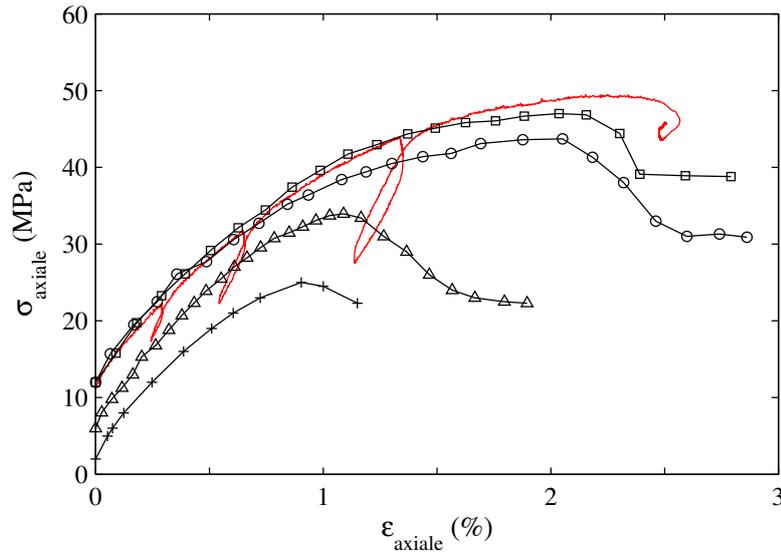


FIGURE 3.18 – Compilation des essais disponibles : ME TC 2 2012 LAEGO (noir +); ME TC 12 2012 LAEGO (rouge); ME TC 12 2012 LML Para (noir o); METC 12 2012 Perp (noir □); ME TC 6 2012 LML Perp (noir △).

- 1 essai TC sous 2 MPa,
- 1 essai isotrope mais limité à la montée à 12 MPa (phase initiale des essais TC 12 MPa).

La figure 3.18 présente les courbes contrainte – déformation axiales correspondantes, dans un même graphique. On constate que ces données sont cohérentes.

### 3.5.2.2 Comparaison expérience-modélisation sur les chemins de calage

Le calage du modèle DEM consiste à déterminer les paramètres "micro" qui vont permettre de reproduire correctement les essais de calage fournis, ou une sélection de ceux-ci. Ces paramètres "micro" sont le niveau de raideur  $\kappa$ , le rapport entre la raideur normale et tangentielle  $k_n/k_t$ , le frottement intergranulaire ( $\mu$ ), et la cohésion ( $p^*$ ). Cependant, la constitution de l'assemblée de particules elle-même joue aussi un rôle. Notamment, suivant qu'elle est dense ou lâche, et que le nombre de coordination (nombre de contacts entre les particules) est plus ou moins grand, la réponse en dilatance/contractance sera différente; et aussi l'adoucissement induit par la rupture progressive des ponts cohésifs entre les grains, entraînant une dégradation irréversible. Il faut noter également que le VER initial n'est pas défini uniquement par la géométrie des grains et des contacts : il faut ajouter à cette information la liste des forces aux contacts avec leur intensité, de telle sorte que la contrainte homogénéisée, à l'état initial, soit égale à celle qui règne dans le matériau macro que l'on veut représenter. Ici, on a choisi de considérer un matériau isotrope soumis à un état de contrainte isotrope de 12 MPa.

La préparation du VER repose sur une procédure de distribution aléatoire des particules, en position et en taille, dans une "boite" carrée qu'on va ensuite déformer progressivement, par modélisation DEM, jusqu'à atteindre un état de contrainte égal à l'état initial recherché (section 2.4) (ici, isotrope 12 MPa comme dit plus haut). Les paramètres micro de cohésion de contact et de frottement intergranulaire sont ajustés pour représenter au mieux la réponse fournie par les résultats expérimentaux sur les essais de calage. La réponse du VER est obtenue en procédant à un calcul purement DEM, piloté en déformation axiale et en contrainte latérale.

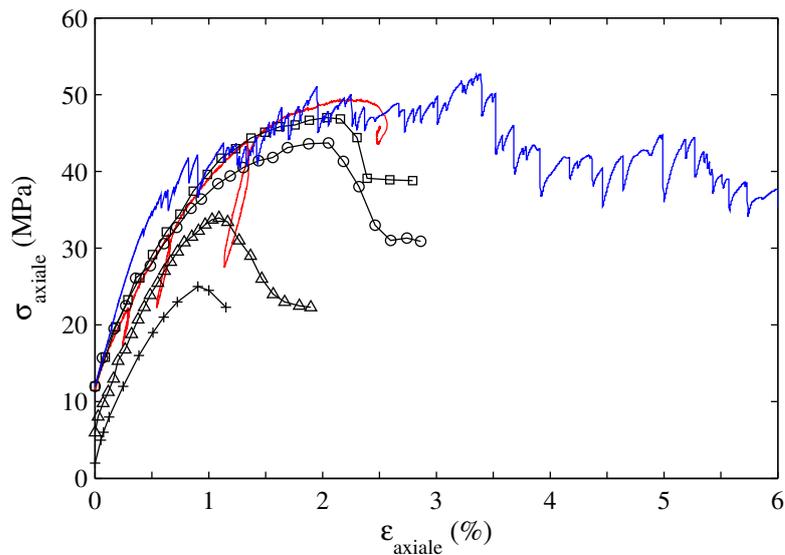


FIGURE 3.19 – Comparaison modèle DEM (courbe bleue) – expériences sur le chemin TC 12 MPa (courbe rouge).

La figure 3.19 montre la comparaison de la réponse de la loi DEM avec les données expérimentales. On observe que la courbe du modèle homogénéisé DEM est très chahutée, ce qui n'est pas surprenant compte tenu d'une part de la nature de la modélisation, et d'autre part du fait qu'on a pris ici, délibérément, un VER avec un très petit nombre de grains (400). Ce choix est fait parce que, compte tenu des performances des machines de calcul utilisées dans cette étude, cette taille de VER est compatible avec des calculs FEM  $\times$  DEM de durée raisonnable.

On remarque aussi que le modèle homogénéisé DEM prédit un adoucissement qui peut se prolonger très longtemps sans causer de perte de convergence du processus d'intégration sur ce chemin piloté en déformation axiale. Bien entendu, piloté en contrainte, il ne serait plus contrôlable, ce qu'on obtient de même avec les lois de comportement classiques.

Bien entendu aussi, et c'est important, cet adoucissement provoqué par la perte irréversible de la cohésion aux contacts qui s'ouvrent ou glissent ne doit pas être "calé" sur la partie post-pic des courbes expérimentales, dont on sait très bien qu'elles corres-

pondent à une réponse non plus homogène, mais de structure, avec déformation localisée. Il est satisfaisant en revanche, que le pic du modèle et le pic expérimental correspondent bien. Sans s'illusionner toutefois sur l'homogénéité de la phase pré-pic expérimentale, ni numérique d'ailleurs (au niveau micro).

On notera enfin que la phase initiale montre une raideur sensiblement plus grande que l'expérience. Ceci se retrouvera dans les modélisations.

Les caractéristiques du VER choisi, les paramètres de la loi de contact sont ensuite donnés :

TABLE 3.6 – Caractéristiques du VER choisi.

		Nombre		Indice
de grains (npa)	de contacts (ncont)	de contacts collés (ncontc)	de coordination (z)	des vides (e)
400	633	633	1.582	0,180

On constate que le VER calé ici est initialement très dense ( $e = 0.180$ ) et le nombre de coordination est élevé ( $z = 3.16$ ).

TABLE 3.7 – Paramètres de la loi de contact utilisée (contact de type 2).

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (P \cdot \bar{a})$	Niveau de raideur	1000
$k_n / k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	2

### 3.5.3 Notations du calcul

Dans les calculs suivants (sections 3.5.4 et 3.5.5), tous les résultats obtenus avec la loi homogénéisée DEM sont comparés directement avec ceux d'une loi de comportement de type hypoplastique<sup>6</sup> CLoE (**C**onsistance et **L**ocalisation **E**xplícite). CLoE est un modèle incrémentalement non-linéaire qui décrit le comportement mécanique d'un géomatériau de type cohésif-frottant, élasto-plastique, non-visqueux. Il s'agit d'une loi constitutive non-linéaire en vitesse, qui, pour un état donné, fournit la réponse en taux de contraintes à une sollicitation exprimée en taux de déformation. Pour plus de détails sur ce modèle, on vous invite à vous reporter à Chambon *et al.* [37], [38].

Une section courante de galerie se trouvant dans un état de contraintes initial isotrope ou anisotrope est considérée (axe 1 et 2). L'axe 3 spécifie l'orientation de la galerie comme montré sur la figure 3.20.

6. Kolymbas [100] a proposé d'appeler *hypoplastiques* les modèles non-linéaires qui ne sont pas directement fondés sur la théorie d'écoulement de la plasticité.

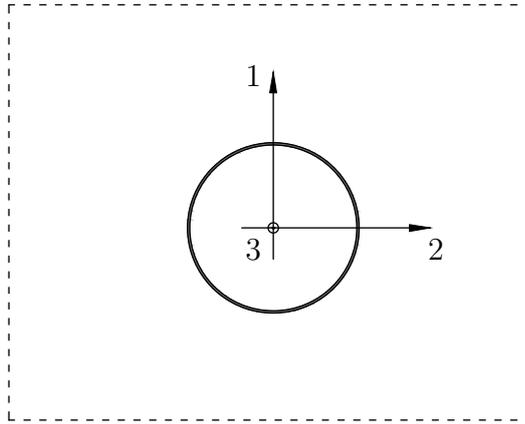


FIGURE 3.20 – Définition des axes dans une galerie.

Les indices 1, 2 et 3 (sans ordre) sont donc utilisés pour désigner les trois axes de contraintes (axes fixes). Dans ce qui suit, les contraintes moyenne et déviatorique sont désignées par  $p$  et  $q$  :

$$p = \frac{1}{3} \cdot (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) \quad \text{et} \quad q = \sigma_{11} - \sigma_{22} \quad (3.24)$$

Chaque cas test est composé de plusieurs étapes. On considère que le chargement (contrainte ou pression) varie d'une manière linéaire (*i.e.* à vitesse constante) de sa valeur au début de l'étape jusqu'à la valeur finale de l'étape. La vitesse de chargement peut donc être ainsi calculée<sup>7</sup>. Le but n'étant pas de modéliser un ouvrage réel, un seul jeu de données est considéré à ce stade pour les calculs mécaniques.

### 3.5.4 Chemins de contraintes à proximité de la paroi d'une galerie

Les observations in-situ montrent que dans le Callovo-Oxfordien sur le site considéré, la contrainte maximale est la contrainte horizontale majeure. Une anisotropie de contrainte existe dans l'argilite. Le rapport d'anisotropie des contraintes horizontales est compris entre  $1.0 < \sigma_H / \sigma_h < 1.3$ . La magnitude de la contrainte verticale est proche de la contrainte horizontale mineure  $\sigma_h$ . À la profondeur de 490 m, la contrainte horizontale mineur est de l'ordre de  $12.4 \pm 0.5$  MPa alors que la valeur retenue pour la contrainte verticale à 504 m est  $\sigma_v = 12.7$  MPa. Cette valeur est un minorant de la contrainte horizontale majeure  $\sigma_H$  qui est compris entre 12.7 MPa et 16 MPa (Andra [4]).

#### 3.5.4.1 Cas 1.1

Ce chemin de sollicitation est défini en se basant sur une excavation dans un champ de contrainte initiale isotrope. Aucun seuil n'a été considéré dans l'élaboration de ce chemin.

<sup>7</sup>. Ici, on ne modélise pas le comportement différé.

Ce chemin de contrainte suivra le schéma suivant et est représenté graphiquement sur la figure 3.21.

1. A l'état initial  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -12$  MPa.
2. On maintient  $\Delta\sigma_3 = 0$  pendant toute la durée de modélisation.
3. Déchargement dans la direction 2 jusqu'à zéro et chargement dans la direction 1 telle que  $p = p_0 = -12$  MPa.
4. Maintien de cet état de contrainte pendant 6 mois.

Les résultats avec la loi DEM sont présentés et comparés avec ceux de la loi CLoE sur les graphiques (figure 3.22). On rappelle que le temps ici n'est qu'un paramètre de chargement, car le comportement différé n'est pas pris en compte.

Le calcul DEM se compare très bien avec le calcul CLoE. Les irrégularités de la courbe DEM correspondent à des sauts en déformation qui se produisent lorsque l'état de contrainte devient non supportable par la microstructure, qui se réarrange alors (glissement de grains, destruction de la cohésion à un ou plusieurs contacts). On constate également que la réponse est non linéaire, et aussi que la contrainte (donnée) et la déformation de cisaillement (sortie) sont tout à fait nulles.

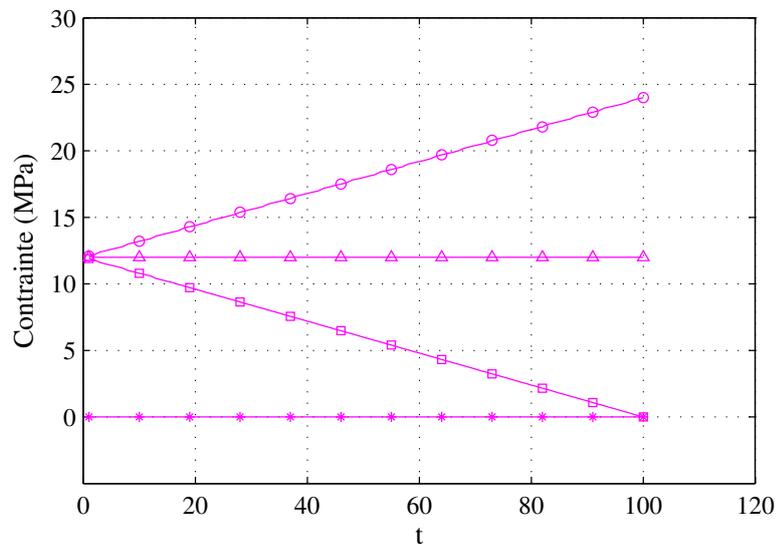


FIGURE 3.21 – Cas 1.1 : Chemin de sollicitation en contrainte.  $\circ$   $\sigma_{11}$ ,  $\square$   $\sigma_{22}$ ,  $\triangle$   $\sigma_{33}$ ,  $*$   $\sigma_{12}$ .

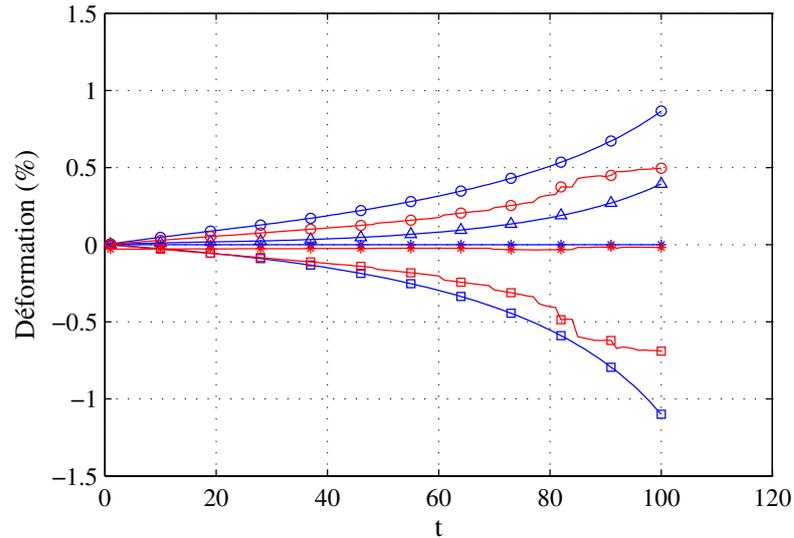


FIGURE 3.22 – Cas 1.1 : Réponse en déformation. La loi CLoE en bleu et la loi DEM en rouge.  $\circ$   $\varepsilon_{11}$ ,  $\square$   $\varepsilon_{22}$ ,  $\triangle$   $\varepsilon_{33}$ ,  $*$   $\varepsilon_{12}$ .

### 3.5.4.2 Cas 1.2

Ce cas considère un schéma de rupture en plasticité parfaite une fois qu'un seuil est atteint :

1. A l'état initial  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -12$  MPa.
2. On maintient  $\Delta\sigma_3 = 0$  pendant toute la durée de modélisation.
3. Déchargement dans la direction 2 jusqu'à  $\sigma_2 = -2.4$  MPa et chargement dans la direction 1 jusqu'à  $\sigma_1 = -22$  MPa pendant 8 semaines.
4. Déchargement de  $\sigma_2$  jusqu'à zéro et déchargement dans la direction 1 jusqu'à  $\sigma_1 = -17.8$  MPa.
5. Maintient de cet état de contrainte pendant 6 mois.

La seconde phase dite "plastique" donne lieu à un accroissement de l'intensité des déformations en direction 2 et 3, alors que la déformation en direction 1 reste inchangée. Globalement, les déformations restent sensiblement plus faibles que dans le cas 1.1.

Comme dans le cas 1.1, le calcul DEM se compare bien, dans les grandes tendances, avec le calcul CLoE. Ce résultat est remarquable si on tient compte du fait que les deux modèles ont été calibrés certes à partir de même données expérimentales, mais tout à fait indépendamment évidemment puisqu'ils sont extrêmement et essentiellement différents dans leur principe. On rappelle que les irrégularités de la courbe DEM correspondent à des sauts en déformation qui se produisent lorsque l'état de contrainte devient non supportable par la microstructure, qui se réarrange alors (glissement de grains, destruction de la cohésion à un ou plusieurs contacts). Il est intéressant de noter une différence entre les deux prédictions : alors que le modèle CLoE prédit un arrêt quasi-complet de

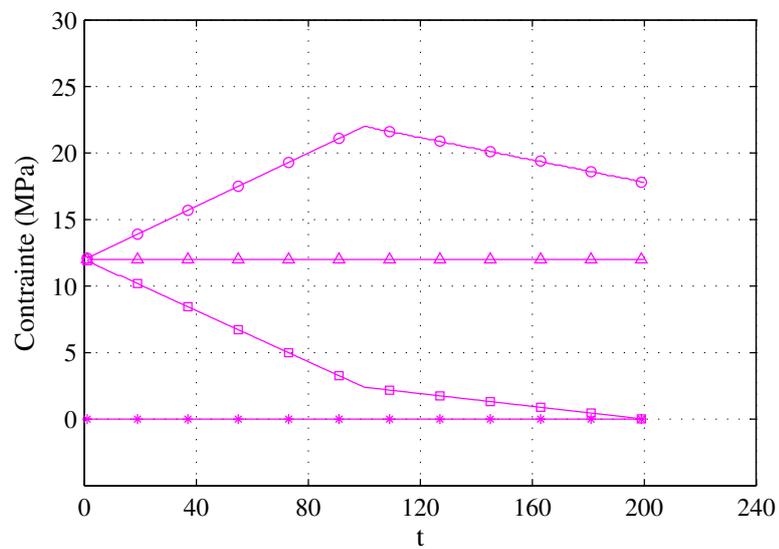


FIGURE 3.23 – Cas 1.2 : Chemin de sollicitation en contrainte.  $\circ$   $\sigma_{11}$ ,  $\square$   $\sigma_{22}$ ,  $\triangle$   $\sigma_{33}$ ,  $*$   $\sigma_{12}$ .

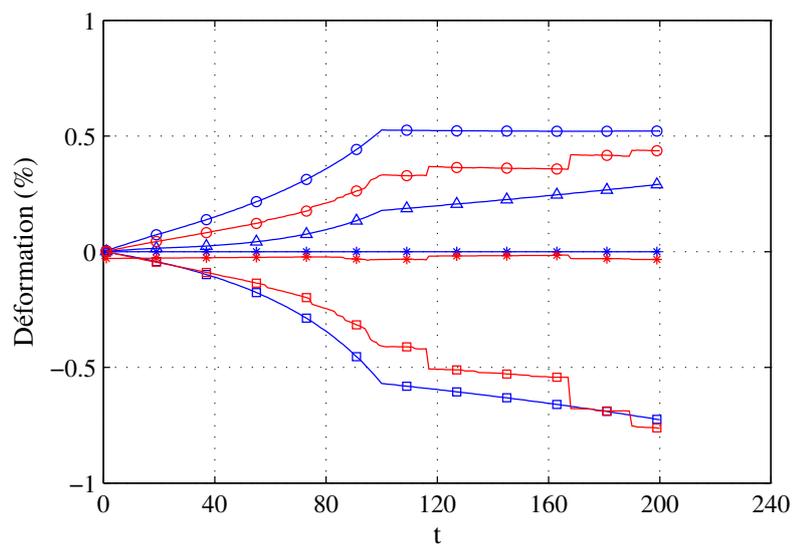


FIGURE 3.24 – Cas 1.2 : Réponse en déformation. La loi CLoE en bleu et la loi DEM en rouge.  $\circ$   $\epsilon_{11}$ ,  $\square$   $\epsilon_{22}$ ,  $\triangle$   $\epsilon_{33}$ ,  $*$   $\epsilon_{12}$ .

la déformation en direction 1 dans la phase de décharge, le modèle DEM prédit une légère augmentation. Il faut sans doute relier ceci au fait que le modèle DEM prédit un adoucissement sur le chemin triaxial après pic, alors que CLoE non, par construction du modèle.

### 3.5.4.3 Cas 1.3

Dans le cas 1.3, on considère un champ lointain anisotrope, et un point en parement de la galerie. En ce point, la contrainte majeure est dans la direction radiale de la galerie, et la mineure dans la direction orthoradiale. Lors du déconfinement, la contrainte initialement majeure diminue, alors que la mineure augmente.

1. A l'état initial  $\sigma_1 = -15.6$  MPa et  $\sigma_2 = \sigma_3 = -12$  MPa.
2. On maintient  $\Delta\sigma_3 = 0$  pendant toute la durée de modélisation.
3. Déchargement dans la direction 1 jusqu'à zéro et chargement dans la direction 2 jusqu'à  $\sigma_2 = -20.4$  MPa pendant 10 semaines. On note que dans ce cas la contrainte majeure devient mineure et vis-versa pendant le chargement
4. Maintien de cet état de contrainte pendant 6 mois.

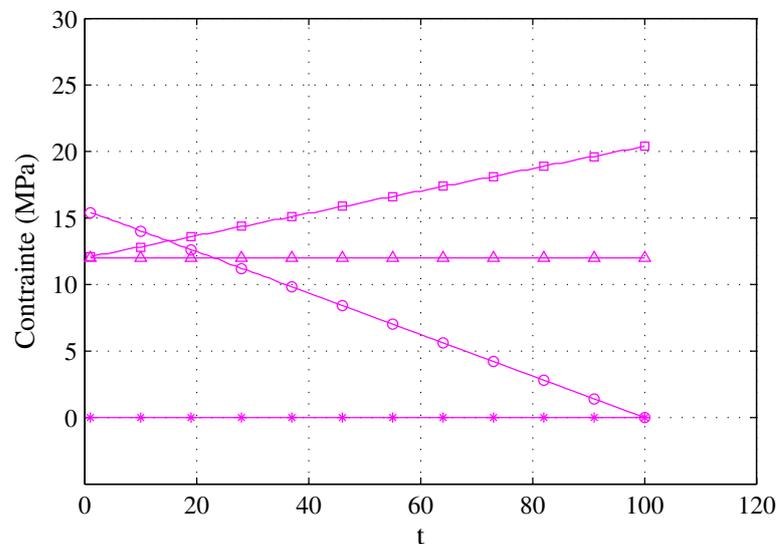


FIGURE 3.25 – Cas 1.3 : Chemin de sollicitation en contrainte.  $\circ$   $\sigma_{11}$ ,  $\square$   $\sigma_{22}$ ,  $\triangle$   $\sigma_{33}$ ,  $*$   $\sigma_{12}$ .

Le calcul DEM à nouveau se compare bien avec le calcul CLoE : comme dans le cas 1.1 les déformations données par ce modèle présentent la même allure globale que le calcul CLoE dans un premier temps, avec les déformations systématiquement plus faibles ; puis des sauts de déformations sont observés lorsque de déviateur augmente. Le dernier fait sortir du cadre de représentation choisi.

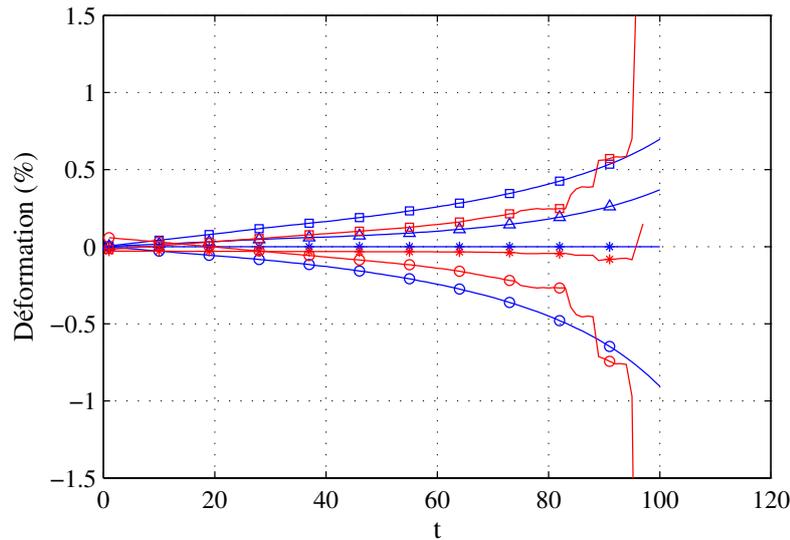


FIGURE 3.26 – Cas 1.3 : Réponse en déformation. La loi CLoE en bleu et la loi DEM en rouge.  $\circ$   $\varepsilon_{11}$ ,  $\square$   $\varepsilon_{22}$ ,  $\triangle$   $\varepsilon_{33}$ ,  $*$   $\varepsilon_{12}$ .

#### 3.5.4.4 Cas 1.4

Comme dans le cas 1.3, on considère un champ lointain anisotrope, mais le point modélisé est un point en voûte de la galerie. En ce point, la contrainte majeure est dans la direction orthoradiale de la galerie, et la mineure dans la direction radiale. Lors du déconfinement, la contrainte initialement majeure augmente, alors la mineure diminue. Le déviateur ne fait donc qu'augmenter au cours du déconfinement, alors que dans le cas précédent il diminuait avant de croître à nouveau.

1. A l'état initial  $\sigma_1 = -15.6$  MPa et  $\sigma_2 = \sigma_3 = -12$  MPa.
2. On maintient  $\Delta\sigma_3 = 0$  pendant toute la durée de modélisation.
3. Déchargement dans la direction 2 jusqu'à zéro et chargement dans la direction 1 jusqu'à  $\sigma_1 = -34.8$  MPa pendant 10 semaines.
4. Maintien de cet état de contrainte pendant 6 mois.

Comme dans les cas précédents, le calcul avec la loi DEM se compare bien avec le calcul CLoE. L'intensité des déformations est nettement augmentée. Cependant, plus que dans les deux premiers cas, les déformations données par ce modèle sont systématiquement plus faibles ; puis des sauts de déformations sont observés lorsque le déviateur augmente. À nouveau, le dernier saut fait sortir du cadre de représentation choisi.

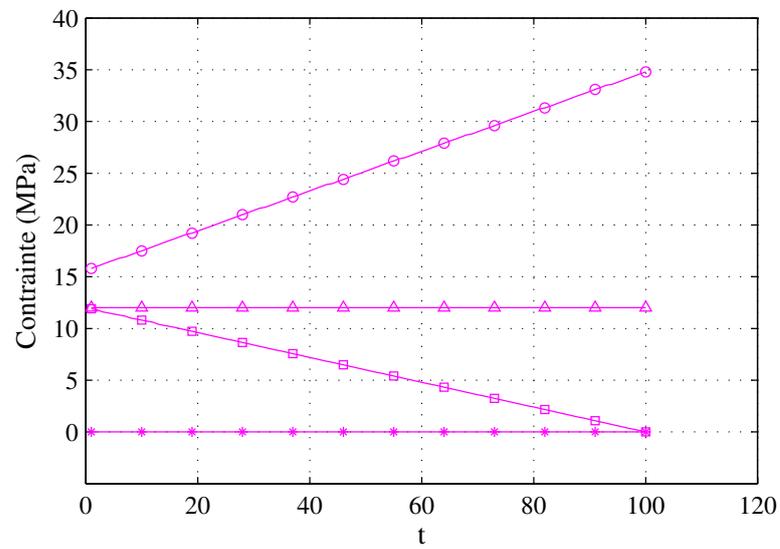


FIGURE 3.27 – Cas 1.4 : Chemin de sollicitation en contrainte.  $\circ \sigma_{11}$ ,  $\square \sigma_{22}$ ,  $\triangle \sigma_{33}$ ,  $* \sigma_{12}$ .

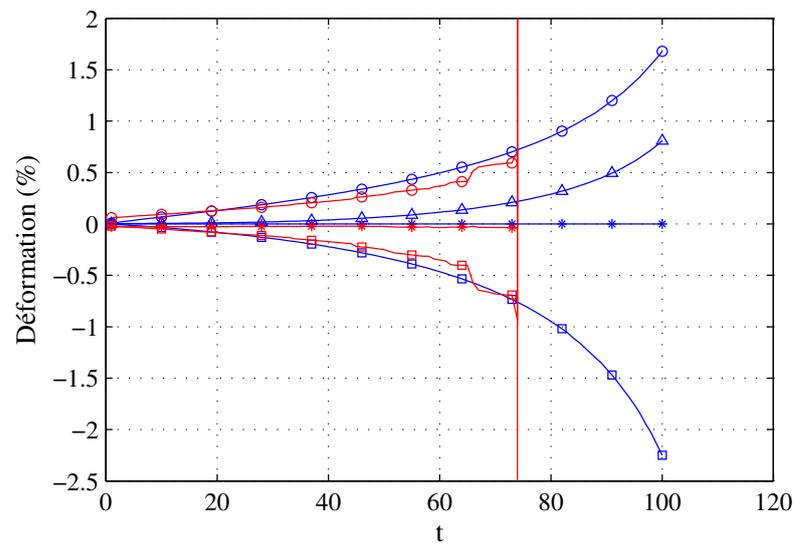


FIGURE 3.28 – Cas 1.4 : Réponse en déformation. La loi CLoE en bleu et la loi DEM en rouge.  $\circ \epsilon_{11}$ ,  $\square \epsilon_{22}$ ,  $\triangle \epsilon_{33}$ ,  $* \epsilon_{12}$ .

### 3.5.5 Chemin à rotation des axes principaux

Lors des travaux d'excavation, on observe en paroi des amorçages de ces fractures sous forme de chevrons. L'amorçage de ces fractures induit des rotations significatives des axes principaux des contraintes. L'orientation des axes principaux des contraintes dans cette zone est fortement influencée par le cisaillement dans le plan diamétral lorsque le front est proche. Ces rotations activent les modules de cisaillement dit hors-axe (*i.e. axes principaux de la contrainte*), qui sont différents des modules de cisaillement en-axes dès qu'on a une anisotropie du matériau, inhérente ou même induite, ce qui est inévitable. De ce fait, dans une modélisation, la tendance à localiser en bande de cisaillement, précurseur de la macro-fissure, peut dépendre des modules de cisaillement hors axes.

Une modélisation 2D en déformation plane est considérée. Dans ce cadre on note :

$$p = \frac{1}{3} \cdot (\sigma_{11} + 2 \cdot \sigma_{22}) \quad \text{et} \quad q = \sigma_{11} - \sigma_{22} \quad (3.25)$$

Deux phases sont considérées : d'abord un chargement déviatorique à axes principaux fixes et à contrainte moyenne constante. La deuxième phase concerne la simulation de la rotation des axes des contraintes aux contraintes principales constantes.

Après la rotation, les axes 1 et 2 ne seront plus des axes principaux.  $\theta$  désigne l'angle d'orientation des nouveaux axes principaux I et II dans le repère 1, 2.

Ce cas se rencontre lorsque le point considéré est situé en paroi de galerie, ailleurs qu'au parement ou à la voûte. Le chemin de contraintes ici envisage un chemin de déconfinement pour un tel point ; le schéma retenu consiste à établir le déviateur comme dans le cas 1.1, (sans toutefois atteindre zéro en contrainte radiale), puis à faire tourner les directions principales des contraintes.

Le chemin de contrainte suivra le schéma suivant :

1. A l'état initial  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -12$  MPa.
2. On maintient  $\Delta\sigma_3 = 0$  pendant toute la durée de modélisation.
3. Déchargement dans la direction 2 jusqu'à  $\sigma_2 = -2$  MPa et chargement dans la direction 1 jusqu'à  $\sigma_1 = -22$  MPa pendant 8 semaines. La contrainte moyenne reste constante à 12 MPa pendant cette phase.
4. Rotation des axes en augmentant la valeur de  $\theta$ . Les valeurs des composantes de tenseurs de contraintes sont renseignées dans le tableau ci-dessous.

Ce chemin est très différent des chemins de type 1. Il mobilise les modules de cisaillement hors axe de la loi de comportement. On ne dispose généralement pas de données expérimentales permettant de déterminer directement ces paramètres.

On notera ici, dans la phase de rotation des axes, le développement d'une déformation de cisaillement importante, alors que les déformations normales en directions 1 et 2 augmentent d'abord en intensité, puis diminuent. On constate sur le graphique une

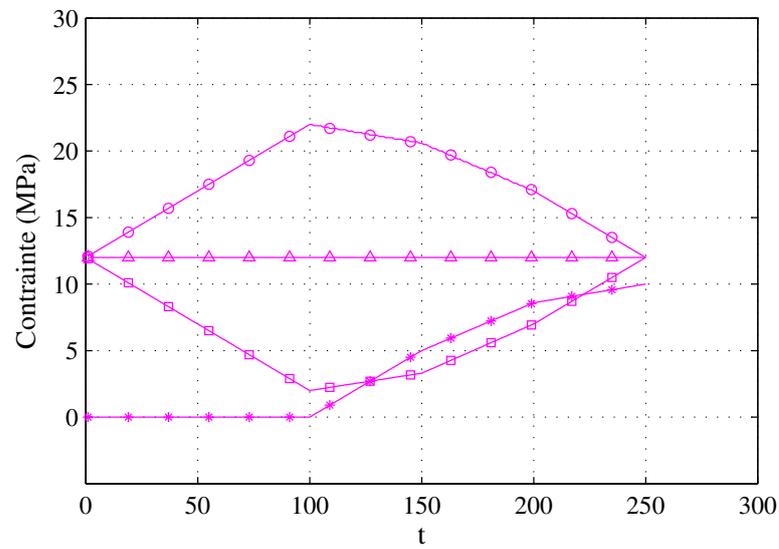


FIGURE 3.29 – Cas 2 : Chemin de sollicitation en contrainte.  $\circ$   $\sigma_{11}$ ,  $\square$   $\sigma_{22}$ ,  $\triangle$   $\sigma_{33}$ ,  $*$   $\sigma_{12}$ .

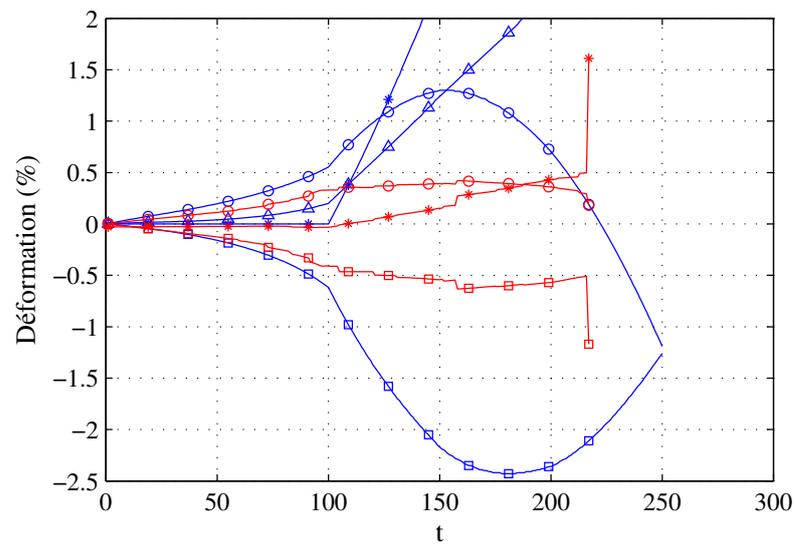


FIGURE 3.30 – Cas 2 : Réponse en déformation. La loi CLoE en bleu et la loi DEM en rouge.  $\circ$   $\varepsilon_{11}$ ,  $\square$   $\varepsilon_{22}$ ,  $\triangle$   $\varepsilon_{33}$ ,  $*$   $\varepsilon_{12}$ .

TABLE 3.8 – Valeurs des composantes de tenseur de contraintes.

$\theta$ (degrés)	$\sigma_{11}$ (MPa)	$\sigma_{22}$ (MPa)	$\sigma_{12}$ (MPa)	$\sigma_{33}$ (MPa)
15	-20.6	-3.3	5	-12
30	-17	-7	8.6	-12
45	-12	-12	10	-12

forte différence entre la réponse DEM et celle CLoE à partir de la phase de rotation des axes. Les réponses par DEM semblent plus raisonnables avec une augmentation et diminution moins importante dans tous les sens.

### 3.6 Conclusion

La construction d'une loi homogénéisée de type DEM a été présentée d'une manière détaillée : des motivations à la mise en œuvre numérique. La matrice tangente à la loi est ensuite décrite et évaluée numériquement. Une représentation graphique par les enveloppes de réponses (Gudehus [86]) afin d'illustrer la réponse non-linéaire incrémentale de la loi est donnée. Les analyses de la formation d'une bande de cisaillement avec deux modes de cisaillement (Desrues et Chambon [65]) ont été faites en utilisant la théorie de bifurcation (Rice [150]). Les résultats obtenus sont très intéressants et montrent un bon fonctionnement de la loi construite ainsi que le code de calcul développé.

En utilisant le logiciel ACTIV muni de la loi homogénéisée DEM, on a appliqué cette loi DEM aux problèmes liés à la modélisation des stockages des déchets radioactifs dans l'argilite du Callovo-Oxfordien. Les résultats sont analysés et comparés directement avec ceux obtenus par la loi CLoE (Chambon *et al.* [37]) ce qui confirme encore une fois la pertinence et les avantages de la loi DEM.

---

## Simulation multi-échelle par couplage FEM×DEM

---

*L'implémentation dans le code éléments finis Lagamine du code DEM développé au chapitre 3 est d'abord présentée. Ensuite, la validation du code de calcul sera effectuée. Enfin, grâce à l'outil développé, des essais biaxiaux et un essai sur un cylindre creux sont simulés.*

### Sommaire

---

<b>4.1 Introduction . . . . .</b>	<b>102</b>
<b>4.2 Implémentation de la loi DEM dans un code éléments finis : le cas du code Lagamine . . . . .</b>	<b>102</b>
4.2.1 Présentation du code de calcul Lagamine . . . . .	102
4.2.2 Implémentation de la loi DEM dans Lagamine . . . . .	104
<b>4.3 Validation du code de calcul multi-échelle FEM × DEM . .</b>	<b>107</b>
4.3.1 Problème élémentaire . . . . .	107
4.3.2 VER à l'échelle microscopique . . . . .	107
4.3.3 Résultats et discussions . . . . .	109
<b>4.4 Simulation des essais biaxiaux en compression . . . . .</b>	<b>114</b>
4.4.1 Géométrie et conditions aux limites . . . . .	114
4.4.2 Paramètres microscopiques . . . . .	116
4.4.3 Résultats numériques . . . . .	117
<b>4.5 Essai sur un cylindre creux . . . . .</b>	<b>126</b>
4.5.1 Géométrie et conditions aux limites . . . . .	126
4.5.2 Paramètres microscopiques . . . . .	128
4.5.3 Résultats numériques . . . . .	129
<b>4.6 Conclusion . . . . .</b>	<b>138</b>

---

## 4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté la construction d'une loi homogénéisée équivalente en se basant sur les interactions intergranulaires de type DEM. Dans le contexte de modélisation multi-échelle, on va l'intégrer dans un code de calcul en éléments finis. Ce travail consiste à ajouter le code DEM dans la bibliothèque des lois constitutives du code FEM; la loi homogénéisée pourra ainsi être sélectionnée d'une manière similaire aux autres lois de comportement.

Une fois cette loi intégrée dans le code FEM, une étape de validation du fonctionnement de l'outil numérique est absolument nécessaire et elle est effectuée sur des essais élémentaires.

Le modèle DEM qu'on emploie ici peut présenter, suivant les caractéristiques du milieu granulaire introduites dans le VER une phase de dilatance. Il est bien connu que ce type de comportement produit des localisations de la déformation dans un problème aux limites en grandes déformations. Des modélisations d'essais biaxiaux seront menées en espérant obtenir des bandes de cisaillement qui se déclencheront et se développeront dans la structure.

Cette méthode de modélisation multi-échelle FEM × DEM est très prometteuse. Dans l'objectif de montrer dans quelle mesure on peut l'utiliser, une application à des problèmes d'ouvrages géotechniques seront présentés montrant la possibilité d'appliquer cette méthode aux problèmes limites à l'échelle réelle.

## 4.2 Implémentation de la loi DEM dans un code éléments finis : le cas du code Lagamine

### 4.2.1 Présentation du code de calcul Lagamine

Lagamine [56] est un logiciel de calcul par éléments finis, développé de longue date, depuis 1982, par le département MSM (**M**écanique des matériaux, **S**tabilité des constructions, **M**écanique des structures, Université de Liège, Belgique). Ce code est écrit en langage de programmation Fortran 77. Le lecteur intéressé pourra trouver des détails de ce logiciel dans Cescotto [34], Charlier [41] et Habraken [87].

Lagamine est dédié à l'analyse des problèmes mécaniques non-linéaires en grandes déformations utilisant des lois constitutives non-linéaires. Lagamine offre une large bibliothèque d'éléments et d'options dans la formulation des problèmes traités (problème mécanique, hydraulique, thermique), y compris des couplages multiphysiques avancés tels que : couplage hydro-mécanique, thermo-mécanique ou thermo-hydro-mécanique. Il offre également des conditions limites variées : forces ou déplacements imposés. Les problèmes traités dans Lagamine peuvent être en 2D ou 3D.

TABLE 4.1 – Algorithme général de Lagamine.

1. Entrée des données
  2. Début du pas  $n$ 
    - 2.1. Si itération  $i = 1$ 
      - Boucle sur tous les nœuds du maillage
        - Initialisation des vitesses nodales
        - Détermination des nouvelles coordonnées
    - 2.2. Si itération  $i > 1$ 
      - Boucle sur tous les éléments du maillage
      - Boucle sur tous les points d'intégration de Gauss
        - Calcul du gradient de vitesse  $\partial \dot{u}^B / \partial x^B$
        - Intégration de la loi de comportement : calcul des contraintes, des variables d'état, matrice de rigidité locale
        - Calcul des forces nodales équivalentes  $F$
      - Assemblage de la matrice de rigidité globale
      - Résolution du système  $K \cdot \delta u = F$
      - Vérification des critères de convergence
        - Oui. Aller à 3
        - Non. Aller à 2.3
    - 2.3. Vérifier si nombre maximal des itérations atteint ?
      - Oui. Aller à 2.4
      - Non. Mettre à jour les déplacements et des vitesses nodales  $i = i + 1$ . Aller à 2.2
    - 2.4. Diminuer  $\Delta t$ . Vérifier si  $\Delta t > \Delta t_{min}$  ?
      - Oui. Aller à 4
      - Non. Aller à 2.1
  3. Fin du chargement ?
    - 3.1. Oui. Aller à 4
    - 3.2. Non,  $n = n + 1$ . Aller à 2
4. Fin du calcul

Jusqu'au maintenant, une grande bibliothèque des lois de comportement est intégrée dans Lagamine : élastique, élastoplastique, viscoélastoplastique (surface de rupture Von Mises, Drucker Prager non-associé, Camclay), hypoplastique et d'autres. Le domaine d'application du logiciel très vaste avec par exemple pour des problèmes géotechniques : excavation du tunnel, stabilité des pentes, etc.

Lagamine est un logiciel de référence de l'équipe GDR (**G**éomatériaux, **D**éformation et **R**upture, Laboratoire 3SR) depuis longtemps, nous y avons intégré nos développements de lois de comportement (CloE, Chambon *et al.* [37]) et les analyses de bifurcation par localisation de la déformation en bandes de cisaillement. La collaboration avec l'équipe de l'Université de Liège qui développe ce code est permanente depuis les années 1980, avec des échanges de chercheurs et des co-encadrement de thèses. De ce fait, nous avons une connaissance approfondie du code et ceci nous permet de résoudre plus facilement les problèmes techniques éventuels concernant l'intégration de nos développements. Donc, nous avons choisi Lagamine comme l'outil numérique dans le cadre de ce travail de recherche.

Lagamine respecte la structure générale d'un code de calcul en éléments finis. Un bref rappel sur cette méthode est donné dans la section 1.2.1 du chapitre 1.

Afin de fournir une vue générale sur ce code, on rappelle l'algorithme général de Lagamine (voir le tableau 4.1). Néanmoins, les équations de base de la FEM ne seront pas abordées.

#### 4.2.2 Implémentation de la loi DEM dans Lagamine

Afin de mettre en œuvre le calcul multi-échelle FEM × DEM, une implémentation du code DEM dans le code éléments finis a été réalisée. Le code DEM remplace la routine constitutive appelée en chaque point d'intégration (point de Gauss), qui retourne un incrément de contrainte en réponse à un incrément de déformations ; cet incrément de déformation est celui qui résulte, au point de Gauss considéré, du champ de déplacement de la structure dans l'état actuel (itérations d'équilibre global, pour le pas de chargement actuel). Le code "loi" numérique ainsi défini retourne également une évaluation numérique de l'opérateur tangent consistant.

Les développements effectués dans le code Lagamine ont consisté à intégrer une loi de comportement numérique de type DEM en lieu et place des lois de comportement analytiques classiquement utilisées dans les codes par éléments finis. L'implémentation de la loi constitutive consiste à ajouter la routine de la loi (section 3.2.1.3) dans Lagamine. Il implique plusieurs modifications dans le code original, notamment dans la routine LOI2.F. La boucle sur les points d'intégration de Gauss fait appel cette routine, qui gère l'appel à la loi de comportement en fonction du choix de l'utilisateur. Dans le cas de la loi DEM, LOI2.F appelle une routine qui s'appelle PIL\_DEM.F, qui gère l'appel de la loi DEM à proprement parler, en plusieurs appels parallèles dont l'un fournit la contrainte correspondant à la déformation imposée, et les autres les contraintes

correspondant aux déformations perturbées autour de la déformation sus-mentionnée, en vue de déterminer l'opérateur tangent consistant selon le principe de dérivation numérique expliqué ci-dessous. On obtient ainsi en chaque point de Gauss la contrainte, et l'opérateur tangent qui va servir à construire la matrice de rigidité élémentaire de l'élément considéré. La routine DEM proprement dite s'appelle DEM-PLC, son rôle consiste à déterminer les contraintes ainsi que les variables d'état en fin du pas à partir de la connaissance d'un gradient de déplacement. On présente à la figure 4.1 les relations entre les routines évoquées ci-dessus. Dans cette figure, QA et QB sont respectivement les listes des variables d'état de la loi homogénéisée au début et en fin de chaque itération.

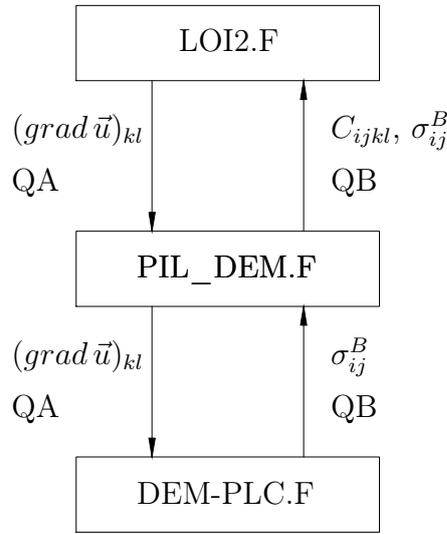


FIGURE 4.1 – Appel des routines dans Lagamine au point de Gauss.

Dans Lagamine, les contraintes et les déformations sont écrites sous formes vectorielles :

$$d\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} d\sigma_1 \\ d\sigma_2 \\ d\sigma_{12} \end{pmatrix} \quad d\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} d\varepsilon_1 \\ d\varepsilon_2 \\ d\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

L'intégration implicite choisie dans Lagamine nous ramène à l'utilisation un processus itératif de type Newton-Raphson pour la résolution du système non-linéaire. Cette méthode nécessite un opérateur tangent consistant comme défini dans la section 3.3.2. On reprend ici son équation :

$$C_{ijkl} = \frac{d\sigma_{ij}}{dh_{kl}} \quad (4.2)$$

avec  $h_{kl}$  est le gradient de déplacement.

Pour les lois de comportement simples, cet opérateur tangent peut être trouvé analytiquement. Pour les milieux granulaires, les lois de comportement sont complexes (non linéarité, ...), la matrice tangente consistante est déterminée par différenciation numérique de la loi de comportement elle-même issue, dans notre cas, de la modélisation discrète DEM (Nguyen *et al.* [126], [127]). Pour ce faire, une méthode de perturbation est appliquée.

À l'échelle macroscopique, les éléments finis sont employés pour résoudre le problème homogénéisé. Pour un incrément du gradient de déplacement  $\delta h_{kl} = \text{grad } u_{kl}$  donné, on effectue le premier calcul dans lequel on détermine la contrainte en fin du pas, noté  $\sigma_{ij}(\delta h_{kl})$ . Ensuite, on considère les perturbations de l'incrément du gradient de déplacement, ce qui conduit en 2D à effectuer quatre calculs en appliquant  $\delta h_{kl} + \varepsilon \cdot \Delta_{kl}^{mn}$ . Ici,  $\varepsilon$  est une petite valeur de perturbation, et  $\Delta_{kl}^{mn}$  est un tenseur d'ordre deux dont les composantes sont définies par :

$$\Delta_{kl}^{mn} = \delta_{mk} \cdot \delta_{nl} \quad (4.3)$$

avec la symbole de Kronecker  $\delta_{mk} = \begin{cases} 1 & \text{si } m = k \\ 0 & \text{si } m \neq k \end{cases}$ . En 2D :  $k, l, m, n = 1, 2$ .

Les contraintes obtenues par ces deux étapes de calcul nous permettent de déterminer la matrice tangente consistante :

$$C_{ijkl} = \frac{\sigma_{ij}(\delta h_{kl} + \varepsilon \cdot \Delta_{kl}^{mn}) - \sigma_{ij}(\delta h_{kl})}{\varepsilon} \quad (4.4)$$

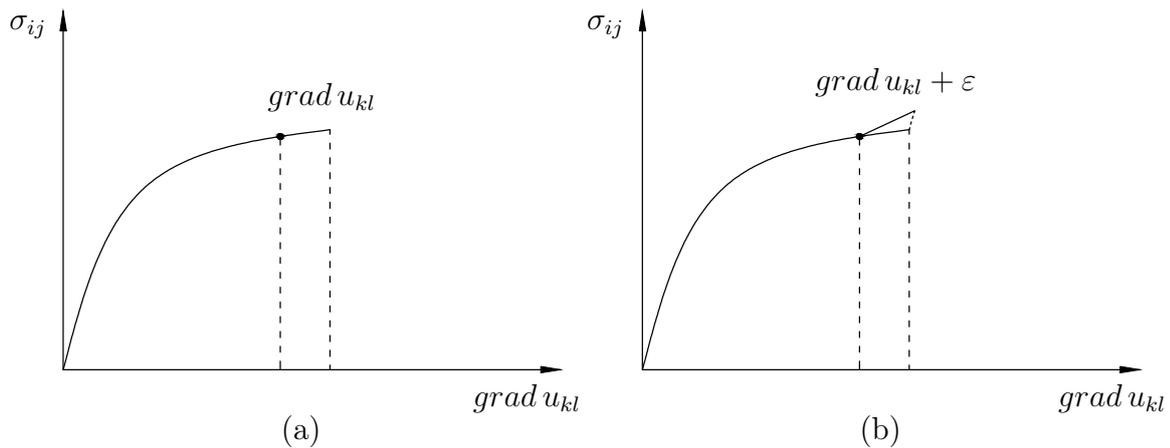


FIGURE 4.2 – Représentation du schéma numérique du calcul de la matrice tangente consistante : (a) chargement incrémenté ; (b) chargements perturbés.

Cette procédure est à effectuer en chaque incrément de temps et en chaque point d'intégration de Gauss de la discrétisation spatiale en éléments finis. Il est à noter que

le VER est à l'état d'équilibre au début et en fin de chaque incrément. Cette procédure numérique est schématisée sur la figure 4.2.

### 4.3 Validation du code de calcul multi-échelle FEM $\times$ DEM

#### 4.3.1 Problème élémentaire

On présente ici les résultats de modélisation FEM  $\times$  DEM obtenus pour des simulations d'essais élémentaires de type biaxial : compression verticale à vitesse de déformation  $\delta_1$  constante et contrainte horizontale  $\sigma_2$  constante en 2D. La face inférieure est bloquée verticalement et glissante dans le sens horizontal tandis que la face verticale à gauche est verticalement libre mais bloquée dans l'autre sens.

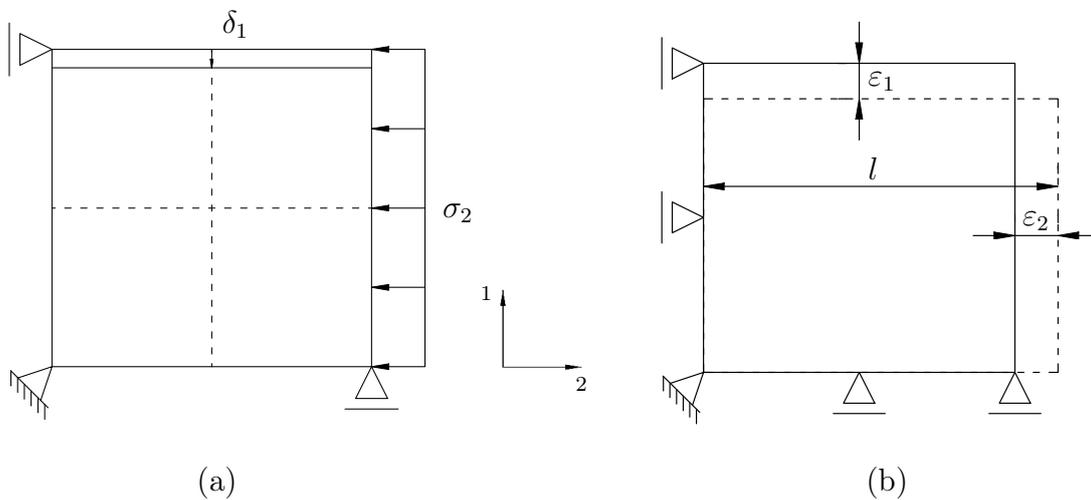


FIGURE 4.3 – Géométrie du problème élémentaire : biaxial en compression.

La figure 4.3.a donne la géométrie initiale du problème élémentaire considéré. À l'échelle macroscopique, les éléments finis Q8 avec quatre points de Gauss sont utilisés alors qu'à l'échelle microscopique, un assemblage granulaire constitué de grains est employé afin d'obtenir numériquement la loi constitutive. Les caractéristiques de ces VER ainsi que les paramètres de la loi de contact sont discutés dans la section 4.3.2 suivante.

#### 4.3.2 VER à l'échelle microscopique

Le choix d'un VER et notamment le nombre de grains jouent un rôle important dans un calcul multi-échelle de type FEM  $\times$  DEM. Il porte non seulement sur la qualité de la réponse mécanique, mais aussi sur le temps de calcul admissible. Pour chaque calcul élémentaire, on dispose en chaque point d'intégration un VER initialement identique à l'état de contrainte isotrope. Les étapes de préparation du VER sont décrites dans les sections 2.4.1 et 2.4.2 du chapitre 2.

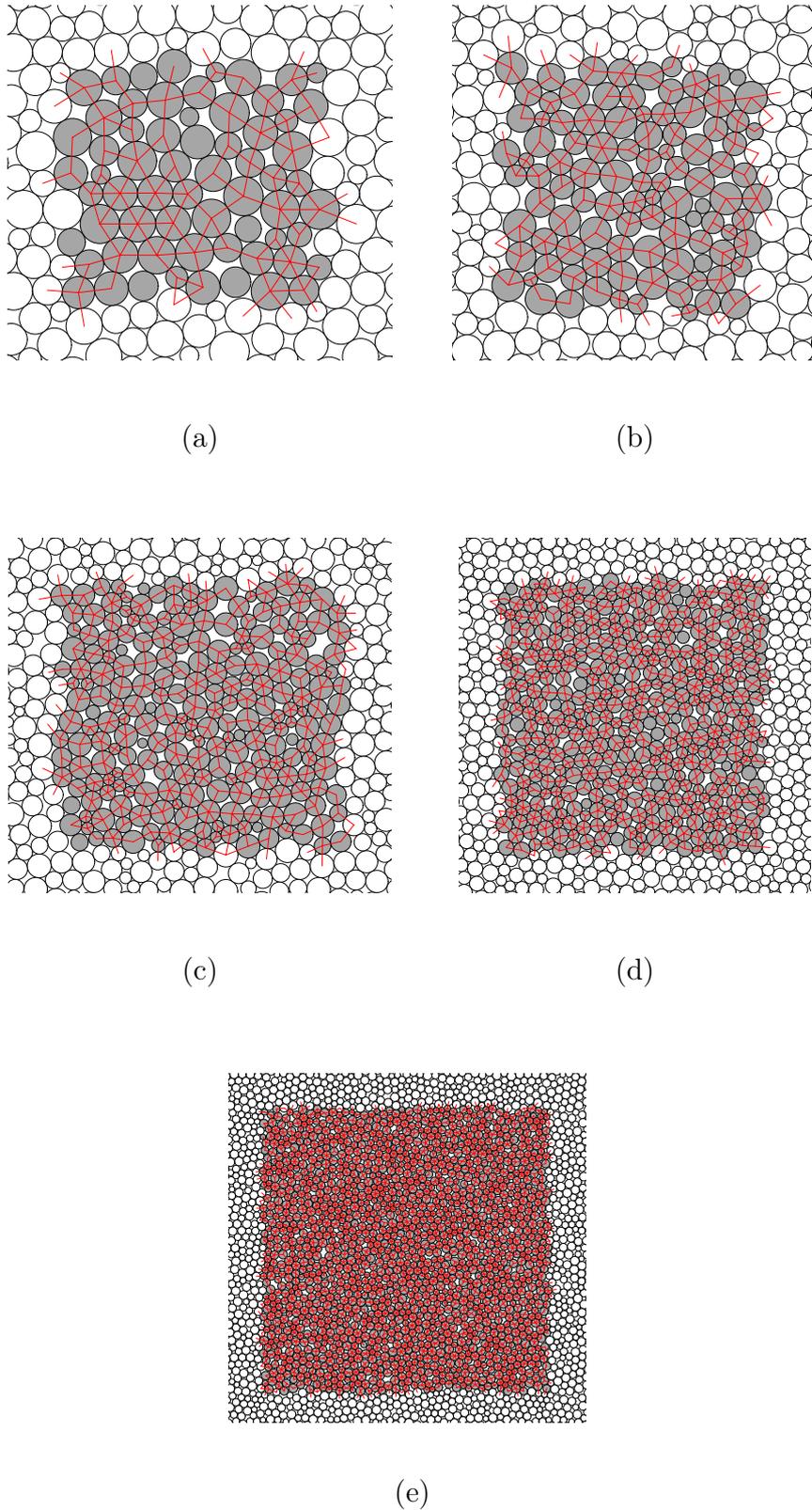


FIGURE 4.4 – Essais élémentaires : Différents VER utilisés à l'échelle microscopique : (a) VER64 ; (b) VER100 ; (c) VER225 ; (d) VER400 ; (e) VER1600. La taille des grains varie de façon aléatoire. Le rapport entre le rayon maximal et le rayon minimal est  $r_{max}/r_{min} = 0.5/0.3$  pour tous les VER.

Dans l'objectif de choisir un VER approprié, différents VER sont étudiés. Ces VER contiennent des grains en contact et à l'état initial très dense. Le nombre des grains du VER prendront les valeurs 64, 100, 225, 400 ou 1600 (figure 4.4). Leurs caractéristiques sont résumées dans le tableau 4.2.

TABLE 4.2 – Essais élémentaires : Caractéristiques des VER à l'échelle microscopique.

VER	No. des grains	No. des contacts	Indice de vide
VER64	64	131	0.186
VER100	100	208	0.189
VER225	225	475	0.189
VER400	400	843	0.189
VER1600	1600	3377	0.190

TABLE 4.3 – Essais élémentaires : Paramètres de la loi DEM de type 2.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n/(\sigma_0 \cdot \bar{a})$	Niveau de raideur	1000
$k_n/k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	1

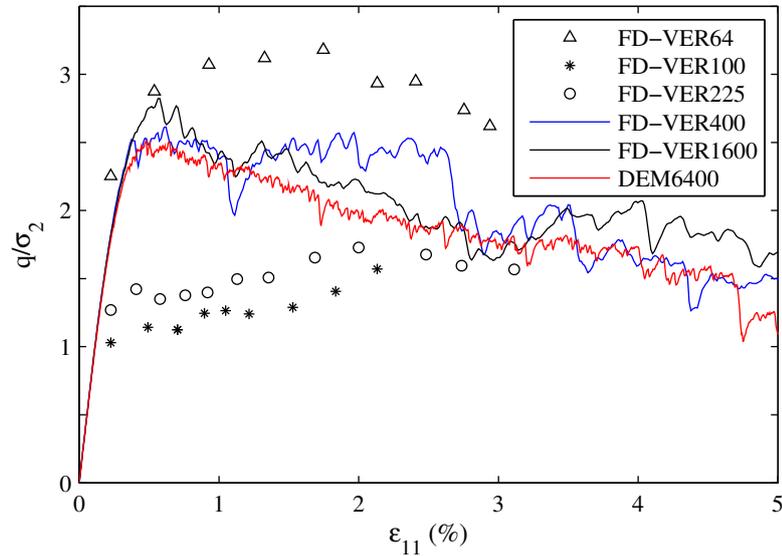
Les lois de contact utilisées sont celles de type 2 (contact avec frottement et cohésion attractive pure) présentées dans le chapitre 2. Au début du calcul, tous les contacts sont collés, la rupture des liens cohésifs est possible si le VER est soumis en grande déformation. Les paramètres des lois de contact utilisées sont résumés dans le tableau 4.3.

### 4.3.3 Résultats et discussions

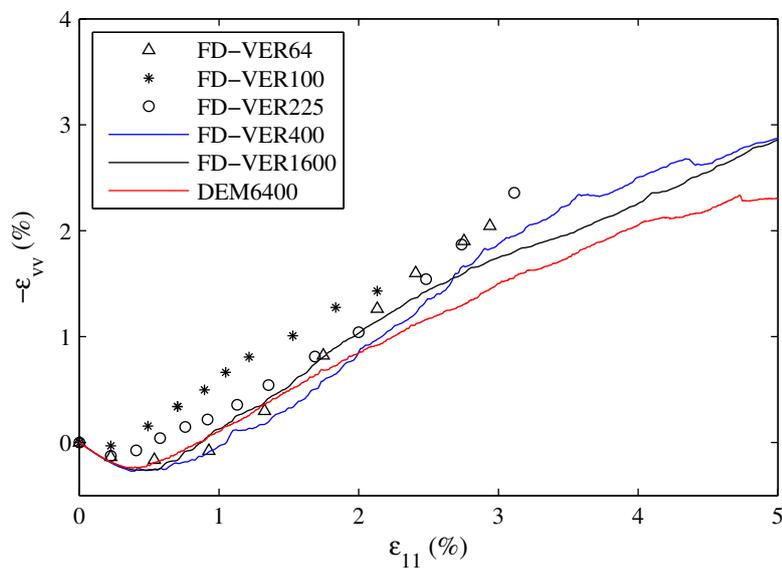
#### 4.3.3.1 Choix du VER approprié

Dans les essais élémentaires, le maillage se compose d'un seul ou de quatre éléments finis Q8, l'échantillon se déforme d'une manière homogène (voir la figure 4.3.a). La contrainte verticale  $\sigma_1$  est calculée par  $\sigma_1 = \sum f_i/l$  avec  $\sum f_i$  est la somme des forces nodales à la face supérieure ; la déformation volumique est déterminée par la déformation verticale  $\varepsilon_1$  et horizontale  $\varepsilon_2$  :  $\varepsilon_v = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ . Ici, la convention des signes de la mécanique des sols est utilisée : en compression ( $\sigma > 0, \varepsilon > 0$ ) ; en extension ( $\sigma < 0, \varepsilon < 0$ ).

On présente sur le graphique 4.5 les réponses des différents calculs. Comme on a présenté dans le chapitre 2, à partir d'un nombre de grains suffisamment grand, les réponses biaxiales DEM pur convergent vers une solution finale avec un pic de contrainte à une déformation verticale  $\varepsilon_{11} = 0.6\%$  et puis descendent vers un plateau qui est l'état



(a)



(b)

FIGURE 4.5 – Calcul FEM × DEM d'un essai élémentaire de 1 élément Q8 avec différents VER à l'échelle microscopique : (a) la contrainte déviatorique  $q/\sigma_2$  versus la déformation axiale  $\varepsilon_{11}$  ; (b) la déformation volumique  $\varepsilon_{vv}$  versus la déformation axiale  $\varepsilon_{11}$ .

critique du matériau. En comparaison avec le calcul DEM pur de 6400 grains, on constate que les résultats FEM  $\times$  DEM sont les plus raisonnables avec les VER400 ou VER1600. On notera que les calculs avec VER64, VER100, VER225 se sont bloqués à cause d'un problème de convergence du processus itératif Newton-Raphson.

Dans ces trois cas (VER64, VER100, VER225), le nombre de particules dans chaque VER est trop faible ce qui perturbe la contrainte obtenue en fin de chaque itération, et perturbe par conséquent les modules de la matrice tangente consistante : des grandes fluctuations dans les valeurs de modules ont été observées à ce moment. Ces résultats montrent qu'il existe un nombre minimal de grains dans le VER pour que ce dernier puisse être utilisé comme une loi de comportement équivalente, utilisable par une simulation en élément finis. Cette conclusion est logique, parce que un VER contenant très peu de grains ne peut pas représenter correctement les propriétés du milieu, et le comportement macroscopique de ce milieu n'est pas bien déterminé et n'est pas unique ; il n'est donc pas représentatif. Néanmoins, l'utilisation de très grands nombres de grains peut poser deux problèmes : premièrement, cela augmente énormément le temps de calcul ; deuxièmement, si on utilise un VER trop grand, le phénomène de localisation peut être observé au niveau du VER, ce qui n'est pas attendu. Dans ce cas, la propriété élémentaire du VER sera perdue.

Le tableau 4.4 donne une comparaison en terme du temps de calcul entre les calculs multi-échelle avec différents VER à l'échelle microscopique. On voit que le temps de calcul est relativement élevé même avec un calcul élémentaire très simple. Cela vient du fait du temps consacré à la détermination de la matrice tangente consistante par la méthode de perturbation. Pour chaque itération, ce processus nécessite cinq calculs DEM différents dont un incrément et quatre perturbations.

TABLE 4.4 – Essais élémentaires : Comparaison en terme du temps de calcul.

VER	Temps de calcul FEM $\times$ DEM (h)	Blocage	Remarque
VER64	3.2	$\times$	arrêté à $\varepsilon_{11} = 2.9\%$
VER100	2.8	$\times$	arrêté à $\varepsilon_{11} = 2.2\%$
VER225	3.9	$\times$	arrêté à $\varepsilon_{11} = 3.1\%$
VER400	5.2		
VER1600	17.4		

Vu les comparaisons, il est nécessaire de choisir le VER400 ou VER1600. À cause de la limitation de la puissance de calcul jusqu'à présent, le VER400 semble le VER le plus approprié dans le contexte de calcul à double échelle FEM  $\times$  DEM présenté dans ce travail. Ce n'est pas un choix attrayant, mais il semble un bon compromis entre la vitesse de calcul et la qualité du résultat.

### 4.3.3.2 Blocage et corrections de la matrice tangente consistante

Les calculs élémentaires sont maintenant étendus à l'utilisation quatre éléments Q8 pour la discrétisation spatiale (figure 4.3). Suite à la conclusion sur le VER approprié tirée au-dessus, on emploie à l'échelle microscopique des VER400, initialement identique dans tous les points d'intégrations.

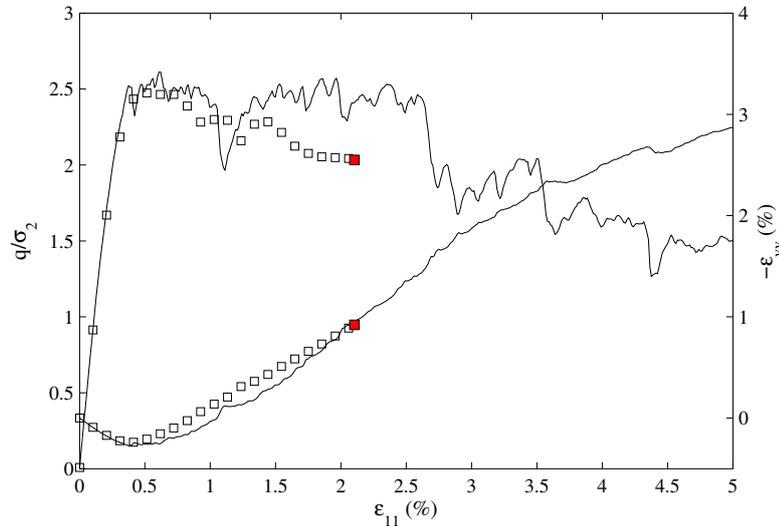


FIGURE 4.6 – Calcul FEM × DEM : l'utilisation de la matrice tangente consistante. Le maillage est de 1 élément (trait continu), et de 4 éléments (trait carré).

Afin de mettre en évidence l'influence des choix numériques, on propose d'analyser la réponse mécanique en contrainte en fonction de la déformation verticale : contrainte déviatoire normalisée  $q/\sigma_0$  versus déformation verticale ( $\varepsilon_{11}$ ). La première série de courbe (figure 4.6) concerne des modélisations mettant œuvre la matrice tangente consistante associée à un maillage contenant un (courbe noire continue) ou quatre (courbe noir carré) éléments Q8. La première remarque est que le comportement obtenu est typique d'un comportement observé à l'essai triaxial drainé sur un échantillon de sable dense et sec cimenté : un pic de contrainte est obtenu autour de 0.5% (angle de frottement interne d'environ 25 degrés) ; l'évolution de la déformation volumique montre tout d'abord une phase contractante suivie d'une phase dilatante après un minimum atteint pour 0.4% de déformation verticale. Le calcul a été volontairement stoppé à 5% de déformation (courbe noire continue), sauf pour la modélisation sur le maillage à quatre éléments Q8 qui s'est stoppée d'elle-même suite à un problème de convergence du processus itératif de Newton-Raphson. Ce problème de convergence est rencontré lorsque la matrice tangente consistante est calculée dans une phase de radoucissement très prononcée (chute brutale de contrainte). Une tentative pour surmonter ce problème est de remplacer cette matrice en utilisant, par exemple, une matrice auxiliaire élastique. Cette matrice auxiliaire élastique est définie à partir de la première partie de la courbe (zone du rectangle pointillé dans la figure 4.7).

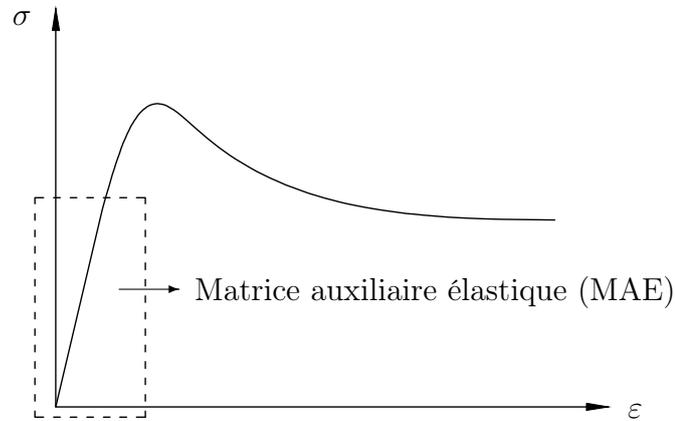


FIGURE 4.7 – Définition de la matrice auxiliaire élastique.

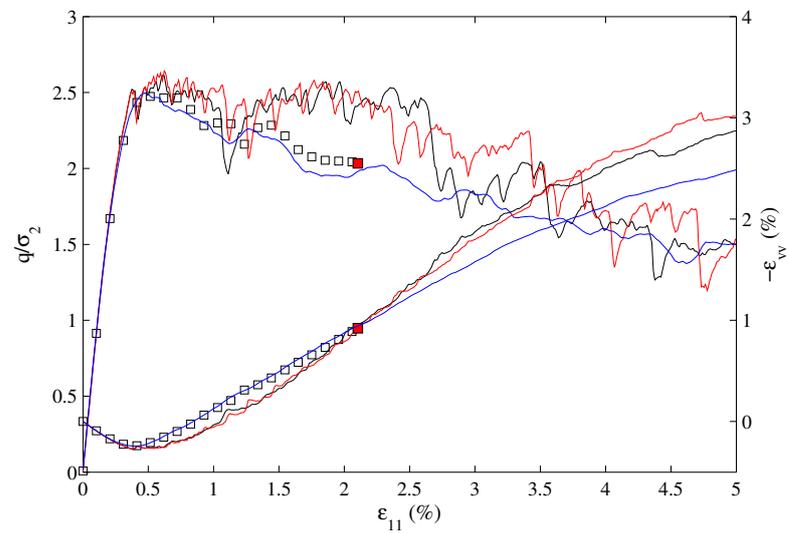


FIGURE 4.8 – Calcul  $FEM \times DEM$ , l'utilisation de la matrice tangente consistante : le maillage est de 1 élément (noir), et de 4 éléments (trait carré) ; et de la matrice auxiliaire élastique : le maillage est de 1 élément (rouge), et de 4 éléments (bleu).

Sur la figure 4.8, on montre le comportement simulé via l'approche FEM × DEM lorsque l'on utilise une matrice auxiliaire élastique (constante) en lieu et place de la matrice tangente consistante. Plusieurs constatations sont possibles : (i) le comportement mécanique observé est semblable à celui calculé avec la matrice tangente consistante, (ii) aucun problème de convergence du processus itératif de Newton-Raphson n'a été observé sur la plage de déformation imposée (5% de déformation verticale). Pour les petites déformations (en début de calcul), cette matrice est tangente au comportement du matériau dans la zone élastique. Après 0.5% de déformation, la matrice élastique n'est plus représentative du comportement du matériau, rendant la convergence du processus de Newton-Raphson plus longue dans la mesure où un plus grand nombre d'itérations est nécessaire pour atteindre la solution. Néanmoins, le coût du calcul de la matrice tangente consistante étant relativement important (différenciation numérique par calcul DEM), ces premiers résultats semblent indiquer qu'il est plus "rentable" de travailler avec une matrice auxiliaire élastique.

TABLE 4.5 – MTC/MAE : Comparaison en terme du temps de calcul.

Type de l'opérateur tangent	Temps de calcul FEM × DEM (h)	Blocage	Remarque
MTC 1 élément	5.2		
MAE 1 élément	5.0		
MTC 4 élément	8.1	×	arrêté à $\varepsilon_{11} = 2.5\%$
MAE 4 élément	16.2		

## 4.4 Simulation des essais biaxiaux en compression

### 4.4.1 Géométrie et conditions aux limites

Pour mettre en évidence les capacités de cette nouvelle approche, on présente d'abord des modélisations multi-échelle d'essais biaxiaux en compression. Le maillage initial du problème ainsi que les conditions aux limites sont systématiquement donnés par la figure 4.9. L'échantillon granulaire est spatialement discrétisé à l'aide d'éléments Q8 (élément à 8 nœuds). Le nombre de points d'intégration de Gauss est choisi à quatre pour chaque élément Q8. Ce choix, qui consiste à travailler avec un degré d'interpolation strictement inférieur au nombre de nœuds, permettant d'améliorer la convergence du schéma numérique et d'éviter des problèmes de blocage venant de la discrétisation spatiale.

Dans cette étude, comme dans certaines expériences (Desrues [60], Desrues et Viggiani [69]), l'échantillon a un élanement de 2. À l'échelle macroscopique, trois différents types de maillage sont utilisés (figure 4.9). Le premier se compose de 128 éléments Q8 carrés, le deuxième de 64 éléments Q8 rectangulaires et le troisième est un maillage non

structuré de 106 éléments Q8. Les conditions aux limites sont identiques pour trois simulations. Une contrainte latérale constante  $\sigma_2 = \sigma_0$  est appliquée sur la face à gauche du maillage alors que sur le côté droite, les nœuds ne peuvent que déplacer verticalement. Un déplacement  $\delta_{(a,b,c)}$  est imposé sur la face supérieure. Une lubrification horizontale est appliquée sur la face inférieure. Ces conditions aux limites sont identiques à celles utilisées, par exemple, dans certaines expériences 2D (Richefeu *et al.* [151]).

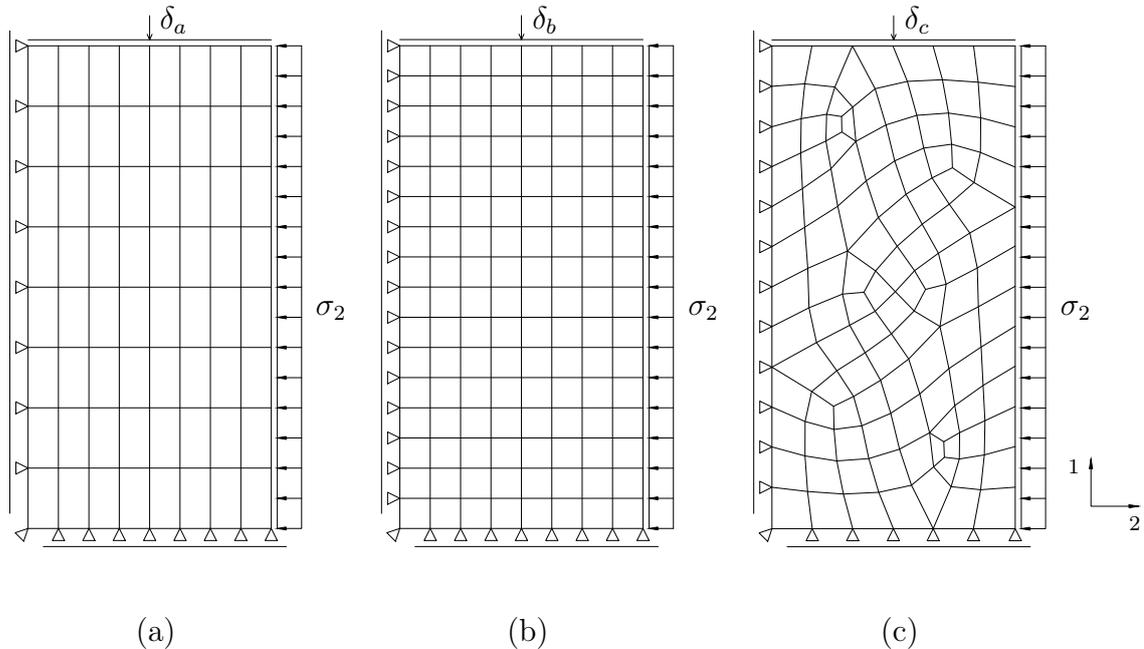


FIGURE 4.9 – Essais biaxiaux : Représentation des différents maillages du problème et les conditions aux limites : (a) FD64 - FEM  $\times$  DEM avec 64 éléments; (a) FD128 - FEM  $\times$  DEM avec 128 éléments; (a) FD106 - FEM  $\times$  DEM avec 106 éléments.

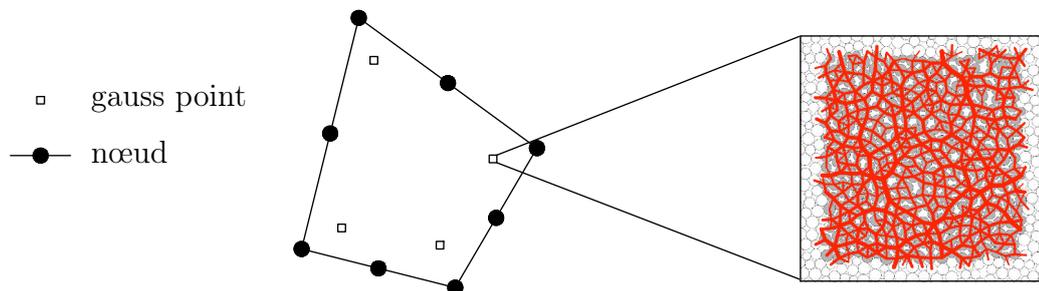


FIGURE 4.10 – Essais biaxiaux : Élément Q8 avec 4 points d'intégration de Gauss; un VER de 400 grains est disposé en chaque point de Gauss.

Ces essais biaxiaux sont menés, à partir d'un état de contrainte isotrope, en appliquant un chargement en déplacement  $\delta$  sur la face supérieure jusqu'à la déformation

axiale voulue. Durant cette étape, la contrainte latérale est maintenue constante  $\sigma_2 = \sigma_0$ .

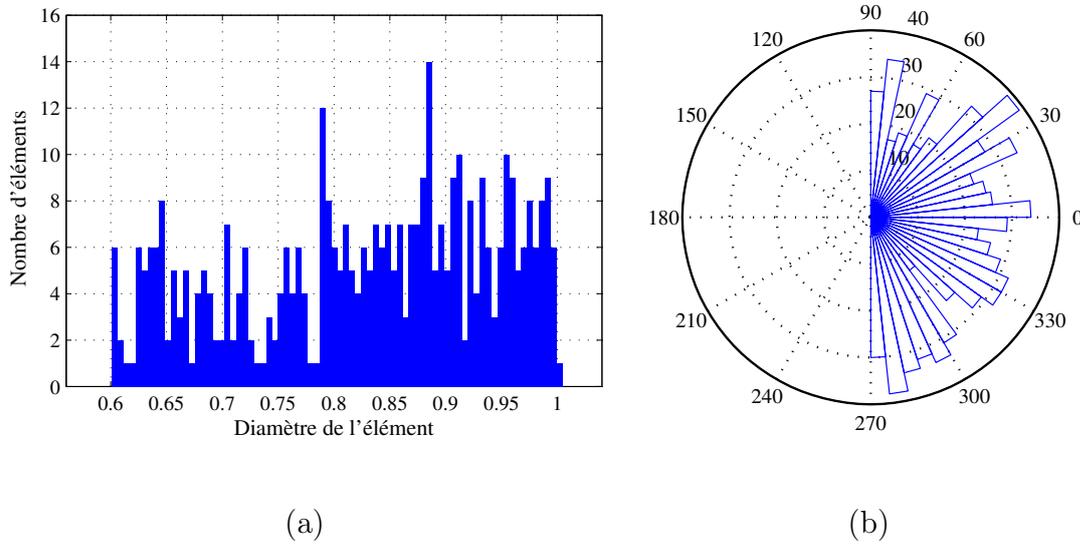


FIGURE 4.11 – Essais biaxiaux : VER 400 grains utilisé (a) Distribution de tailles de grains et (b) les orientations du contact.

À l'échelle microscopique, un VER initialement identique de 400 particules circulaires avec conditions aux limites périodiques et les lois de contact de type 1 et type 2 sont utilisées en chaque point d'intégration. La figure 4.11 (gauche) illustre la distribution de tailles de grains. L'indice des vides du VER est de 0,19. Cette valeur est suffisante pour représenter un assemblage dense de grains même si leurs tailles sont distribuées de façon aléatoire (voir la figure 4.11). On présente ensuite la distribution des orientations du contact (figure 4.11 droite). On constate que cette distribution des interactions n'est pas homogène et le VER n'est donc pas géométriquement parfaitement isotrope.

#### 4.4.2 Paramètres microscopiques

Les paramètres du modèle microscopique mis en jeu sont maintenant présentés dans le tableau ci-dessous :

TABLE 4.6 – Essais biaxiaux : Paramètres du modèle microscopique (DEM) de type 2.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (\sigma_0 \cdot \bar{a})$	Niveau de raideur	1000
$k_n / k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	1

### 4.4.3 Résultats numériques

#### 4.4.3.1 Réponses macroscopiques

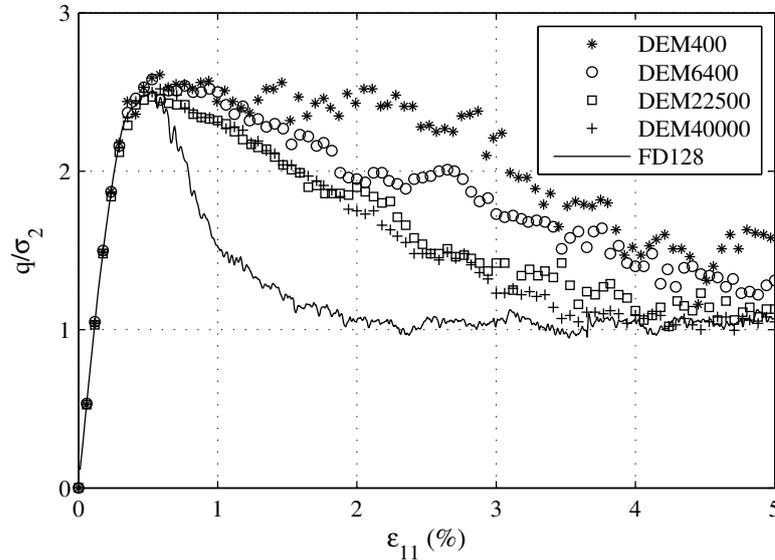


FIGURE 4.12 – Essais biaxiaux : Réponse macroscopique. FEM  $\times$  DEM de 128 éléments avec DEM de différents nombres de particules.

Les comportements macroscopiques obtenus par les calculs FEM  $\times$  DEM sont montrés sur les figures 4.12 et 4.13. Ces figures présentent la contrainte déviatorique normalisée par la contrainte latérale  $q/\sigma_2 = (\sigma_1 - \sigma_2)/\sigma_2$  en fonction de la déformation axiale  $\varepsilon_{11}$  et donnent également une comparaison entre ces résultats et ceux obtenus par des calculs DEM purs.

La première remarque est que le comportement obtenu est typique d'un comportement observé à l'essai triaxial drainé sur un échantillon dense de sable cimenté ou un grès à faible résistance : à partir de l'état de contrainte isotrope ( $q = 0$ ), la contrainte déviatorique  $q$  augmente jusqu'à un pic correspondant à la résistance maximale du matériau. En plus, on peut observer un comportement dilatant jusqu'au moment où  $q$  tend vers un plateau.

Il est remarquable que quelle que soit la méthode numérique utilisée (FEM  $\times$  DEM avec différents maillages ou pur DEM avec différents nombres de grains), on observe que leur phase pré-pic sont presque les mêmes ( $\varepsilon_{11} < 0.3\%$ ). Par la suite, on obtient une phase de radoucissement de l'échantillon (la diminution de la contrainte) jusqu'au moment où la contrainte déviatorique  $q$  atteint un plateau dans les simulations FEM  $\times$  DEM ainsi que pour les calculs DEM purs dès que le nombre de particules est assez grand ( $> 22500$ ). Ce radoucissement montre une dépendance de la réponse post-pic vis-à-vis de la méthode utilisée. Néanmoins, pour chaque approche numérique, FEM  $\times$  DEM d'une part et DEM pur d'autre part, les parties finales de différentes courbes

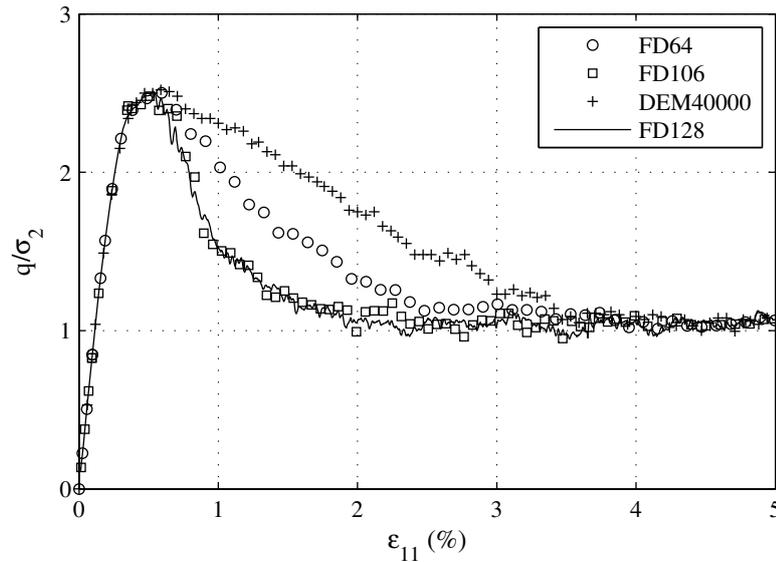


FIGURE 4.13 – Essais biaxiaux : Réponse macroscopique. FEM × DEM de différents types de maillage avec DEM 40000 particules.

semblent tendre vers une courbe unique, lorsque le nombre d'éléments est augmenté, *i.e.* nombre de  $Q8$  à la FEM × DEM et le nombre de grains de DEM pur. Ceci est cohérent avec les observations des études antérieures de Chambon *et al.* [35] et Matsushima *et al.* [113].

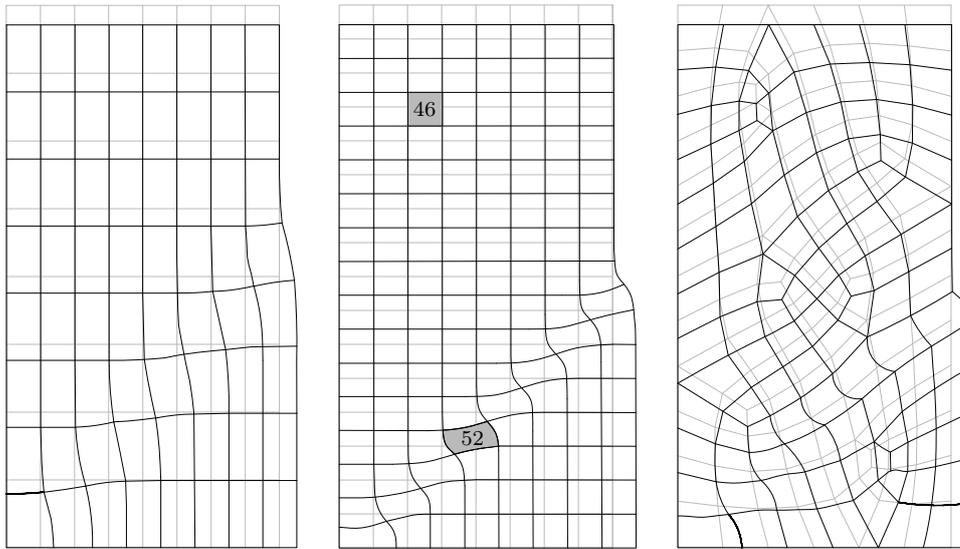
Le radoucissement (la réponse post-pic de l'échantillon,  $0.6\% < \varepsilon_{11} < 3.5\%$ ) est plus prononcé dans les calculs FEM × DEM que dans les calculs DEM purs pour une raison principale et *importante* : la localisation de la déformation. Dans les essais expérimentaux, la localisation de la déformation se produit (Bésuelle *et al.* [15], Desrues et Viggiani [69]), et la recherche d'une modélisation correcte a été le sujet de débats passionnés depuis trois décennies.

On observe ici, sans surprise, que la localisation de la déformation se produit dans les calculs multi-échelle, comme dans les expériences. Dans la figure 4.14, la distorsion locale du maillage montre clairement une bande de cisaillement dans chaque échantillon, confirmé sur la figure 4.15 utilisant la carte du second invariant du tenseur de déformations totales pour représenter la localisation de la déformation. Les bandes de cisaillement sont similaires dans tous les trois cas des essais biaxiaux avec une orientation environ de  $44^\circ$  à  $47^\circ$  mais leur largeur dépend des dimensions des éléments utilisés. Dans tous les trois calculs multi-échelle FEM × DEM, les bandes de cisaillement ont commencé du point au coin de la structure puisque ce point est bloqué dans tous les deux sens, il représente donc un point particulier de la structure considérée. En raison de la localisation de la déformation, la déformation se concentre dans une zone nommée bande de cisaillement (Desrues et Chambon [65]) ; un incrément donné en déplacement sur la surface de limite ne provoque pas une déformation globale de l'ensemble de l'échan-

tillon, mais par un procédé beaucoup plus rapide de la déformation de cisaillement dans la bande, c'est la raison pour laquelle on constate un radoucissement plus rapide dans le cas du calcul FEM  $\times$  DEM (qui est un calcul d'une structure) que dans le cas du calcul du VER en DEM pur. Pour les réponses FEM  $\times$  DEM, le pic de contrainte est associé à une localisation "soudaine" de la déformation dans la bande de cisaillement. On remarquera que pour les réponses FD106 et FD128, les courbes  $(q, \varepsilon_{11})$  sont presque superposées tandis que la courbe FD64 montre une phase de radoucissement assez différente ; ces calculs diffèrent les uns des autres par la forme des éléments et leur distribution, mais en moyenne les tailles des éléments des calculs FD106 et FD128 sont proches, alors que celle du FD64 est sensiblement plus grande ; ceci explique cela, car la taille des éléments joue un rôle essentiel dans l'intensité de la déformation qui s'y concentre pour un même incrément de déplacement aux limites.

Il est bien connu que la localisation prédite par un calcul FEM ordinaire (*i.e. non régularisé, voir plus loin*) dépend du maillage (Matsushima *et al.* [113]). Cette dépendance est clairement montrée sur les figures 4.14 et 4.15. Dans ce cas, une régularisation du problème est nécessaire. Une voie pour une telle régularisation consiste à introduire une longueur interne caractéristique du matériau, comme le permet par exemple le modèle de second gradient développé par Chambon *et al.* [35], Chambon *et al.* [36], Matsushima *et al.* [113]. Néanmoins, cette question ne sera pas traitée dans le cadre de ce travail, elle constitue donc une perspective majeure pour les travaux suivants.

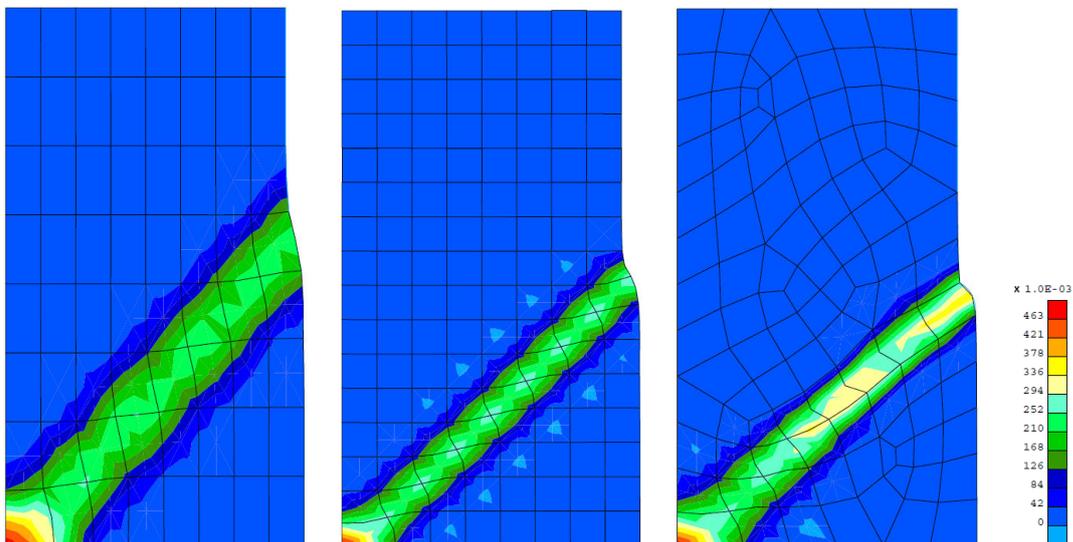
Des bandes de cisaillement sont également observées dans les calculs DEM purs mais la déformation ne localise pas soudainement, les bandes se développent progressivement, comme ce qui est observé par Szarf *et al.* [166]. La figure 4.16 montre la carte du second invariant du tenseur de déformation dans des échantillons de tailles différentes, pour  $\varepsilon_{11} = 5\%$ . Le tenseur de déformation local est calculé pour triplet de grains (la triangulation Delaunay) en utilisant une approche suggérée par Calvetti *et al.* [27]. Alors que le VER de 400 grains laisse seulement deviner des bandes de cisaillement, la localisation de la déformation en bandes peut être vue dans l'échantillon de 6400 grains. Ces bandes sont encore plus évidentes dans le calcul DEM sur un échantillon de 22500 et de 40000 grains. On peut remarquer que même si les conditions aux limites périodiques (CLP) sont utilisées dans les calculs DEM purs, on observe quand même la localisation de la déformation. Elle n'est donc pas empêchée par les CLP. Cependant, elles peuvent être influencées par ces conditions : en effet, les bandes de cisaillement doivent respecter la condition de périodicité, ce qui est artificiel et par conséquent non réaliste du point de vue de l'orientation et de la distribution des bandes. Pour cette raison, aucune tentative n'est faite pour utiliser les orientations des bandes de cisaillement microscopique dans un processus "upscaling" vers l'échelle macroscopique.



(a) 64 éléments

(b) 128 éléments

(c) 106 éléments

FIGURE 4.14 – Essais biaxiaux : Structure déformée à  $\varepsilon_{11} = 3\%$ .

(a) 64 éléments

(b) 128 éléments

(c) 106 éléments

FIGURE 4.15 – Essais biaxiaux : Iso valeur du second invariant du tenseur de déformation à  $\varepsilon_{11} = 3\%$ .

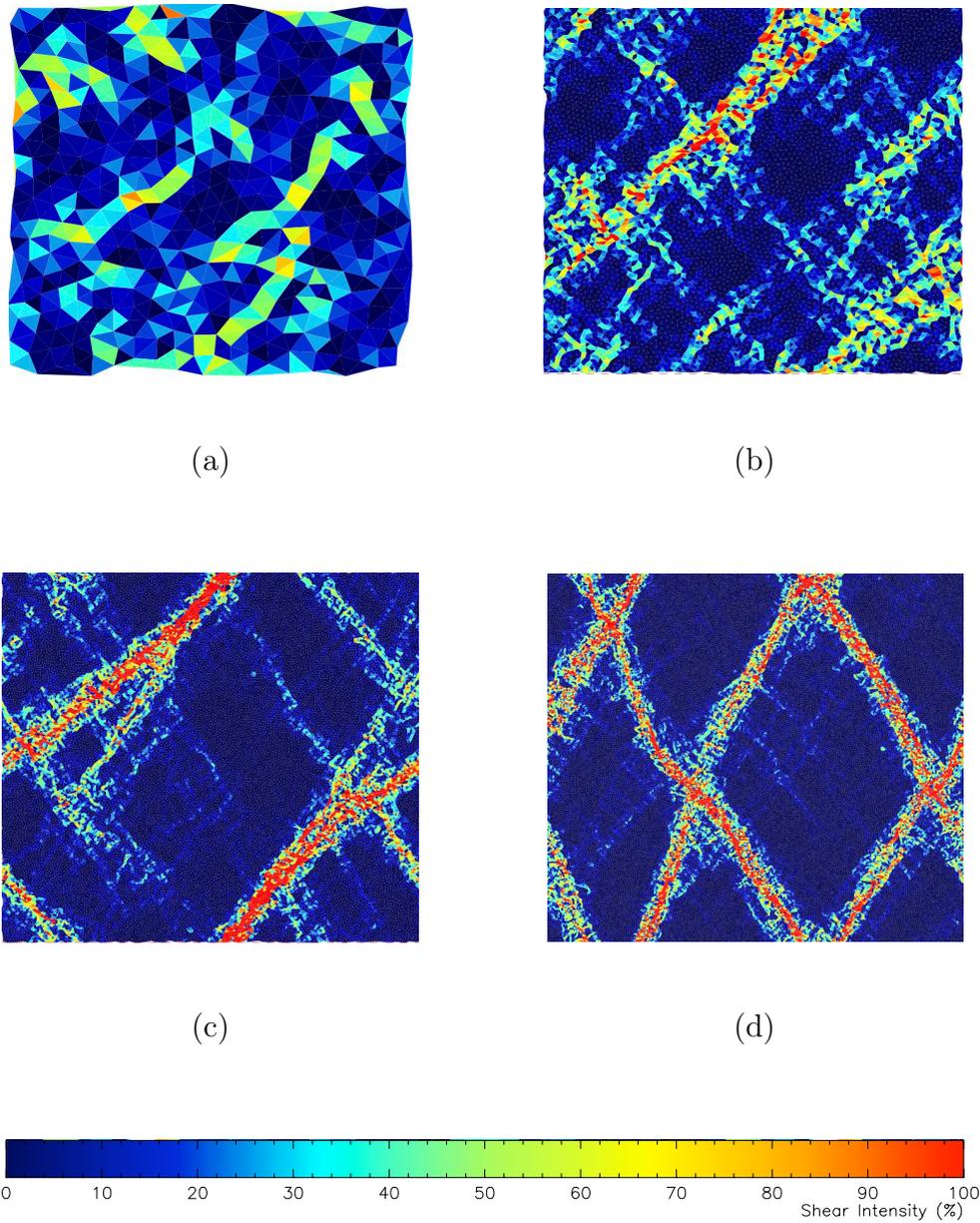


FIGURE 4.16 – Bandes de cisaillement dans les calculs biaxiaux par DEM purs à vitesse de déformation imposée constante et pression latérale constante (voir la section 2.4.4.1 pour plus de détails). Ces images utilisent la carte du second invariant du tenseur de la déformation pour représenter la localisation de la déformation : (a) DEM400, (b) DEM6400, (c) DEM22500, (d) DEM40000.

#### 4.4.3.2 Analyse microscopique

Dans l'objectif de mettre en évidence les avantages de notre approche FEM × DEM, l'essai avec un maillage de 128 éléments (figure 4.9.b) est choisi pour effectuer des analyses microscopiques. On s'attache à étudier les évolutions microscopiques des éléments numérotés 46 et 52 (figure 4.14). L'élément 46 se trouve à l'extérieur (et loin) de la bande, *dans la zone homogène*, alors que l'élément 52 est à l'intérieur de la bande.

#### Évolution des microstructures

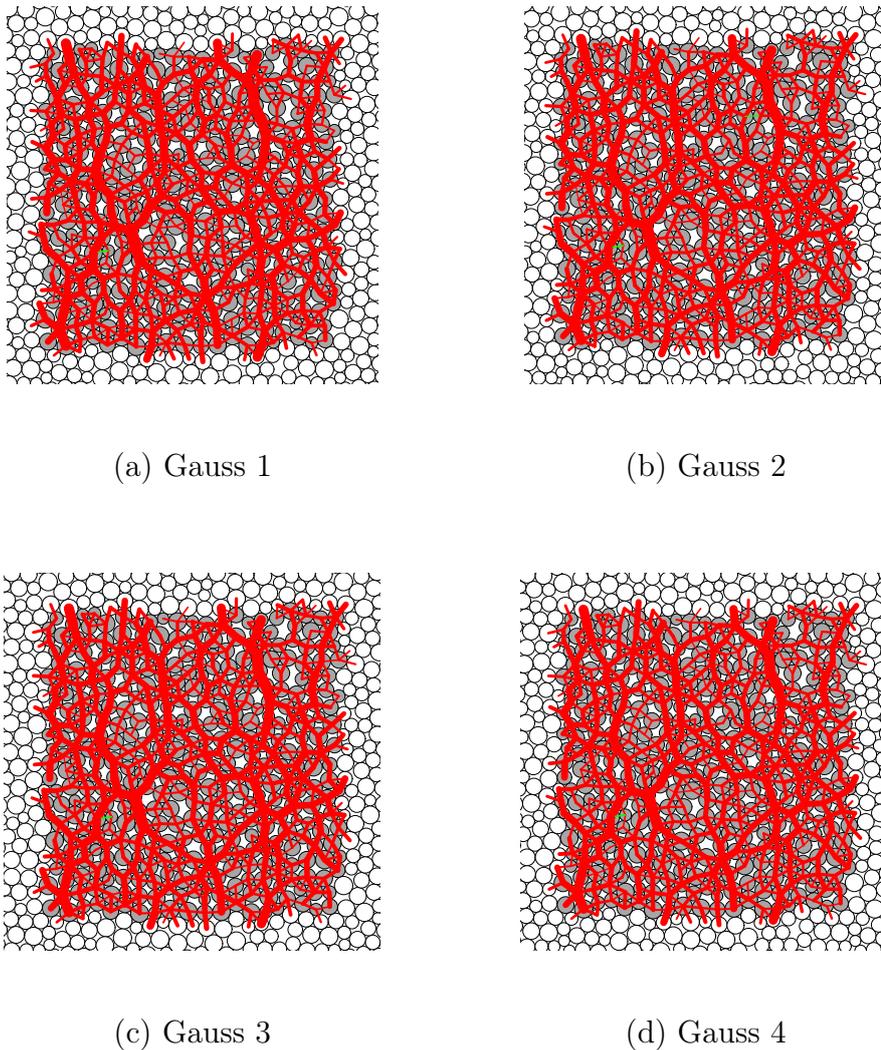


FIGURE 4.17 – Essais biaxiaux : Évolution des microstructures des points de Gauss de l'élément 46. L'épaisseur du trait est proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective, c'est-à-dire intacte) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.

Les figures 4.17 et 4.18 montrent les VER à l'état déformé. Comme on a choisi, tous les points de Gauss du maillage ont une même configuration initiale (figure 4.10), mais à

l'état déformé, leur forme et leurs caractéristiques deviennent différentes, éventuellement extrêmement différentes comme on le verra. Les VER associés aux points de Gauss de l'élément 46 restent semblables à la configuration initiale, avec un ou deux contacts ayant perdu la cohésion. Bien entendu, l'élément 52 soumis à une déformation complexe (compression et cisaillement simultanés) en chacun des quatre VER associés aux quatre points d'intégration de l'élément, montre une forte dégradation de la cohésion au niveau des contacts. Ainsi, dans la zone de localisation, on constate que la génération des décohésions intergranulaires est très marquée.

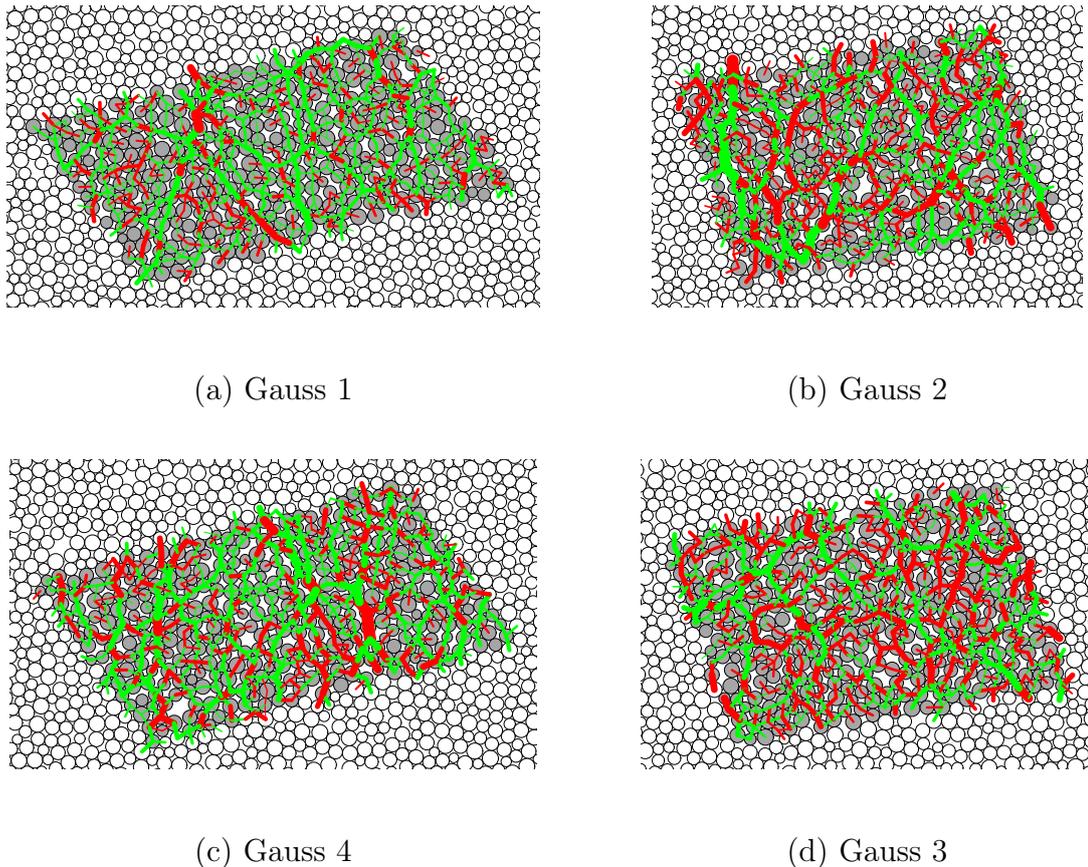


FIGURE 4.18 – Essais biaxiaux : Évolution des microstructures des points de Gauss de l'élément 52. L'épaisseur du trait est proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective, c'est-à-dire intacte) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.

Il est intéressant d'analyser les différences de comportement des VER situés dans les éléments 46 et 52, et de comparer ces prédictions numériques avec les observations expérimentales. En effet, les expériences montrent que dans les milieux granulaires frottant-cohésifs comme les grès, lorsque la déformation se localise en bande de cisaillement, le matériau à l'intérieur de la bande s'endommage avec une forte augmentation de la densité locale des fissures intergranulaires (micro-cracking) (Bésuelle *et al.* [15], Ord *et al.* [140]). Situé à l'intérieur de la bande, le VER de l'élément 52 montre clairement la

dégradation du matériau. En comparaison avec le matériau à l'extérieur de la bande (*i.e.* VER de l'élément 46), on constate une différence importante en terme des fissures intergranulaires et de la forme déformée.

TABLE 4.7 – Essais biaxiaux : nombre de contacts à l'état déformé.

Element	Etat initial		Etat déformé	
	ncont	ncont collés	ncont	ncont collés
Elément 46a	843	843	813	812
Elément 52a	843	843	640	196

Le tableau 4.7 montre clairement la forte évolution du réseau des contacts dans la bande de cisaillement : à l'état déformé les nombres de contacts dans les VER des éléments 46 et 52 sont respectivement 812 et 640 contacts (par rapport à la valeur initiale de 843 contacts). En plus, le VER 52 présente une forte destruction de la cohésion locale, avec seulement 196 sur 640 contacts ayant la cohésion (ce chiffre pour le VER associé à l'élément 46 est 812/813 contacts). Donc, tous les VER présentent des ruptures du lien cohésif, mais cela est considérablement plus important dans les éléments à l'intérieur de la bande de cisaillement.

### Évolution des contraintes

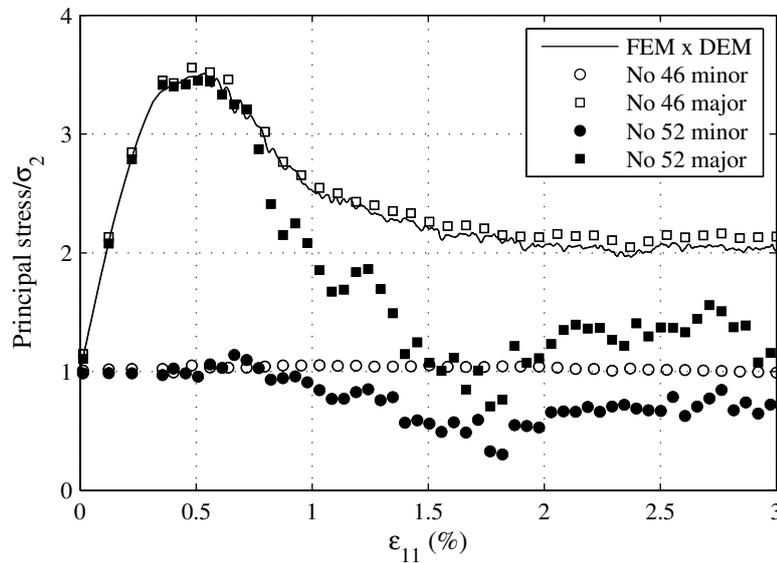


FIGURE 4.19 – Essais biaxiaux : Contraintes principales (mineure et majeure) dans un point de Gauss des éléments 46 et 52 versus la déformation verticale globale  $\varepsilon_{11}$ .

La figure 4.19 montre l'évolution des contraintes principales (mineure et majeure) versus la déformation axiale globale  $\varepsilon_{11}$  pour un point de Gauss choisi dans les éléments

étudiés 46 et 52. Pour la contrainte principale majeure, on observe que leurs évolutions s'éloignent une fois la résistance maximale de cisaillement est atteinte ( $\varepsilon_{11} \approx 0.6\%$ ). La variation de contraintes est plus lisse dans l'élément 46 et plus bruitée dans l'élément 52. Dans ces deux éléments, une réduction des contraintes est constatée, ce qui est cohérent mais doit être souligné : la dégradation du matériau reste concentrée dans la bande de cisaillement, mais la bande traversant l'échantillon, elle constitue un mécanisme de dégradation de la structure – échantillon et provoque une chute de sa résistance globale : il en résulte une chute de contrainte dans l'ensemble de l'échantillon.

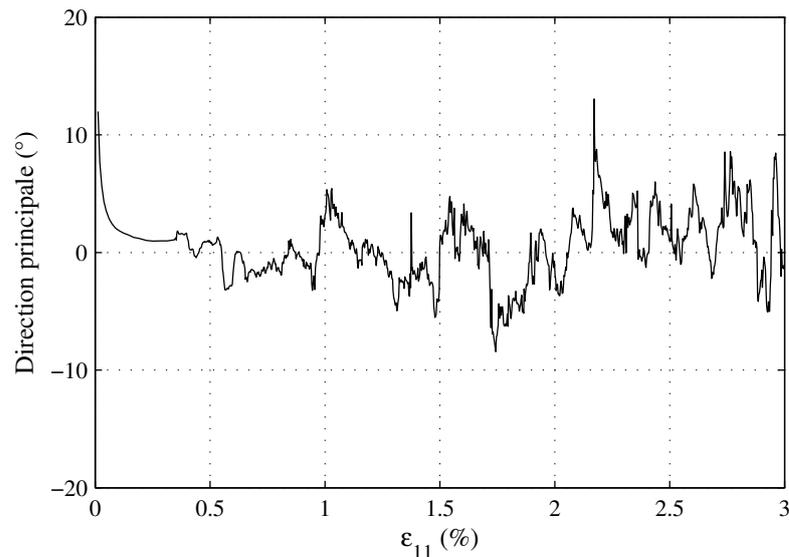


FIGURE 4.20 – Essais biaxiaux : Direction principale de la contrainte dans un point de Gauss de l'élément 52. L'axe horizontale est la déformation verticale globale  $\varepsilon_{11}$ .

Au début du calcul, la structure considérée est homogène, les contraintes principales sont alors les contraintes horizontale et verticale. L'homogénéité est perdue lorsque la localisation se produit dans l'échantillon. Après le pic à  $\varepsilon_{11} \approx 0.6\%$ , la contrainte principale mineure dans l'élément 52 varie tandis que la contrainte principale mineure dans l'élément 46 reste presque constante, et presque égale à la valeur contrainte principale mineure initiale. Simultanément, des rotations des axes principaux des contraintes sont constatées dans l'élément 52, mais non dans l'élément 46.

Dans la bande de cisaillement, non seulement les valeurs des contraintes principales mais aussi les directions des contraintes principales (voir la figure 4.20) montrent des valeurs qui paraissent erratiques. Il est clair que la bande de cisaillement est la seule partie active de l'échantillon une fois que la localisation se produit. Dans cette zone active, le processus de déformation est intense et produit de grandes réorganisations de la microstructure avec la diffusion de la contrainte locale. Il est clair aussi que la bande, traversant l'échantillon entièrement, transmet nécessairement la totalité de la force axiale de haut en bas à chaque instant. Les fluctuations observées au niveau d'un

point de Gauss de l'élément 52 se produisent aussi dans les autres éléments de la bande, et se combinent de telle sorte que l'équilibre global est assuré.

## 4.5 Essai sur un cylindre creux

À titre d'exemple, on présente un des problèmes traités dans le cadre d'un projet européen TIMODAZ<sup>1</sup>. L'objectif de ce projet est d'étudier, à l'échelle du laboratoire, les fractures et les étanchéités développées dans la zone endommagée lors de l'excavation d'ouvrages souterrains (EDZ<sup>2</sup>). Dans ce contexte, des expériences ont été réalisées à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Labiouse *et al.* [104], Labiouse et Vietor [105]) en considérant un cylindre creux soumis au chargement thermo-hydro-mécanique. Lors de notre exercice, on reprend le schéma expérimental, mais aucune condition hydraulique ou thermique n'est prise en compte. Il s'agit donc un cylindre creux soumis à des conditions purement mécaniques.

### 4.5.1 Géométrie et conditions aux limites

Le problème modélisé est donc un problème 2D, qui cherche à modéliser une tranche du cylindre creux. La géométrie de l'échantillon est illustrée sur la figure 4.21. Le rayon interne est égal à  $r_{int} = 7$  mm et le rayon externe  $r_{ext} = 43$  mm.

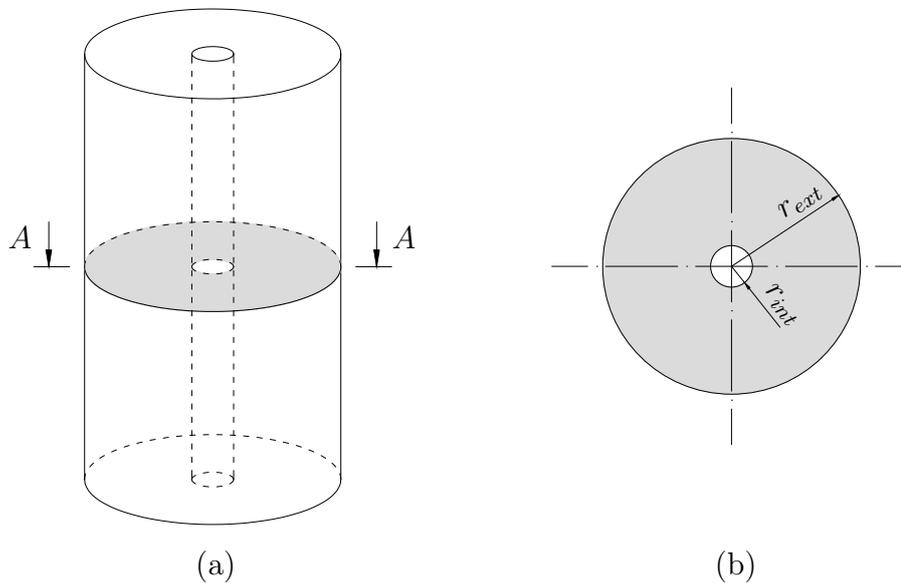


FIGURE 4.21 – Modèle 2D du cylindre creux : (a) cylindre creux ; (b) coupe A-A.

L'objectif de cette simulation est de reproduire le comportement du matériau dans une section plane du cylindre creux, en supposant des conditions en déformation plane.

1. **Thermal Impact on the Damaged Zone** Around a Radioactive Waste Disposal in Clay Host Rocks

2. de l'anglais "**Excavation Damage Zone**"

En raison de la symétrie du problème, seul quart de la géométrie entière est considéré.

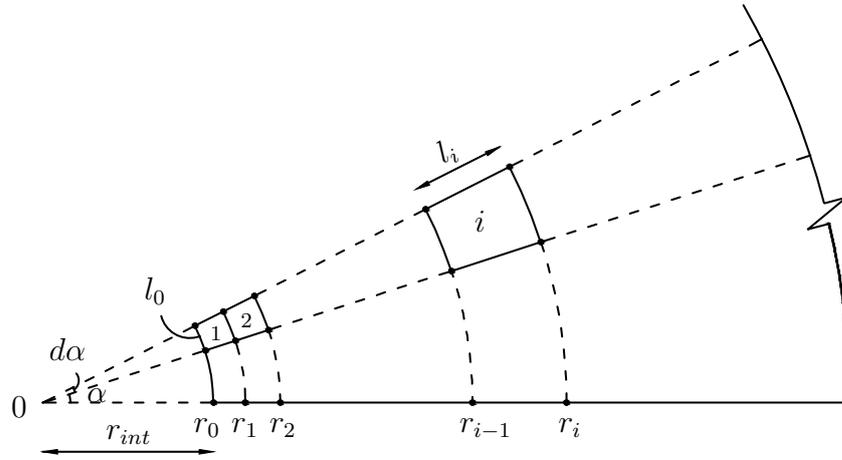


FIGURE 4.22 – Modélisation d'un cylindre creux : Numéroté et dimensionner les éléments Q8.

Il a été choisi de réaliser un maillage pour lequel la longueur des éléments augmente selon une progression géométrique. La taille de la première couche peut être considérée comme un paramètre et elle est déterminée grâce au nombre de tranches considéré  $n_t$ . La largeur intérieure de chaque couche est ainsi :

$$l_0 = \frac{\pi r_{int}}{2 n_t} \quad (4.5)$$

avec  $n_t$  est nombre de tranches.

La longueur de chaque élément est notée  $l_i$ . Si les rayons définis l'élément  $i$  sont notées  $r_{i-1}$  et  $r_i$  (figure 4.23), ses valeurs sont calculées comme suit :

$$\begin{cases} \text{si } i = 1 & r_i = r_0 + l_1 \\ \text{si } i > 1 & r_i = r_{i-1} + \delta(r_{i-1} - r_{i-2}) \end{cases} \quad (4.6)$$

La taille de la première maille  $l_1$  est considérée comme un paramètre. Dans l'équation 4.6,  $\delta$  est la raison géométrie qui est alors déterminé à partir de  $l_1$ , la longueur du domaine  $r_{ext} - r_{int}$  et le nombre des couches souhaité  $n_c$ .

Pour cette simulation, on choisit :  $n_t = 20$ ,  $l_1 = l_0$  et  $n_c = 20$ . Le maillage est alors discrétisé en 400 éléments Q8 comme l'illustration sur la figure 4.23. En terme de conditions limites mécaniques, la surface horizontale est bloquée verticalement et glissant dans la direction horizontale ; au contraire, la surface verticale est bloquée horizontalement et libre dans l'autre direction. Les limites intérieures et extérieures du cylindre sont pilotées en contrainte par  $\sigma_{int}$  et  $\sigma_{ext}$ . Le chemin de contraintes appliqué est donné par la figure 4.24. On peut le diviser en deux phases : à partir d'un état de contrainte isotrope ( $\sigma_0$ ), la première phase consiste à diminuer la contrainte à l'intérieur  $\sigma_{int} = \sigma_0 \rightarrow 0$  en

gardant  $\sigma_{ext} = \sigma_0$ ; cette première phase est effectuée en 4200 secondes<sup>3</sup>. Ensuite, on augmente la contrainte extérieure  $\sigma_{ext}$  jusqu'à  $\sigma_{ext} = 4 \cdot \sigma_0$  pendant la deuxième phase durant 5800 secondes.

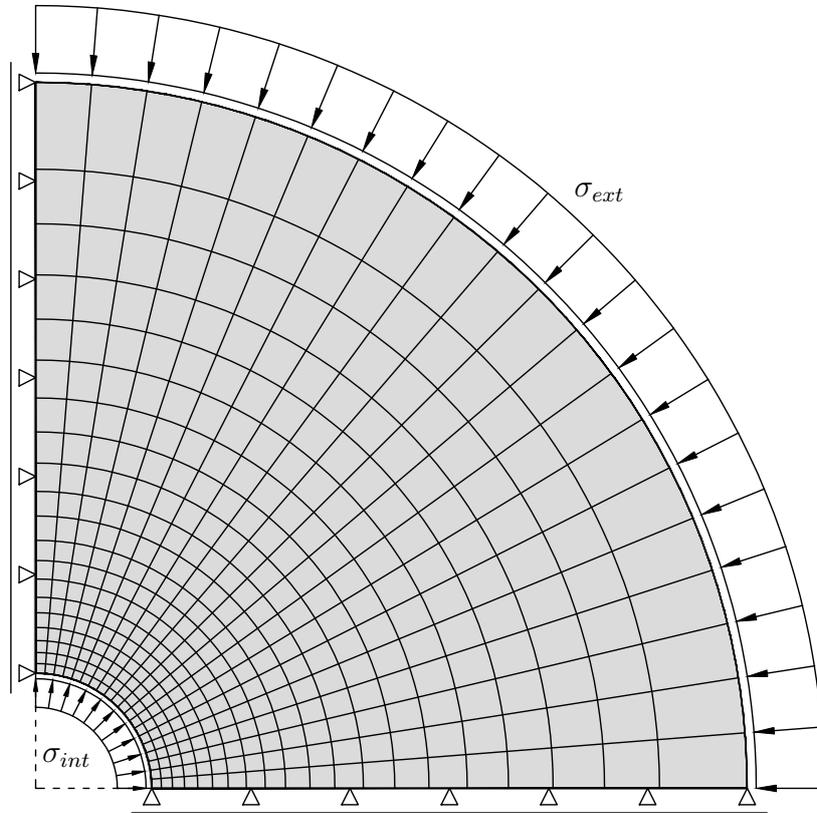


FIGURE 4.23 – Modélisation d'un cylindre creux : Discrétisation d'un quart d'une section entière en éléments finis Q8.

#### 4.5.2 Paramètres microscopiques

Les paramètres de la loi DEM choisis sont les mêmes que ceux présentés dans la section 4.4.2; ils sont alors résumés dans le tableau 4.8.

Le VER utilisé est celui de 400 grains préparé initialement à l'état de contrainte isotrope  $\sigma_0$  avec les conditions aux limites périodiques. Ce VER est très dense, le nombre total de contacts vaut 843 et tous les contacts sont initialement collés (voir les figures 4.10 et 4.11). Les variables internes de la loi sont le nombre de grains, leurs coordonnées, la liste de contacts et l'interaction entre les grains.

3. Le temps affiché ici est un simple paramètre d'avancement, car nous ne considérons pas de viscosité dans le comportement homogénéisé du matériau, ni d'écoulement dans la porosité, qui pourrait introduire la grandeur temps dans le problème.

TABLE 4.8 – Modélisation d'un cylindre creux : Paramètres de la loi DEM de type 2.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n/(P \cdot d)$	Niveau de raideur	1000
$k_n/k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	1

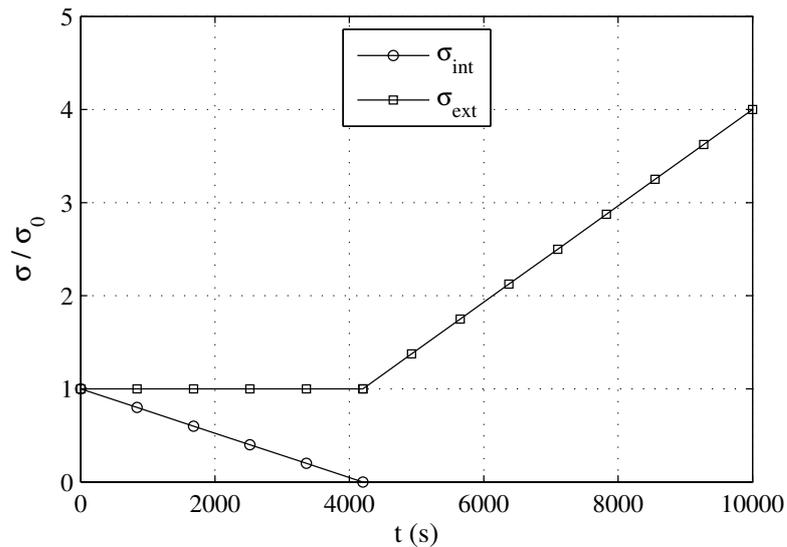


FIGURE 4.24 – Modélisation d'un cylindre creux : Chemin de sollicitation en contrainte.

### 4.5.3 Résultats numériques

#### 4.5.3.1 Analyses macroscopiques

À partir d'un état de contrainte isotrope, la diminution de la contrainte latérale intérieure ( $\sigma_{int}$ ) produit une redistribution avec augmentation de la contrainte orthoradiale. La contrainte radiale à la paroi est principale (pression), et la contrainte orthoradiale est la contrainte principale majeure dès qu'on quitte l'état initial (qui est isotrope). À la paroi intérieure, après une phase d'augmentation du déviateur, de plus en plus lente, la contrainte déviatorique atteint un pic puis diminue. La figure 4.26 montre les états de contrainte dans les divers éléments du domaine, avec un zoom sur la partie proche du trou. Simultanément, pendant cette phase, la contrainte moyenne diminue fortement dans la zone proche du trou. Le rapport déviateur/contrainte moyenne devient plus critique, provoquant des déformations déviatoires qui ont tendance de casser la cohésion entre les liens intergranulaires.

La figure 4.27 présente la carte du second invariant du tenseur de déformation pour différents pas du temps.

On concentre le commentaire de cette figure sur la façon dont le phénomène de lo-

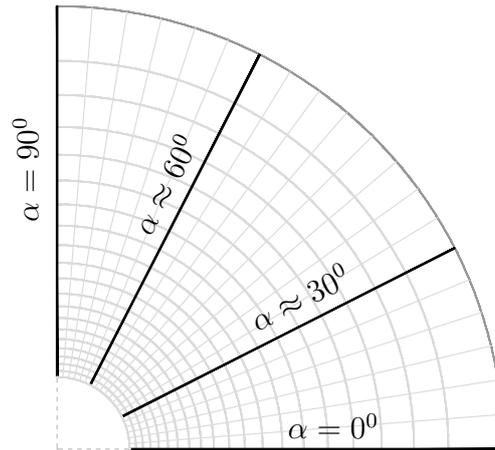


FIGURE 4.25 – Modélisation d'un cylindre creux : Location des profils de déplacement.

calisation apparaît autour de la partie intérieure du cylindre creux. Sur la figure 4.27, il est possible d'observer comment la localisation de la déformation développe autour de la paroi intérieure. Au début du chargement, la déformation dévie peu de l'homogénéité dans la direction orthoradiale, à rayon donné (les écarts dans la première couche d'éléments ne dépassent pas 20% à  $t = 3700$  s, contre presque 50% dès  $t = 4400$  s). On ne peut pas parler de localisation à ce stade, tout au plus d'hétérogénéité diffuse.

En fin du chargement ( $t = 10000$  s), on observe clairement quatre bandes de cisaillement en forme de spirale, qui émergent de la paroi à partir des éléments orientés de  $20^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $66^\circ$  et  $81^\circ$  (par rapport à l'axe horizontal). Le reste du domaine, à loin de ces zones (à partir d'un rayon d'environ 3 fois le rayon du trou central) et entre les bandes, le comportement du matériau est élastique et homogène. Entre le début du chargement et l'état final localisé, les cartes de déformation montrent la mise en place progressive de la figure finale de localisation.

Il est intéressant de replacer ce résultat dans le cadre général de la perte d'unicité de la solution d'un problème aux limites (théorie de la bifurcation). Lorsqu'une telle perte d'unicité du problème est rencontrée, un calcul numérique s'oriente vers l'une ou l'autre des solutions possibles, en fonction de menus détails de la méthode numérique ; par exemple on a montré que suivant l'initialisation des vitesses dans les itérations de Newton-Raphson au début du pas, un mode peut être sélectionné plutôt qu'un autre. Les différentes solutions ont en commun une typologie, c'est-à-dire des caractéristiques communes (angle des bandes de cisaillement par rapport aux directions principales de la contrainte locale par exemple). La solution exhibée ici est donc une solution possible du problème. Une petite variation des caractéristiques du VER pourrait provoquer la sélection d'une solution différente, par exemple une orientation conjuguée de celle observée ici, voire une superposition des deux modes. Ces diverses solutions ont pour caractéristique d'être cohérentes avec les observations expérimentales, par exemple celles de Van den Hoek [173] (mode de rupture dans les forages), Chen *et al.* [42] (rupture dans un

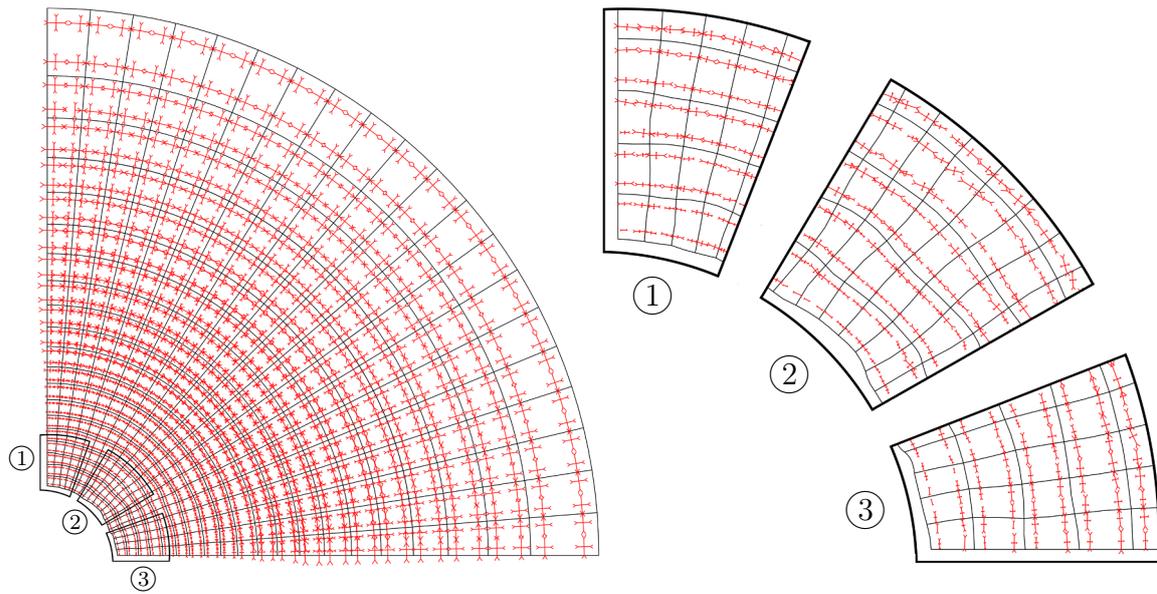


FIGURE 4.26 – Modélisation d'un cylindre creux : Contraintes principales à l'instant final  $t = 10000 \text{ s}$ .

cylindre creux en argile synthétique) ; et numériques par Sieffert *et al.* [162], Marinelli [112].

L'examen des figures discutées plus haut (figure 4.28) montre que le déplacement radial suivant les directions n'est pas identique. Lorsqu'on diminue la contrainte intérieure ( $\sigma_{int}$ ) et augmente la contrainte extérieure ( $\sigma_{ext}$ ), la paroi intérieure se déplace vers l'intérieur, la convergence finale trouvée dans ce cas est de l'ordre de 2.7 mm. En raison de l'apparition des bandes de cisaillement, les magnitudes du profil de déplacement sont différentes dans différentes directions, *i.e. différentes valeurs de  $\alpha$* . Le déplacement est maximal à l'intérieur et diminue vers un plateau de 0.5 mm dans le champ lointain (voir la figure 4.31). Ce plateau est rencontré à partir d'un rayon de 3 fois le rayon initial du trou ce qui est en accord avec la zone où il n'y a plus d'influence des bandes de cisaillement, *i.e. zone homogène en comportement élastique*.

À cause de la localisation de la déformation, le déplacement de la paroi intérieure est très varié en fonction de l'angle  $\alpha$ . Cette variation est montrée sur la figure 4.31 donnant une distribution très irrégulière (déplacement intérieur de 2,38 à 2,68 mm). Comme on le voit et en comparaison avec les figures précédentes, les points correspondant aux endroits de l'apparition des bandes de cisaillement, présentent des déplacements radiaux plus importants ( $\alpha = 22^\circ$  et  $\alpha = 58^\circ$ ).

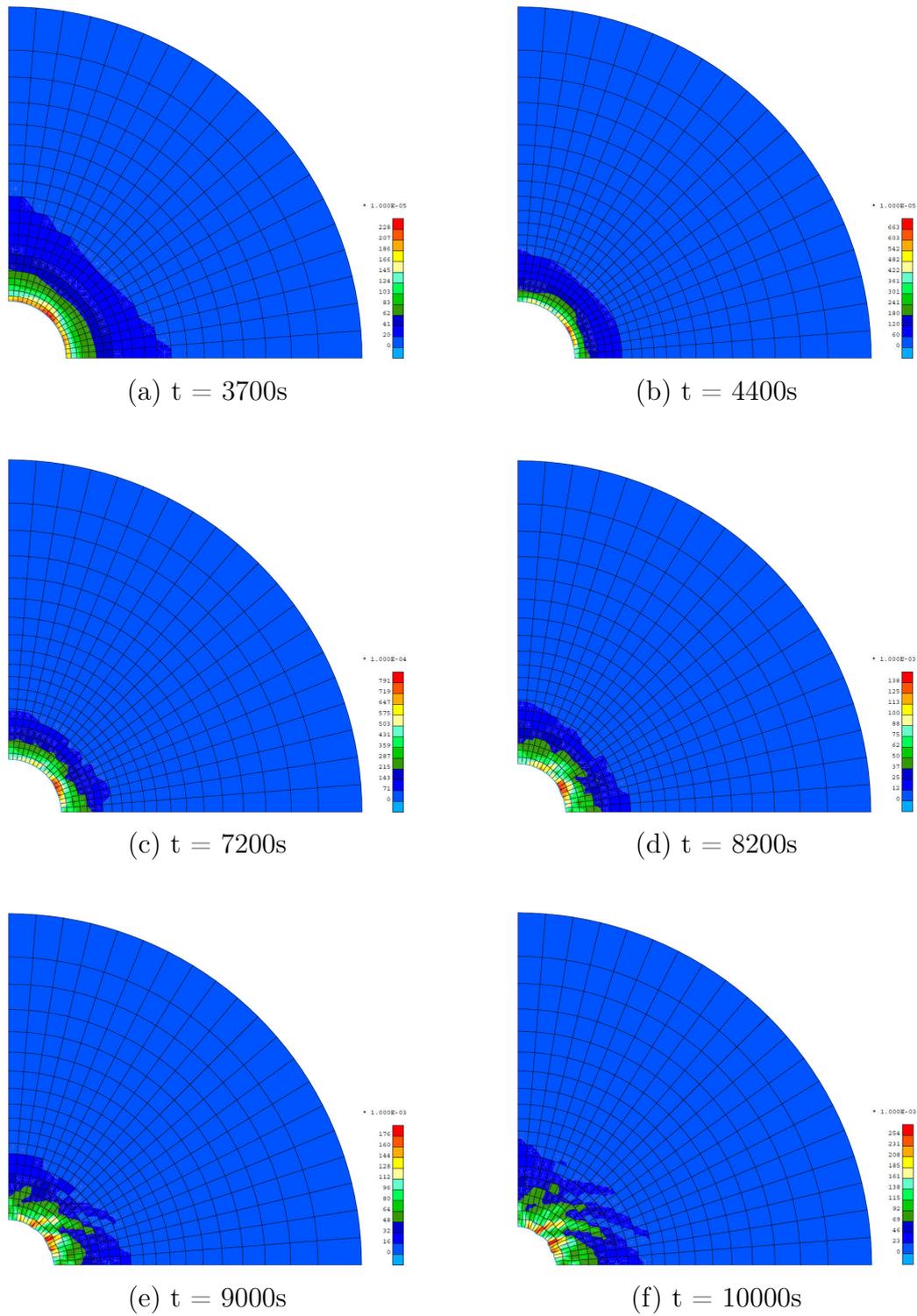


FIGURE 4.27 – Modélisation d'un cylindre creux : Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations.

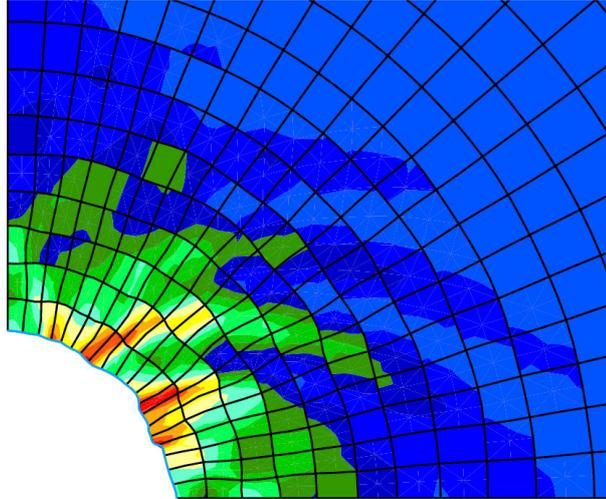


FIGURE 4.28 – Modélisation d’un cylindre creux : Zoom sur la zone localisée de la figure 4.27.f.

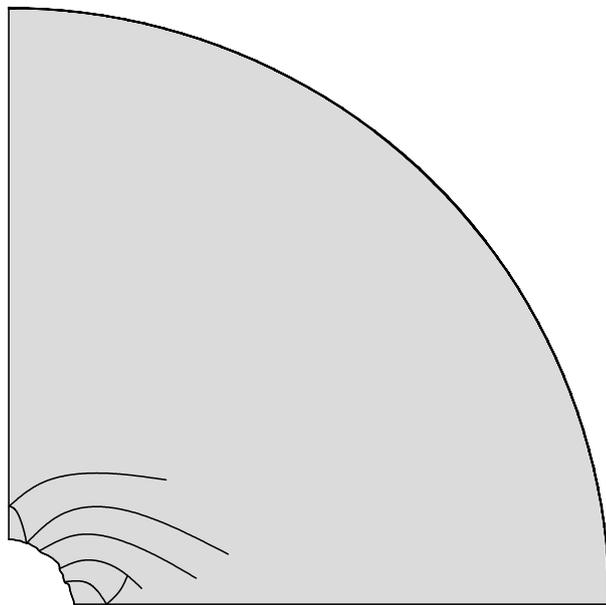
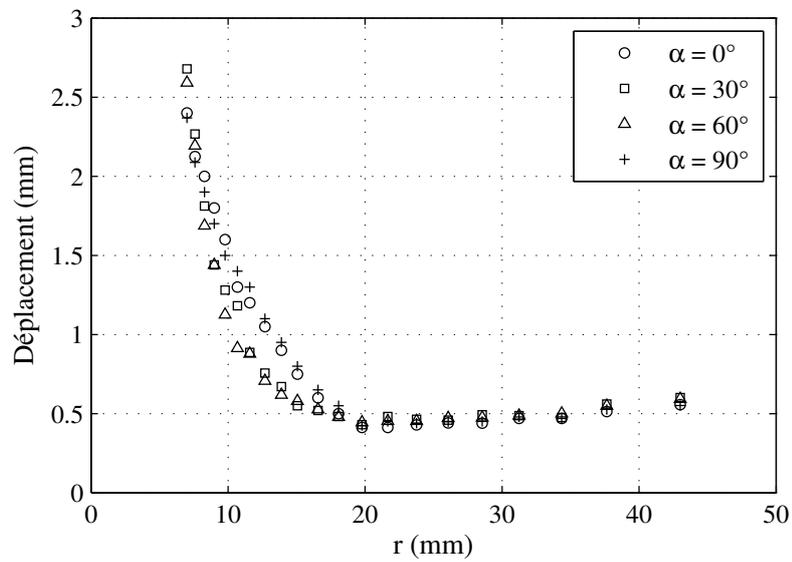
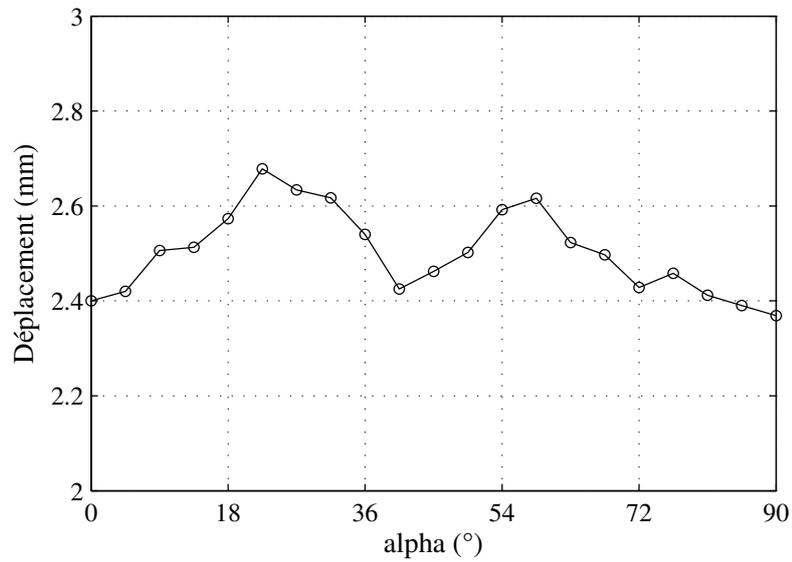


FIGURE 4.29 – Modélisation d’un cylindre creux : Allure des bandes de cisaillement à  $t = 10000$  s.

FIGURE 4.30 – Modélisation d'un cylindre creux : Profil du déplacement à  $t = 10000$  s.FIGURE 4.31 – Modélisation d'un cylindre creux : Déplacement de la paroi intérieure à  $t = 10000$  s.

### 4.5.3.2 Analyses microscopiques

On propose dans cette partie d'analyser les propriétés microscopiques des VER dans certains points de Gauss. Les éléments considérés sont marqués sur la figure 4.32.

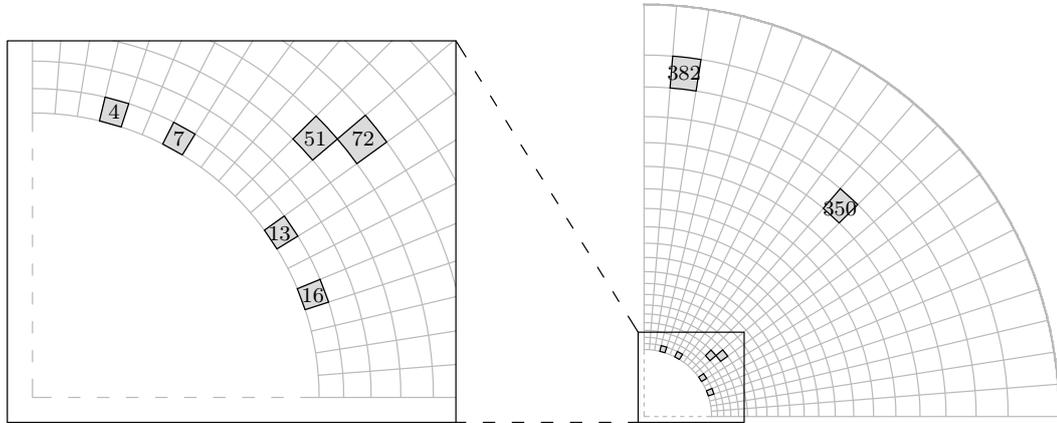
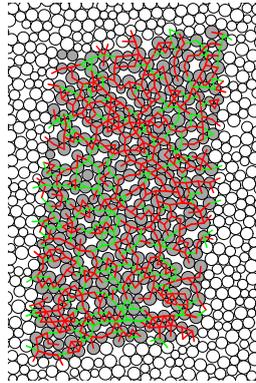
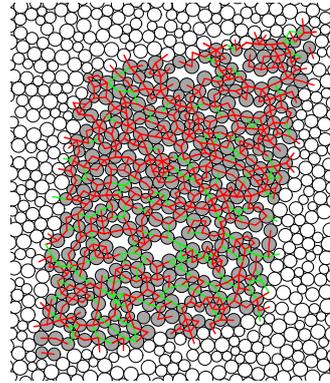


FIGURE 4.32 – Modélisation d'un cylindre creux : Positions des éléments considérés.

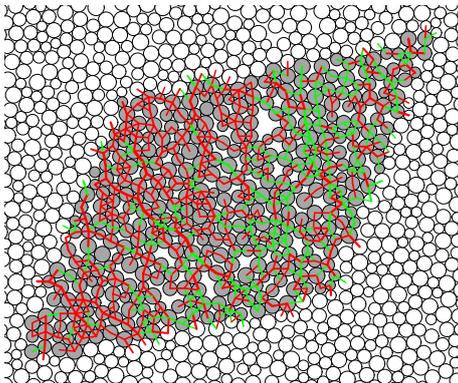
Les figures 4.33 et 4.34 montrent les formes et le réseau des forces de contact dans les VER associés à certains points d'intégration choisis dans la configuration déformée. Les VER 4, 7, 13, 16 correspondent aux points où plusieurs bandes de cisaillement ont commencé. Les VER 51, 72 se trouvent également dans les bandes, alors que les éléments 350 et 382 sont dans la zone lointaine, donc sensiblement homogène. Les éléments dans les bandes sont soumis à un chargement complexe, leur déformées sont combinées de la traction et du cisaillement. Comme on en a discuté, pendant le calcul, dans tous les éléments les directions principales des contraintes majeure et mineure sont celles orthoradiale et radiale. On trouve ici que les chaînes des forces ont tendance de s'orienter vers la direction principale majeure, donc la direction orthoradiale. Cette observation est en accord avec les remarques sur l'orientation des chaînes de forces par Radjai et *al.* [148], Radjai et Wolf [147]. En plus, les contacts créés respectent aussi cette tendance. Au contraire, les VER dans les bandes de cisaillement soumis au chargement complexe, il semble que les VER dans la zone homogène (éléments 350 et 382) n'évoluent pas beaucoup. Il y a très peu de contacts cassés la cohésion, les formes de ces VER restent similaires avec celui initial.



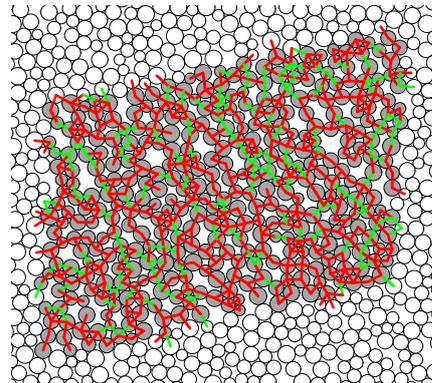
(a) Élément 4



(b) Élément 7

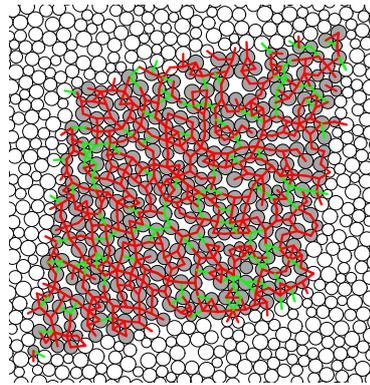


(c) Élément 13

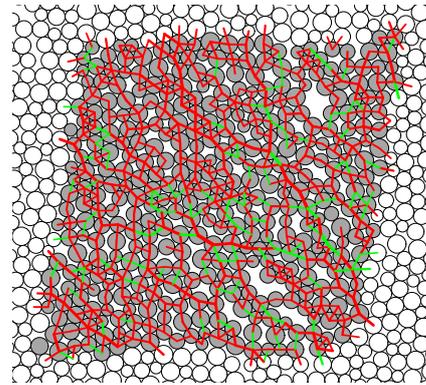


(d) Élément 16

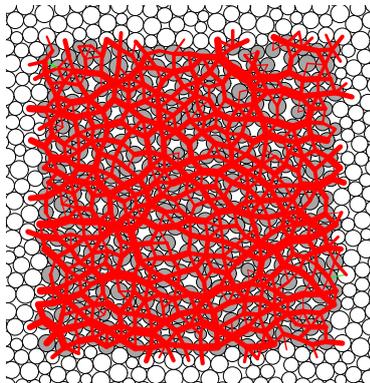
FIGURE 4.33 – Modélisation d'un cylindre creux : Évolution des microstructures d'un point de Gauss des éléments 4, 7, 13, 16. L'épaisseur du trait est proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.



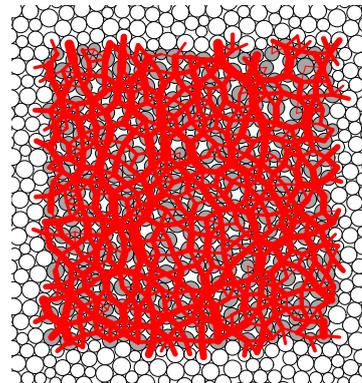
(a) Élément 51



(b) Élément 72



(c) Élément 362



(d) Élément 379

FIGURE 4.34 – Modélisation d'un cylindre creux : Évolution des microstructures d'un point de Gauss des éléments 51, 72, 362, 379. L'épaisseur du trait est proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.

En terme de l'amplitude des forces, on voit très bien que dans les éléments 4, 7, 13, 16, 51, 72, les valeurs de forces sont très faibles (les lignes très minces) tandis que les valeurs plus importantes trouvées dans les éléments 350 et 382. Comme on a vu sur la figure 4.26, la contrainte à la paroi intérieure diminue progressivement alors à proximité de la de la paroi extérieure, des valeurs importantes de contraintes sont rencontrées. Cet aspect de contrainte est cohérent avec la diminution des forces, le nombre de contacts perdus et l'augmentation de l'indice des vides qui favorisent la rupture de la cohésion locale au contact dans les VER.

## 4.6 Conclusion

La loi homogénéisée numérique DEM construite dans le chapitre 3 a été implémentée avec succès dans un code de calcul par éléments finis Lagamine (Université de Liège). La procédure de l'implémentation a été présentée d'une manière détaillée impliquant l'introduction d'un opérateur tangent consistant numérique. En effet, à cause de la nature de la DEM, les sauts inattendus des contraintes sont rencontrés très souvent, perturbant l'opérateur tangent consistant pour chaque utilisation de la méthode Newton-Raphson. Pour régler ce problème, on a proposé d'utiliser un opérateur auxiliaire élastique (MAE) qui nous a aidés à surmonter ces difficultés.

Grâce à l'outil numérique multi-échelle obtenu, des essais biaxiaux et un essai sur un cylindre creux ont été simulés. Dans tous ces cas, la localisation de la déformation a été observée et analysée. En plus, les analyses microscopiques des VER à certains points de Gauss ont également effectué. Les résultats obtenus montrent une capacité robuste de la loi DEM pour des problèmes de très grandes déformations et la possibilité d'utiliser cette nouvelle méthode pour des problèmes géotechniques. La question de la régularisation du problème, nécessaire pour lever la dépendance des solutions vis-à-vis du maillage, a été soulevée mais elle n'est pas traitée dans le cadre du présent travail. Toutefois, nous sommes très confiants dans la perspective d'appliquer à notre approche FEM × DEM une régularisation de type second gradient développée dans notre équipe et déjà implémentée avec succès dans le code Lagamine pour divers types de lois, y compris en présence de couplages.

---

## Modélisation multi-échelle des matériaux granulaires cimentés

---

*Afin de modéliser les matériaux granulaires cimentés, un nouveau type de loi de contact est introduit en prenant en compte des cohésions multiples au niveau des grains en interaction. Ensuite, des essais biaxiaux et un essai sur cylindre creux sont modélisés.*

### Sommaire

---

<b>5.1 Introduction . . . . .</b>	<b>140</b>
<b>5.2 Matériaux granulaires cimentés . . . . .</b>	<b>140</b>
5.2.1 Généralités . . . . .	140
5.2.2 Comportement mécanique . . . . .	140
<b>5.3 Modèle micromécanique pour les milieux granulaires ci- mentés . . . . .</b>	<b>144</b>
<b>5.4 Modélisation FEM × DEM des essais biaxiaux . . . . .</b>	<b>144</b>
5.4.1 Géométrie et condition aux limites . . . . .	144
5.4.2 Paramètres microscopiques . . . . .	145
5.4.3 Résultats . . . . .	146
5.4.4 Modélisation du grès tendre Fontainebleau . . . . .	155
<b>5.5 Essai sur un cylindre creux . . . . .</b>	<b>163</b>
5.5.1 Géométrie et conditions aux limites . . . . .	163
5.5.2 Paramètres microscopiques . . . . .	163
5.5.3 Résultats numériques . . . . .	164
<b>5.6 Conclusion . . . . .</b>	<b>170</b>

---

## 5.1 Introduction

Les résultats présentés dans le chapitre 4 montrent qu'il est pertinent d'envisager que l'approche multi-échelle FEM  $\times$  DEM puisse à terme être utilisée pour les applications géomécaniques et géotechniques. Dans ce chapitre, on propose d'utiliser un nouveau modèle de loi de contact intergranulaire dans le but de modéliser les milieux granulaires cimentés.

Le contenu de ce chapitre est organisé comme suit : dans un premier temps, on présente rapidement les spécificités des matériaux granulaires cimentés de type grès ainsi que leurs propriétés mécaniques spécifiques. Le modèle micromécanique est ensuite présenté en prenant en compte plusieurs aspects complexes des interactions intergranulaires. Le chapitre se termine par une application du modèle micromécanique à des essais biaxiaux et une simulation d'un cylindre creux. Enfin, des comparaisons avec les expériences sur le grès tendre de Fontainebleau menées au laboratoire 3SR, Grenoble sont présentées.

## 5.2 Matériaux granulaires cimentés

### 5.2.1 Généralités

À la différence des matériaux granulaires pulvérulents, les milieux cimentés se caractérisent par la présence d'une cohésion qui empêche les déplacements relatifs entre les grains. Dans la famille des matériaux granulaires cohésifs, les matériaux granulaires cimentés sont "fortement" cohésifs. Ce lien cohésif se traduit par une capacité de résistance à la traction et au cisaillement.

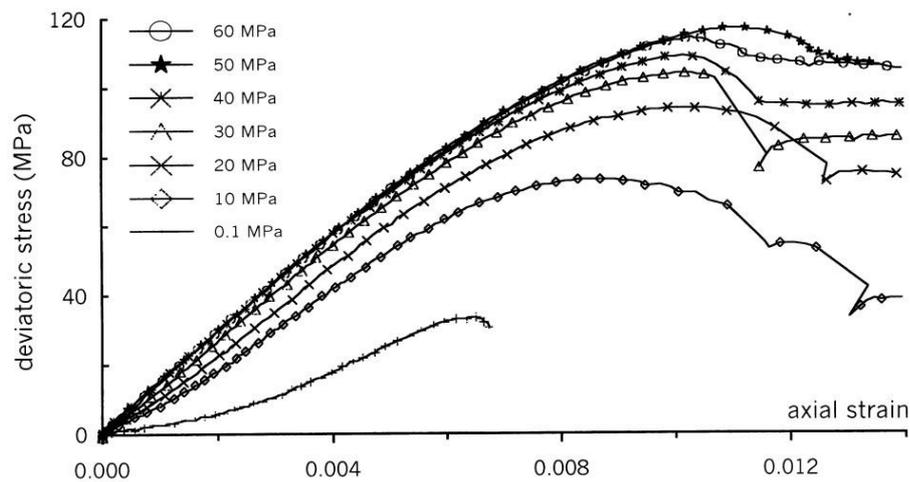
Un grand nombre de matériaux granulaires naturels ou industriels sont des matériaux granulaires cimentés tels que les roches sédimentaires (*ex. les grès*), les matériaux de construction (*ex. le béton*). Ces matériaux sont constitués d'un assemblage granulaire dense avec des joints de ciment reliant les particules et remplissant partiellement ou totalement d'espace poral.

### 5.2.2 Comportement mécanique

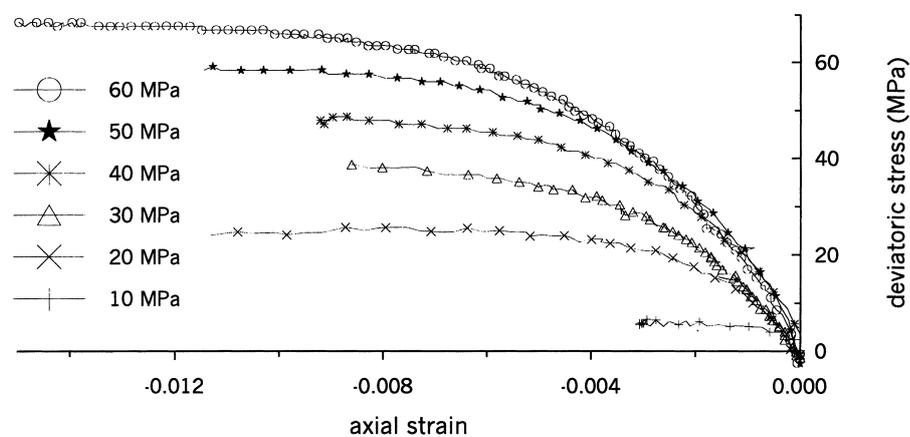
Dans les expériences de laboratoire sur les milieux granulaires cimentés, une dégradation par fissuration est observée. Cette fissuration apparaît à plusieurs échelles :

- à l'échelle des grains, il s'agit des fissures inter-granulaires, *i.e. la rupture des liens cohésifs entre les grains* ;
- des fissures intra-granulaires, *i.e. la rupture qui traverse des grains* ;
- à l'échelle macroscopique au laboratoire, ce sont des macro-fissures divisant l'échantillon en plusieurs blocs et provoquant la discontinuité dans le matériau.

En mécanique des roches, on sait que la résistance à la rupture augmente avec la pression de confinement et que le mode de rupture de l'échantillon dépend du niveau de confinement. La transition fragile – ductile a été observée dans de nombreuses roches sédimentaires. On cite ici les travaux de Bésuelle [13], Bésuelle *et al.* [15] qui ont mené des campagnes expérimentales d'essais triaxiaux en compression et traction sur le grès de Vosges (figure 5.1).



(a)



(b)

FIGURE 5.1 – Essai triaxial en compression (a) et en extension (b) sur le grès de Vosges (d'après Besuelle *et al.* [15]).

En compression, les résultats montrent que le pic de contrainte augmente avec la contrainte de confinement. En extension, les courbes montrent que les modules initiaux de chargement sont peu dépendants du niveau de confinement. Les courbes sont non linéaires dès le début de l'extension et tendent vers un palier de contrainte.

L'allure générale des zones cisailées est résumée sur la figure 5.2. On voit que tous les essais présentent une ou des bandes de cisaillement et qui dépendent du niveau de

confinement. En compression, le nombre des bandes et les modes de ruptures varient avec le confinement. De plus, la forte dépendance de l'orientation des bandes de cisaillement par rapport au confinement est également confirmée dans cette étude (figure 5.1.a). En extension, si on prend comme référence une direction horizontale qui correspond à la direction de la contrainte principale majeure, on peut constater que la bande est de plus en plus inclinée lorsque le confinement augmente (figure 5.1.b).

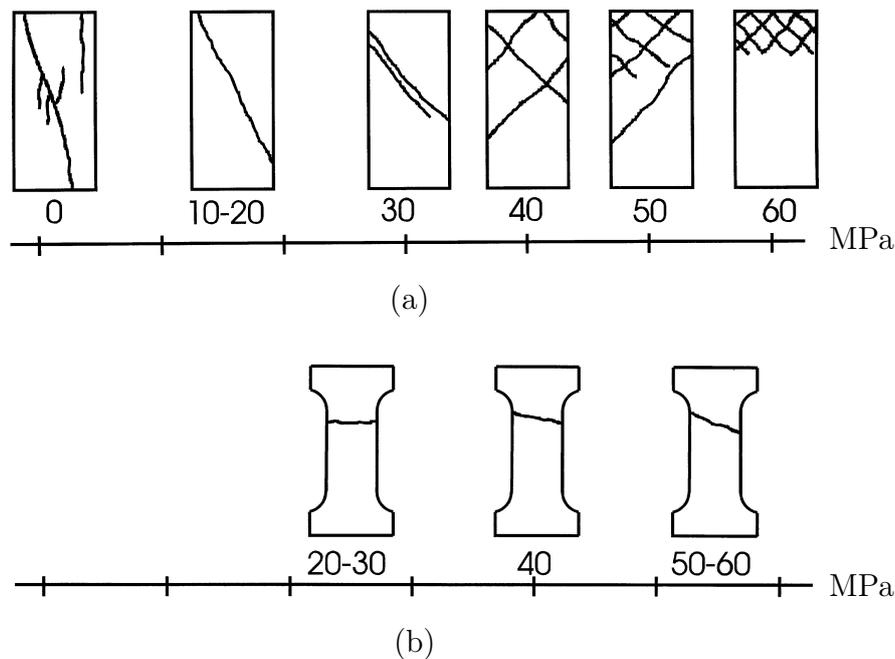


FIGURE 5.2 – Bandes de cisaillement dans les essais triaxiaux en compression (a) et en extension (b) sur le grès de Vosges (d'après Besuelle *et al.* [15]).

El Bied *et al.* [72] ont étudié la microstructure dans la bande de cisaillement apparue lors d'essais triaxiaux sur le grès Fontainebleau. Ils ont observé que les évolutions de la microstructure variaient en fonction du niveau de confinement. Les auteurs observent que l'échantillon testé sous basse contrainte de confinement présente une zone de cisaillement caractérisée par des ruptures intragranulaire des grains (grain cracking) mais peu de broyage des grains (grain crushing), au contraire du cas à haute contrainte où la bande de cisaillement est caractérisée par un broyage intense des grains ("intense grain crushing and pulverisation"). La figure 5.3 illustre ces observations pour deux niveaux de confinement (7 MPa et 28 MPa).

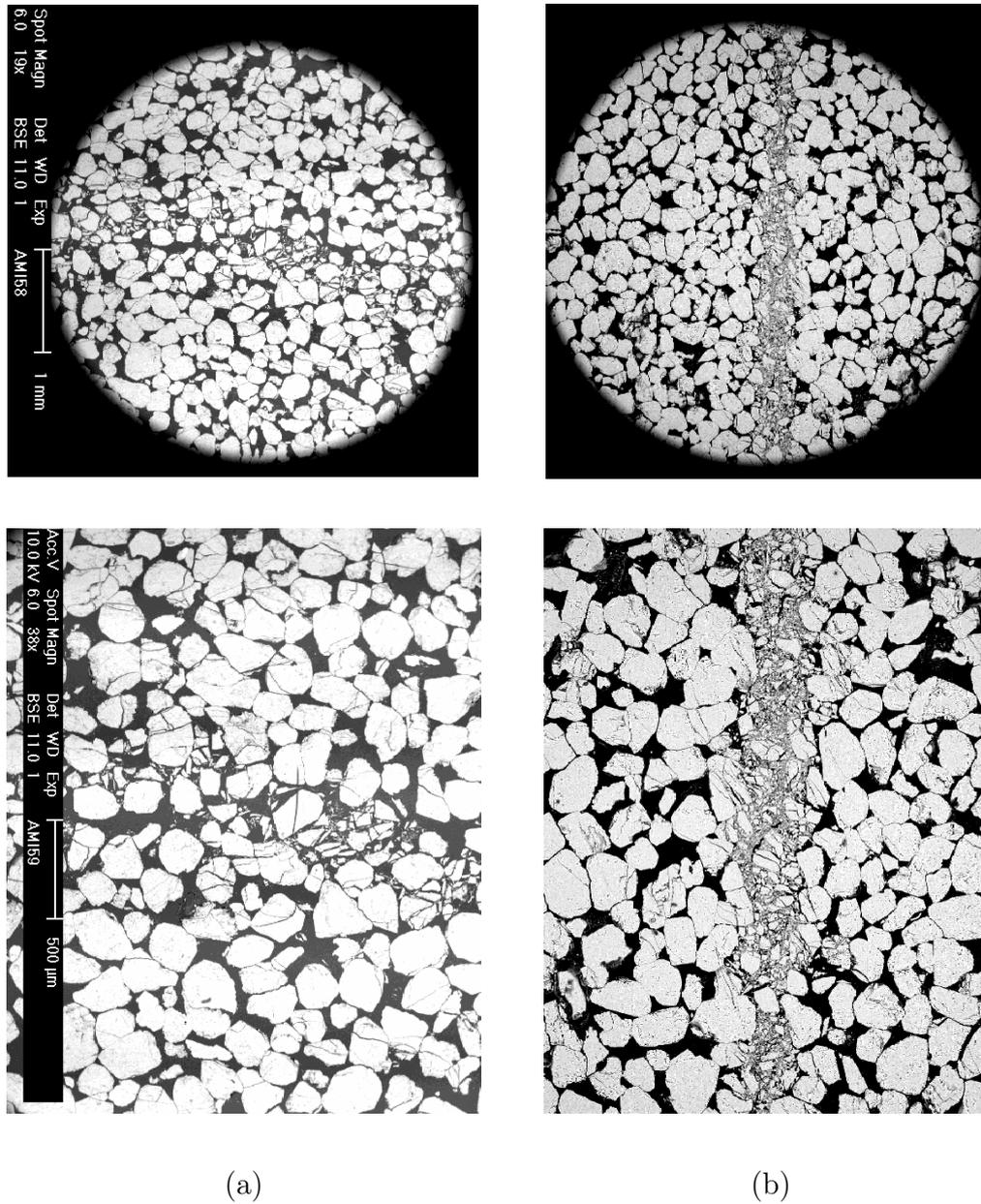


FIGURE 5.3 – Microstructure des zones cisillées sur le grès Fontainebleau à différents confinements : (a) à 7 MPa et (b) à 28 MPa (d'après El Bied *et al.* [72]).

### 5.3 Modèle micromécanique pour les milieux granulaires cimentés

Le modèle permettant de représenter les milieux granulaires cimentés tel que les grès a été présente au chapitre 2, section 2.2.2.3. Il va être mis en œuvre maintenant dans notre cadre FEM  $\times$  DEM, avec divers types de VER, et sur différents types de problèmes.

### 5.4 Modélisation FEM $\times$ DEM des essais biaxiaux

#### 5.4.1 Géométrie et condition aux limites

Dans le cadre de l'étude des matériaux granulaires cimentés ou non, de nombreux essais biaxiaux en déformations planes ont été menés au laboratoire 3SR, Grenoble (Desrues [60], Desrues et Viggiani [69], Mokni [119], Mokni et Desrues [120]). Dans cette section, on va modéliser ce type d'essai par la méthode FEM  $\times$  DEM. La géométrie et les conditions aux limites de l'essai simulé sont données en figure 5.4. Les pressions externes sont appliquées sur les deux faces verticales. Elles sont égales à  $\sigma_2 = \sigma_0$  avec  $\sigma_0$  est la contrainte isotrope. Ces pressions qui restent constantes durant la simulation représentent la pression de confinement dans l'essai biaxial. La surface inférieure est bloquée verticalement et lubrifiée dans l'autre direction *i.e. horizontale*. La surface supérieure est pilotée par un déplacement vertical  $\delta$  et lubrifiée dans la direction horizontale, comme la surface inférieure.

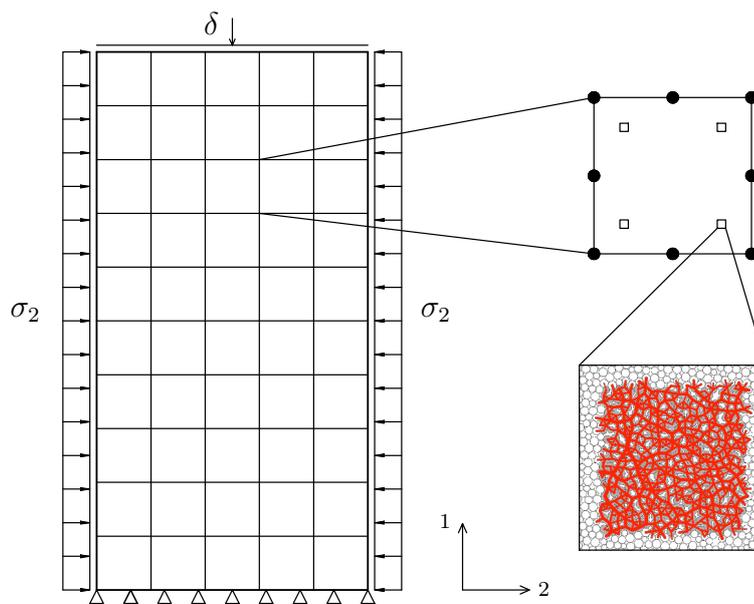


FIGURE 5.4 – Géométrie de l'essai biaxial par FEM  $\times$  DEM.

Afin d'éviter les mouvements de corps rigides comme la translation horizontale, il est nécessaire de fixer un point sur la surface inférieure. On choisit arbitrairement de fixer le point au milieu. L'éclatement de l'échantillon est pris à 2 et son domaine est discrétisé en 50 éléments Q8 (8 nœuds et 4 points d'intégration de Gauss).

Concernant la loi de comportement utilisée, on dispose dans chaque point d'intégration un VER, initialement identique dont la microstructure est décrite dans la section suivante.

#### 5.4.2 Paramètres microscopiques

Le modèle de contact utilisé dans les simulations de ce chapitre est le modèle "cohésif cimenté" introduit au chapitre 2. Les VER utilisés aux points d'intégrations dans ces simulations biaxiales sont présentés sur la figure 5.5. Trois simulations différentes ont été effectuées :

- la première utilise un VER de 400 grains, initialement collés en tous les contacts avec  $p^* = 0.5$ , cette simulation est notée *FDBMGC01*<sup>1</sup> ;
- pour la seconde, le VER présente une complexité supérieure dans la mesure où il met en œuvre deux niveaux de cohésion. Ce VER est constitué d'agrégats de disques collés entre eux par une colle qualifiée de forte,  $p^* = 2.0$ . Ces agrégats, nommés *clusters* dans la suite du texte modélisent des particules pouvant être rompues. Un second niveau de colle est introduit une colle qualifiée de faible,  $p^* = 0.5$ . Cette colle modélise un liant fragile entre les *clusters*. Ces différents aspects sont à interpréter comme une tentative de modélisation d'un milieu granulaire cimenté. Ce VER est utilisé par les simulations *FDBMGC02* ;
- la troisième simulation (appelée *FDBMGC03*) utilise un VER similaire à celui dans *FDBMGC01* sauf le niveau de contrainte qui est pris à  $p^* = 2$ .

TABLE 5.1 – Essais biaxiaux : Paramètres du modèle microscopique de type 3.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (\sigma_0 \cdot \bar{a})$	Niveau de raideur	1000
$k_n / k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$\lambda$	Résistance en cisaillement/traction	1
n	Exposant du critère de rupture	2

1. FDBMGC : FEM × DEM Biaxial Matériaux Granulaires Cimentés

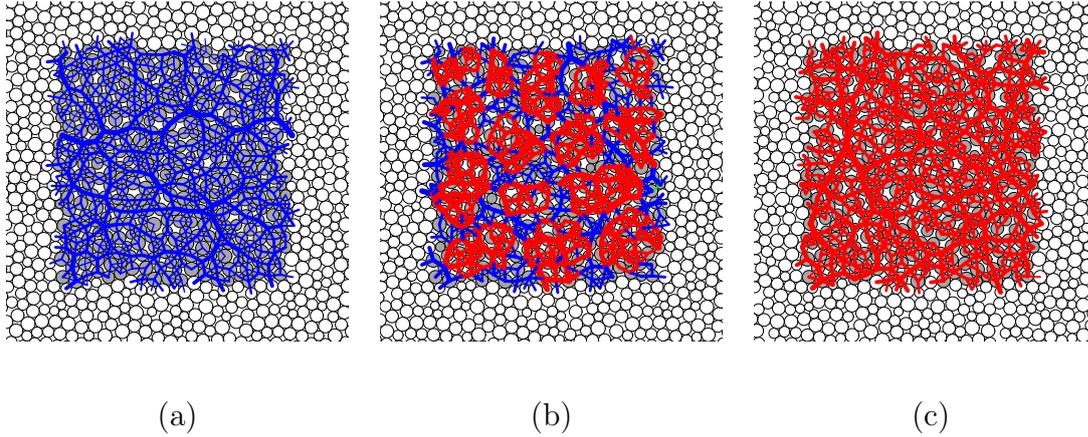


FIGURE 5.5 – VER utilisés à l'échelle microscopique avec CLP. Les chaînes des forces sont tracées avec les conventions suivantes : l'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Différents niveaux de cohésion sont illustrés : en bleu ( $p^* = 0.5$ ) et en rouge ( $p^* = 2.0$ ). Les figures (a), (b), (c) correspondent aux VER des essais *FDBMGC01*, *FDBMGC02* et *FDBMGC03*.

Il est important de noter que la distribution de tailles des grains dans tous ces trois VER est absolument identique. Les autres paramètres du modèle micromécanique sont les mêmes pour toutes les trois simulations et sont résumés dans le tableau 5.1.

### 5.4.3 Résultats

#### 5.4.3.1 Comportement mécanique observé à la grande échelle (l'échelle des éléments finis)

Les courbes de la contrainte déviatorique normalisée  $q/\sigma_2 = (\sigma_1 - \sigma_2)/\sigma_2$  versus la déformation axiale de l'échantillon  $\varepsilon_{11}$  pour les simulations *FDBMGC01*, *FDBMGC02*, *FDBMGC03* sont données sur la figure 5.6. Plusieurs observations sont à noter :

- en début de chargement, jusqu'à  $\varepsilon_{11} = 0,25\%$  environ, les courbes sont très proches.
- ensuite les courbes s'incurvent pour atteindre un pic, avec une contrainte de pic différente et un pic plus ou moins "pointu" d'un cas à l'autre, le plus "pointu" étant le plus haut et vice-versa. Le caractère "pointu" a en fait deux faces, avec à gauche une incurvation plus ou moins brutale c'est-à-dire un module passant plus ou moins rapidement d'une valeur élevée proche du module élastique initial, à zéro ; et à droite une réduction plus ou moins rapide de la résistance de la structure.
- enfin la déformation se poursuit dans une longue phase de perte de résistance globale, au cours de laquelle les différentes courbes se rejoignent à nouveau, non sans quelques divergences passagères. En tendance, on peut dire qu'on tend vers un palier unique.

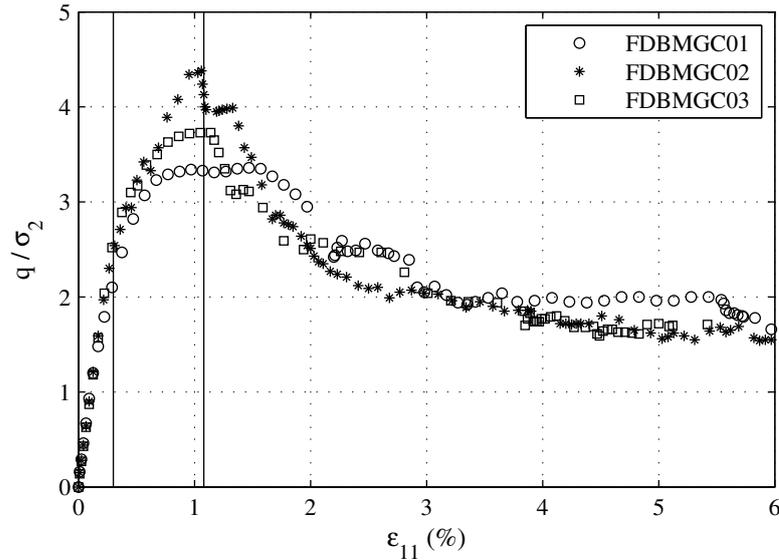


FIGURE 5.6 – Essais biaxiaux en compression : réponses macroscopiques.

À quel VER correspond chaque courbe ? On constate que le calcul *FDBMGC02* avec les *clusters* montre un pic le plus élevé tandis le calcul *FDBMGC01* avec un niveau de cohésion faible présente un pic moins important et n'est pas très marqué. Les pics des essais *FDBMGC02* et *FDBMGC03* sont obtenus à presque même valeur de déformation axiale  $\varepsilon_{11} = 1.15\%$ , et à partir de  $\varepsilon_{11} > 3.5\%$  il est très difficile de distinguer ces deux courbes. Ces trois calculs présentent tous une phase de radoucissement post-pic jusqu'à 3% de déformation axiale avant d'entrer dans une phase de plateau globalement identique. Néanmoins, le radoucissement est le plus prononcé pour l'essai *FDBMGC02* (avec des *clusters*) et moins important pour le cas de forte cohésion *FDBMGC03*.

Ces observations s'expliquent aisément : on sait que lorsque les milieux granulaires sont initialement très denses et fortement coordonnés, c'est essentiellement le niveau initial des contacts qui dicte la réponse du matériau tant que les déformations restent faibles. Or, ici, les VER utilisés à l'échelle microscopique sont très similaires<sup>2</sup> en termes des nombres de grains, de la densité initiale, du nombre de coordination et les autres paramètres microscopiques sauf le niveau de cohésion, c'est pourquoi durant phase initiale ( $\varepsilon_{11} < 0.5\%$ ), leurs comportements sont similaires. Après cette phase, les comportements diffèrent et atteignent des pics de contrainte sensiblement différents, mais se retrouvent au final au plateau après un radoucissement du matériau.

2. Les nombres de grains dans ces VER sont parfaitement identiques ; néanmoins, en raison de l'étape de préparation, les autres propriétés microscopiques (la densité initiale, le nombre de coordination) sont très similaires avec très peu de différences.

Le pic le plus élevé est obtenu pour la simulation *FDBMGC02*. C'est donc, dans le cas présent, le VER avec *clusters* qui montre la résistance la plus élevée. Une exploration plus approfondie de la réponse de VER avec *clusters* sera nécessaire pour étudier la variabilité de cette réponse relative suivant la distribution des *clusters*, leur taille, le contraste de cohésion, et établir si la réponse relative observée ici est systématique ou non. Cependant on notera que le pic n'est pas seulement plus haut, mais aussi nettement plus "pointu", ce qui signifie qu'on obtient avec les *clusters* un comportement plus "fragile", au sens consacré par l'opposition fragile-ductile (brittle-ductile) très largement utilisée en mécanique des roches (Paterson [143]). Ceci peut s'expliquer par le fait que les *clusters* ont été "protégés" par la liaison plus ductile assurée par la matrice à cohésion plus faible ( $p^* = 0.5$ ), tout en interagissant entre eux sans contact direct ; ce qui pourrait expliquer une résistance globale plus élevée de la structure vis-à-vis du cas homogène *FDBMGC03*, car ils sont moins endommagés chacun que dans le cas homogène. Cette observation sera également commentée plus loin en étudiant les VER à l'échelle microscopique que l'on présentera dans la section 5.4.3.2 suivante.

Une représentation du maillage déformé et la carte du second invariant du tenseur de déformations totale montrent que la localisation de la déformation est présente dans les trois essais (voir les figures 5.7 et 5.8) avec des orientations des bandes identiques à environ  $43^\circ$ .

À  $\varepsilon_{11} = 3\%$ , l'échantillon *FDBMGC01* est légèrement localisé tandis que dans les échantillons *FDBMGC02* et *FDBMGC03*, la formation des bandes est très claire. Au final à  $\varepsilon_{11} = 6\%$ , une zone localisée plus large est trouvée pour le cas de faible cohésion (*FDBMGC01*,  $p^* = 0.5$ ) et corrélativement, l'intensité de la déformation concentrée dans la bande est plus faible que les deux autres cas (*FDBMGC02* et *FDBMGC03*).

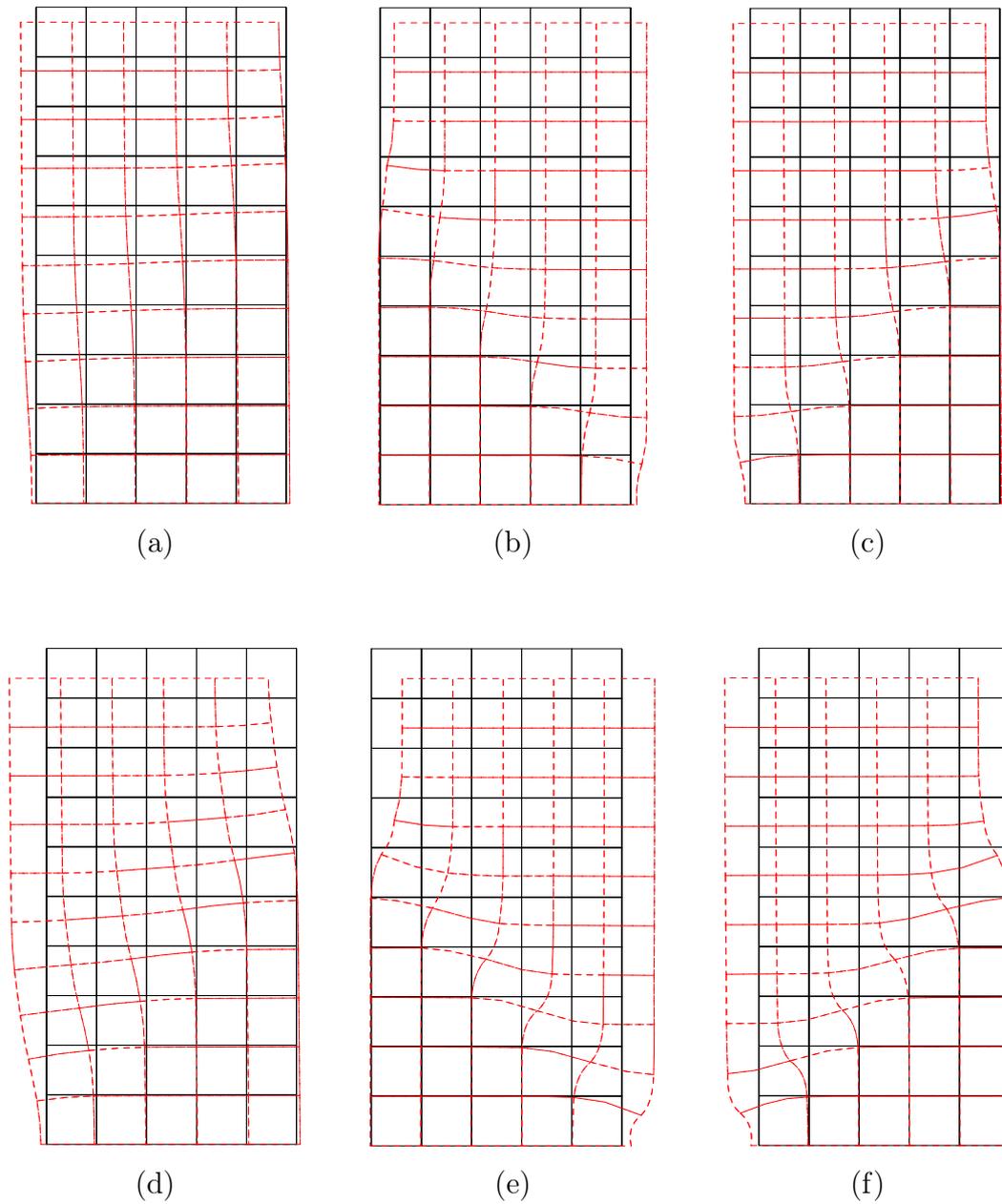


FIGURE 5.7 – Essais biaxiaux en compression : structure déformée des essais *FDBMGC01*, *FDBMGC02*, *FDBMGC03* (l'image de gauche à droite); (a, b, c) à  $\varepsilon_{11} = 3\%$  et (d, e, f) à  $\varepsilon_{11} = 6\%$ .

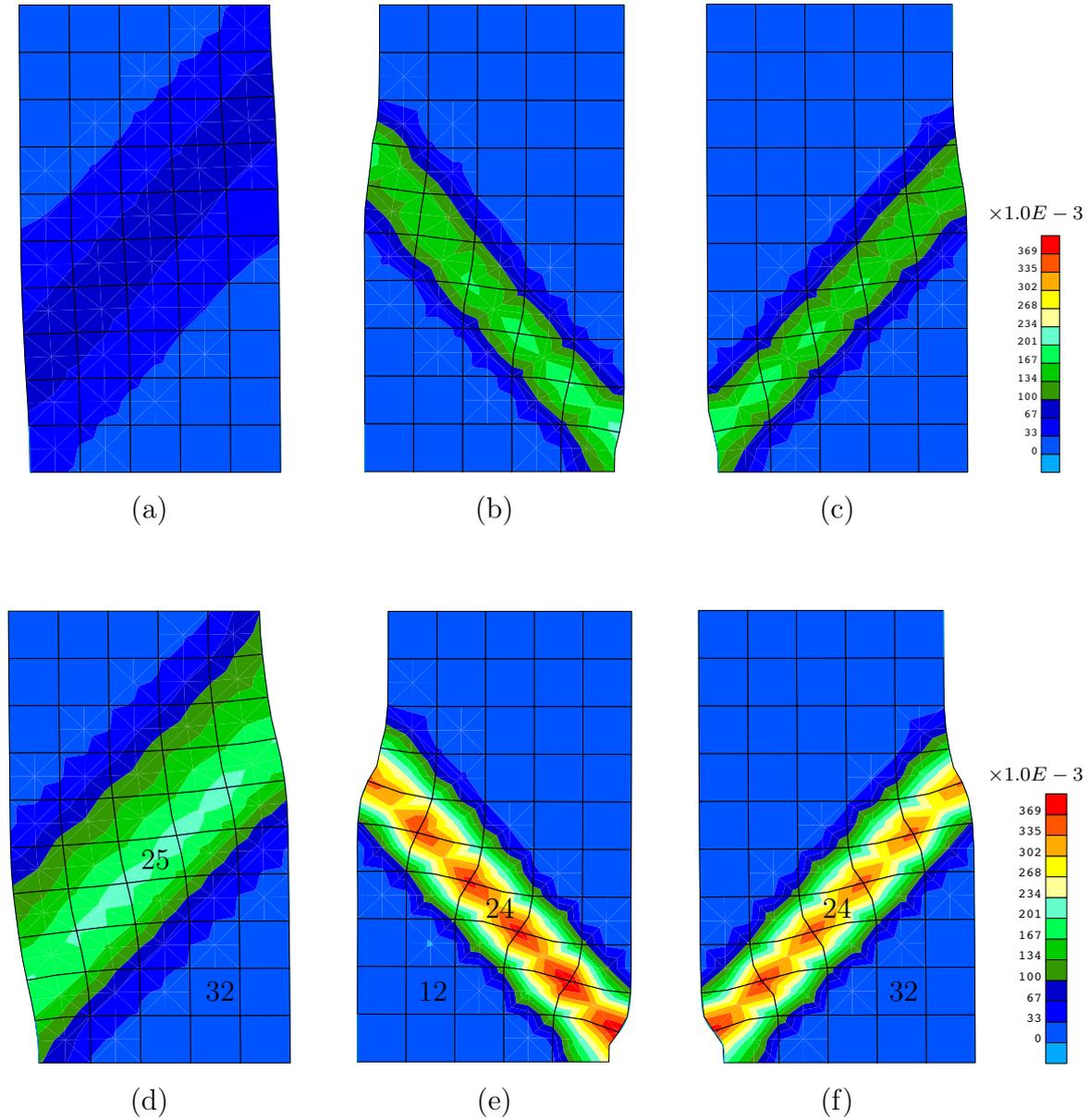


FIGURE 5.8 – Essais biaxiaux en compression : carte du second invariant du tenseur de déformation totale des essais *FDBMGC01* (colle faible), *FDBMGC02* (colle à 2 niveaux), *FDBMGC03* (colle forte) (l'image de gauche à droite); (a, b, c) à  $\varepsilon_{11} = 3\%$  et (d, e, f) à  $\varepsilon_{11} = 6\%$ .

### 5.4.3.2 Analyses microscopiques

Les figures 5.9, 5.10, 5.11 montrent les analyses des certains points d'intégration choisis (voir la figure 5.8 (d,e,f)) à différents instants de chargement (avant pic, autour du pic et à l'état critique; cf. *lignes verticales* figure 5.6).

Avant le pic, en l'absence de la localisation de la déformation à l'échelle du maillage des éléments finis, les échantillons sont restés assez homogènes pour les trois cas de VER. De plus, on observe que les VER sont déformés d'une manière très similaire pour tous les points de Gauss à l'intérieur comme à l'extérieur des bandes de cisaillement. À ce stade, il y a plus de liens à cohésion rompue (traits verts) dans les VER de l'essai *FDBGMC01* (faible cohésion initiale) que dans les autres cas (*FDBGMC02*, *FDBGMC03*). Le niveau de cohésion initiale  $p^*$  est certes plus faible dans l'essai *FDBGMC01*, mais la résistance au roulement, qui joue sur la déformation à la fois par sa raideur (avant rupture des liens) et par son critère de rupture, n'est donc dépendante pas uniquement de la cohésion. Tous les VER ont la même raideur  $k_R$ , donc s'ils étaient tous exempts ou quasi exempts de rupture de liens, les réponses seraient identiques. Ce n'est pas le cas : les *FDBGMC02* et *FDBGMC03* sont presque intacts, surtout le *FDBGMC03* (et effectivement c'est le *FDBGMC03* qui a la plus grande force axiale à  $\varepsilon_{11} = 0.3\%$ , (cf. figure 5.6), en revanche le *FDBGMC01* est déjà bien endommagé. Il a donc moins de liens cohésifs portant la raideur  $k_R$  et ceci explique que la contrainte axiale globale soit plus faible. Par ailleurs, on observe aussi que les liens faiblement cohésifs (colle inter-clusters) de la simulation *FDBGMC02* commencent eux aussi à se rompre alors que les liens à colle forte ( $p^* = 2$ ) sont encore majoritairement intacts comme dans le calcul *FDBGMC03*.

À  $\varepsilon_{11} = 1.15\%$ , les simulations *FDBMGC02* et *FDBMGC03* sont déjà au pic du comportement alors que dans le cas du calcul *FDBMGC01*, si la contrainte axiale globale est déjà pratiquement au niveau du pic de résistance, en revanche on est encore loin du début de la chute de résistance, laquelle n'interviendra pas avant  $\varepsilon_{11} = 1.5\%$  environ c'est-à-dire bien après les deux autres cas (voir la figure 5.6). Au niveau macroscopique, il y a un passage d'un état homogène à un état hétérogène lorsque le comportement du matériau passe au pic. Dans les calculs numériques tels que ceux par FEM, si l'échantillon est à un état homogène, le comportement du matériau est quasiment identique d'un point de Gauss à l'autre. Les observations microscopiques présentes sont en accord avec cette remarque. À ce stade, l'échantillon *FDBMGC01* reste homogène montrant deux VER (un à l'intérieur et l'autre à l'extérieur de la bande de cisaillement) sensiblement identiques (figure 5.10.(a,b)). Pour les deux autres calculs *FDBMGC02* et *FDBMGC03*, l'échantillon est déjà hétérogène et légèrement localisé, donnant des réponses différentes au niveau des VER relatifs à l'intérieur et à l'extérieur de la future bande (voir les figures 5.10.(c,d,e,f)). Tout particulièrement, pour le calcul *FDBMGC02* (celui avec deux différents niveaux de cohésion dans les VER) : à l'intérieur de la bande (5.10.d), tous les *clusters* sont dégradés plus ou moins complètement en termes de liens cohésifs mais à l'extérieur de la bande (5.10.c), il y a encore quatre *clusters* peu endommagés.

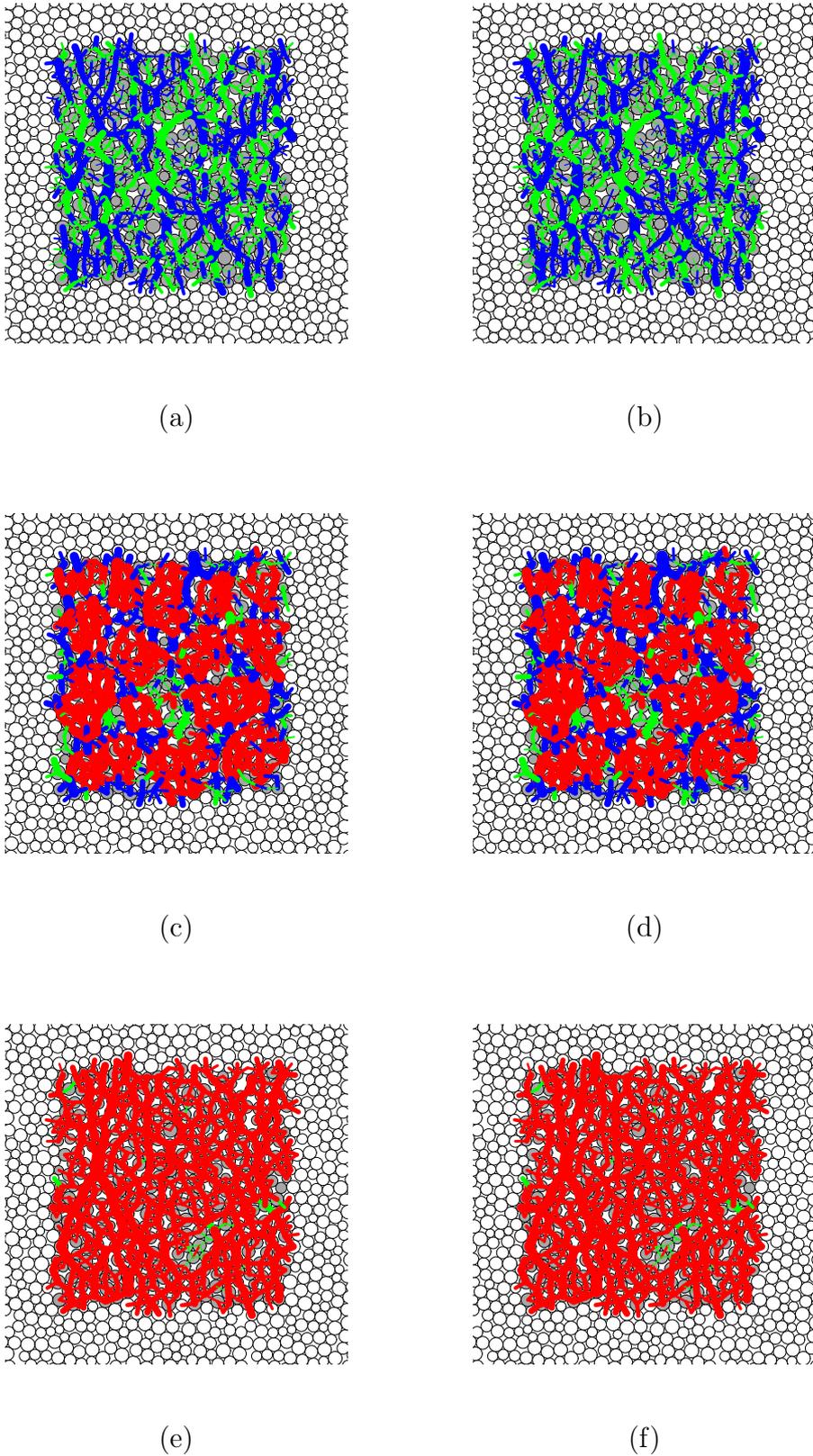


FIGURE 5.9 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_1 = 0.3\%$  : (a,b) FDBMGC01 élément 32, 25 ; (c,d) FDBMGC02 élément 12, 24 ; (e,f) FDBMGC03 élément 32, 24. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec conventions suivantes : en rouge ( $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $p^* = 0.5$ ) et en vert (cohésion locale détruite).

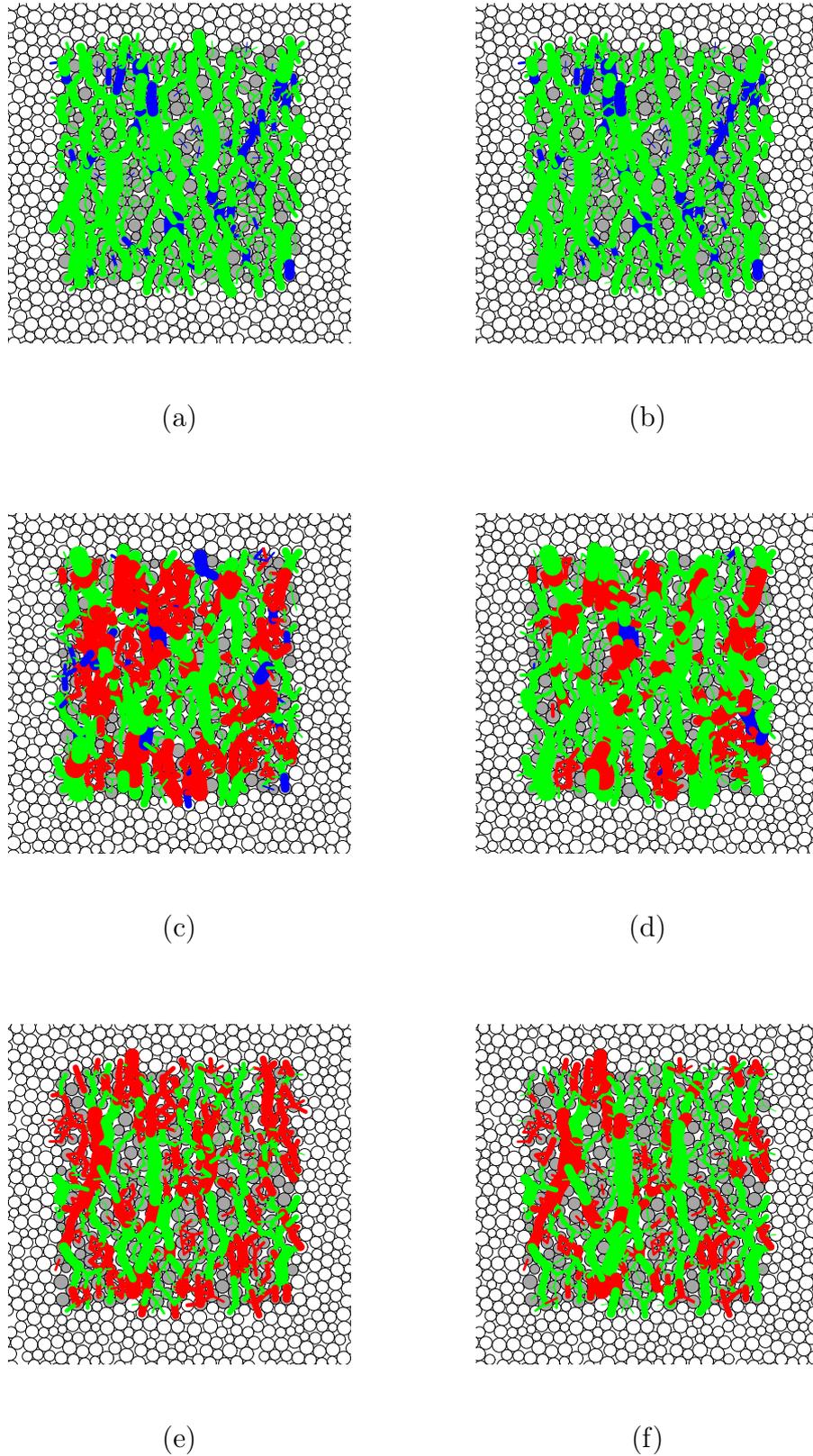


FIGURE 5.10 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_1 = 1.15\%$  (autour du pic) : (a,b) FDBMGC01 élément 32, 25 ; (c,d) FDBMGC02 élément 12, 24 ; (e,f) FDBMGC03 élément 32, 24. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec conventions suivantes : en rouge ( $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $p^* = 0.5$ ) et en vert (cohésion locale détruite).

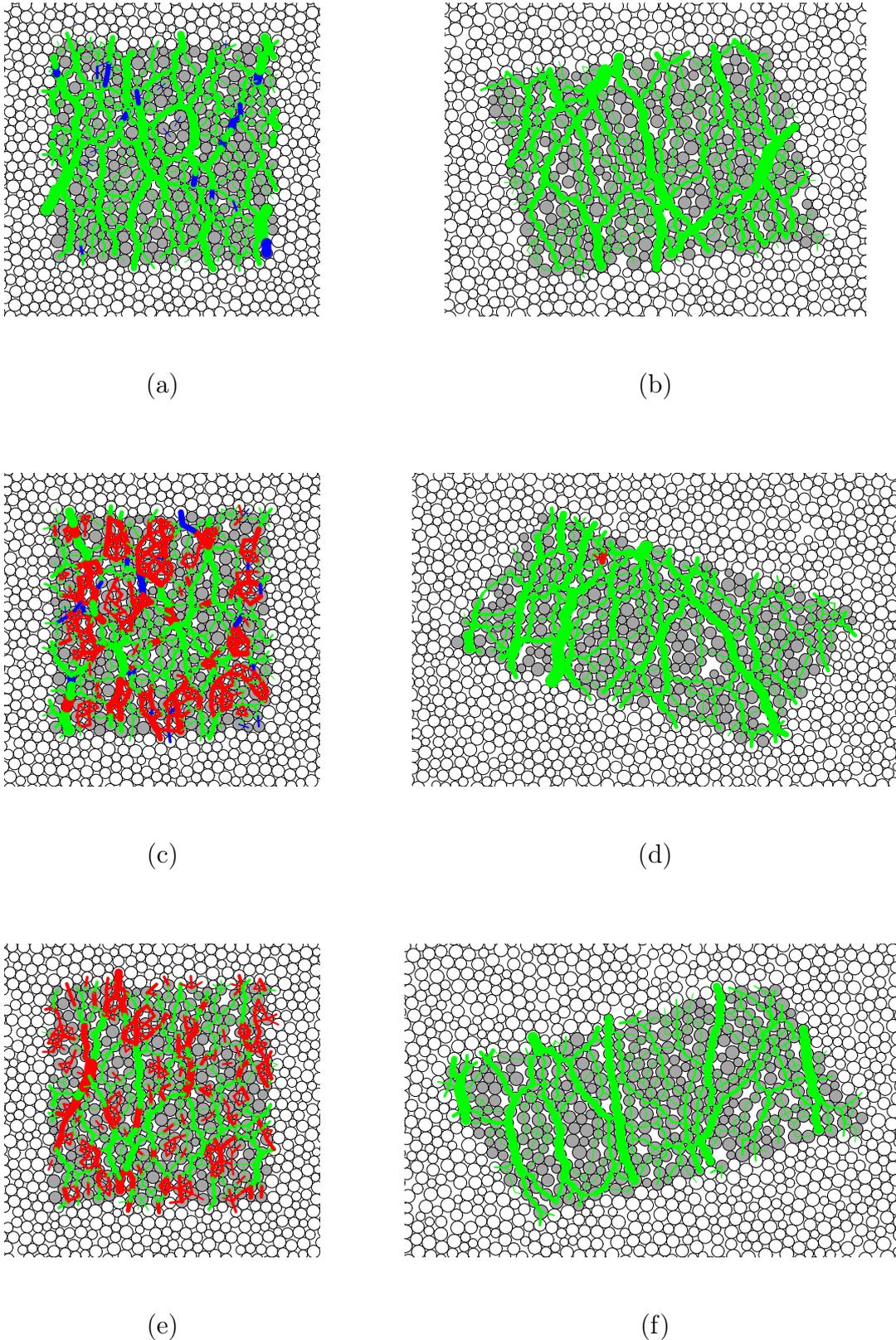


FIGURE 5.11 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_1 = 6\%$  (état critique) : (a,b) FDBMGC01 élément 32, 25 ; (c,d) FDBMGC02 élément 12, 24 ; (e,f) FDBMGC03 élément 32, 24. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec conventions suivantes : en rouge ( $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $p^* = 0.5$ ) et en vert (cohésion locale détruite).

Comme on a évoqué dans la section précédente, la simulation *FDBGMC02* montre le pic le plus élevé. Cette remarque est confirmée au niveau microscopique en comparant l'intensité des forces normales aux contacts dans les VER correspondants. Sur les figures 5.10.(c,e), on constate que ces forces sont plus importantes dans la simulation *FDBGMC02* que dans la simulation *FDBMGC03* (les traits sont plus gros).

À partir du pic jusqu'au palier final de la réponse de l'échantillon (qui est devenu une structure), la perte d'homogénéité de ce dernier augmente progressivement. Cela est confirmé par les évolutions différentes des VER considérés. La figure 5.11 donnent la microstructure de ces VER à  $\varepsilon_{11} = 6\%$ . Il est intéressant de noter qu'à partir du pic, le VER à l'extérieur de la bande n'évolue pas beaucoup en termes de la liste de contact et des liens cohésifs; il n'y a que les valeurs des forces normales dans les contacts qui changent, correspondant à la diminution de la force axiale sur l'échantillon dans la phase post-pic, diminution qui affecte aussi bien les contraintes aux points situés à l'extérieur de la bande, qu'à l'intérieur.

Au palier de résistance de la structure – échantillon, on trouve que les VER dans les bandes se déforment totalement différemment par rapport à l'état initial et qu'ils sont en rotation très marquée; aucun lien cohésif ne subsiste pour les VER dans la bande de cisaillement des essais *FDBMGC01*, *FDBMGC03*, et il n'en reste qu'un pour le VER situé dans la bande dans l'essai *FDBMGC02* (figure 5.11.d).

#### 5.4.4 Modélisation du grès tendre Fontainebleau

##### 5.4.4.1 Données expérimentales

Les données présentées ci-après ont été obtenues au laboratoire 3SR par Fonseca *et al.* [80] par le biais d'essais triaxiaux sur un grès. Le matériau étudié est le grès Fontainebleau. La porosité de ce grès est d'environ 21%. C'est un matériau granulaire dense avec beaucoup de contact entre les grains.

Les essais triaxiaux de compression ont été effectués sur les échantillons secs à la suite de compressions isotropes à 2MPa et 7MPa. La cellule triaxiale utilisée a été spécifiquement conçue pour pouvoir fonctionner dans le tomographe à rayon X du laboratoire 3SR, afin de pouvoir analyser la déformation du matériau à l'échelle des grains. Un chargement déviatorique est appliqué par le biais d'un piston à une vitesse de  $21 \mu\text{m}/\text{min}$ , soit  $\dot{\varepsilon} = 0.1 \%/ \text{min}$ . Tous les essais sont lubrifiés sauf celui FBS01-7MPa.

La figure 5.12 montre le comportement mécanique obtenu. Deux essais ont été faits pour chaque niveau de confinement. Toutes les courbes présentent un comportement fragile lorsque l'échantillon est soumis au chargement déviatorique. Les réponses en 7MPa montrent des pics et des états critiques plus élevés que les réponses en 2MPa.

Les faciès de ruptures des échantillons sont présentés sur la figure 5.13. Les coupes horizontales et verticales sont enregistrées à la première étape de chargement pour l'essai FBS03-2MPa (a) et les dernières étapes pour l'essai FBS03-2MPa (b), FBS04-2MPa (c)

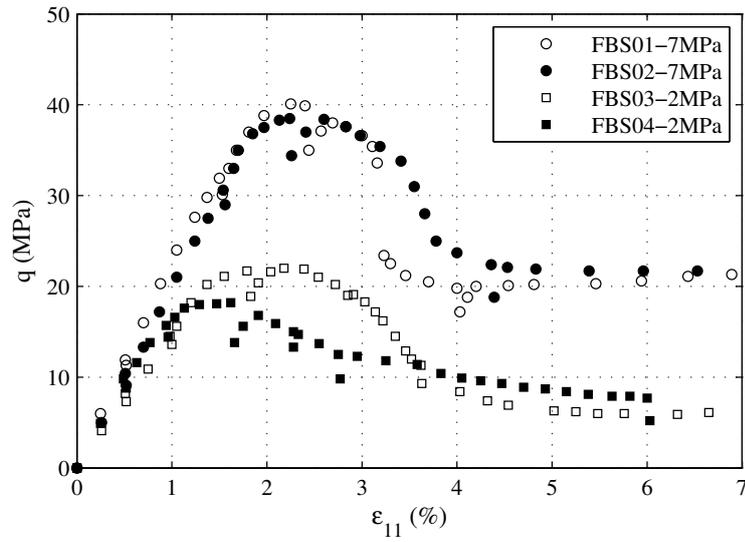


FIGURE 5.12 – Essais triaxiaux sur les grès Fontainebleau : évolution du déviateur de contrainte en fonction de la déformation verticale (d'après Fonseca *et al.* [80]).

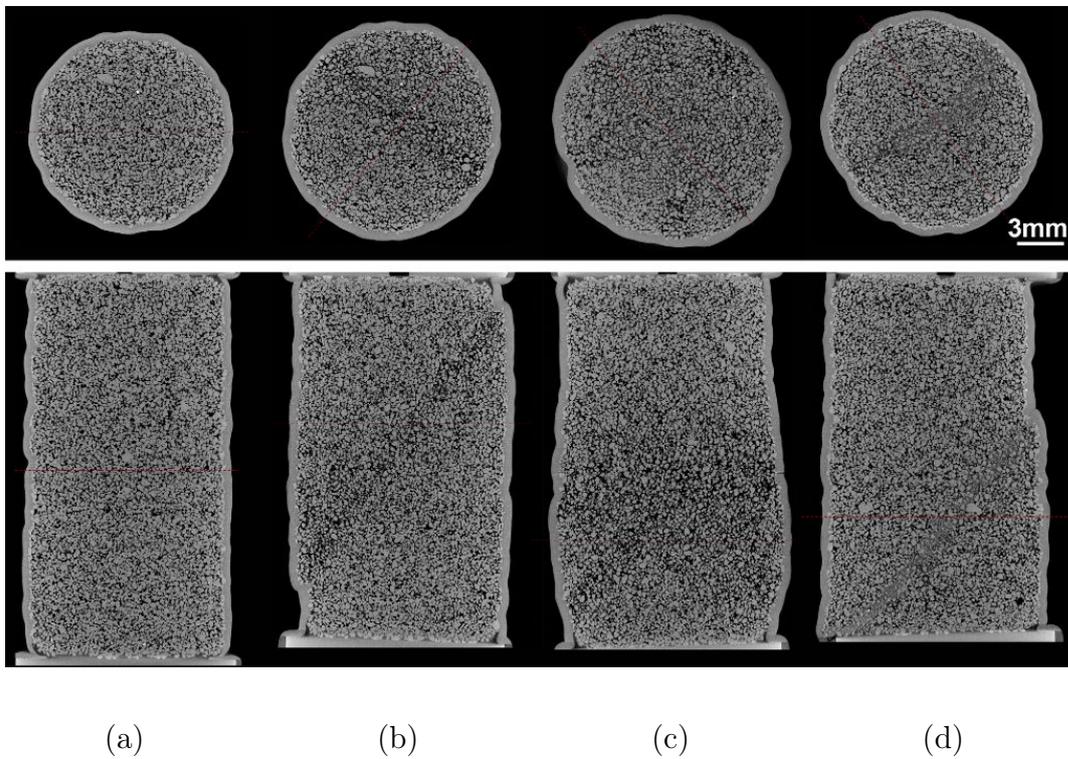


FIGURE 5.13 – Essais triaxiaux sur les grès Fontainebleau - rupture dans les échantillons : (a) état initial ; (b) FBS03-2MPa ; (c) FBS04-2MPa ; (d) FBS02-7MPa (d'après Fonseca *et al.* [80]).

et FBS02-7MPa (d).

On constate sur cette figure qu'une apparition de bande de cisaillement n'est avérée, à l'examen direct, que pour les essais FBS03-2MPa et FBS02-7MPa. Les orientations par rapport à l'axe principal mineur, *i.e.* *axe horizontal* valent respectivement  $53^\circ$  et  $48^\circ$ .

#### 5.4.4.2 Paramètres microscopiques

Comme dans le cas des essais biaxiaux, le modèle de contact utilisé dans les simulations du grès de Fontainebleau est le modèle "cohésif cimenté" introduit au chapitre 2. On ne peut pas ignorer cependant que la modélisation en 2D d'un matériau qui est intrinsèquement 3D reste par essence une démarche analogique et heuristique, qui se justifie dans notre étude en tant qu'étape vers une modélisation multi-échelle qui devra nécessairement évoluer vers une prise en compte de la 3D à l'échelle micro. La comparaison simulation-expérience présentée ici restera donc à caractère qualitatif et illustratif.

Le calage du modèle du modèle DEM consiste à déterminer les paramètres microscopiques qui vont permettre de reproduire au mieux les données expérimentales. Pour ce modèle microscopique, ce sera d'une part le niveau de raideur  $\kappa$ , le rapport entre les raideurs normale et tangentielle  $k_n/k_t$ , la raideur en rotation  $k_R$  le niveau de cohésion  $p^*$ , les résistances en traction, en cisaillement et en rotation, le coefficient d'exposant  $n$ . D'autre part, c'est la constitution de l'assemblage du VER qui joue aussi un rôle important. Elle est liée à la distribution de taille des grains, la liste de contact, le nombre de coordination.

Le VER est préparé suivant une manière décrite dans la section 2.4 jusqu'à atteindre un état de contrainte initial choisi (ici, l'état de contrainte isotrope 7MPa). Ensuite, les paramètres sont ajustés pour représenter au mieux la réponse expérimentale.

La structure des grès s'approche d'un matériau de type sable constituée de grains liés par des joints cimentés. Pour modéliser les grès de Fontainebleau choisis, le VER à l'échelle microscopique est celui de 400 grains. C'est un assemblage très dense (l'indice des vides  $e = 0.179$ ) mais un nombre de coordination moyen  $z = 3.1^3$ . On sait bien que  $e$  et  $z$  dans un assemblage 2D n'est pas représentatif pour le cas 3D. Le choix de ces facteurs est effectué ici non pas sur des données expérimentales de  $e$  et  $z$ , comme il faudrait le faire si le modèle micro était 3D, mais au vu d'un calage au mieux des courbes expérimentales globales. La microstructure de l'échantillon numérique est ainsi illustrée sur la figure 5.14. Les caractéristiques du VER utilisées sont données dans le tableau 5.2. À l'instant initial, le VER n'est pas encore endommagé, les liens cohésifs existent dans tous les contacts.

---

3. Un assemblage de 400 disques sans frottement a un indice des vides de l'ordre de 0.18 mais un nombre de coordination fort  $z \approx 4$ . Dans le cas décrit ici, une opération de préparation spécifique du VER a permis d'obtenir un VER très dense mais moyennement coordonné.

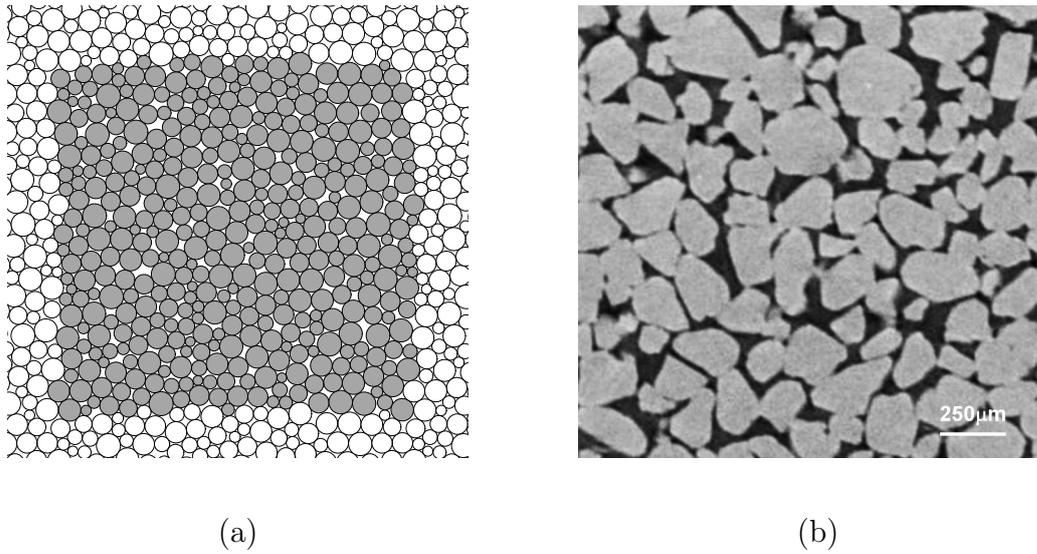


FIGURE 5.14 – Modélisation du grès Fontainebleau. Microstructure du VER : (a) numérique à l'échelle microscopique avec CLP ; (b) grès tendre Fontainebleau (d'après Fonseca *et al.* [80]).

TABLE 5.2 – Modélisation du grès Fontainebleau : Caractéristiques du VER.

de grains	de contacts	Nombre		Indice
		de contacts collés	de coordination	des vides
400	609	609	3.1	0,179

TABLE 5.3 – Modélisation du grès Fontainebleau : Paramètres du modèle microscopique de type 3.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (\sigma_0 \cdot a)$	Niveau de raideur	750
$k_n / k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	6
$\lambda$	Résistance en cisaillement/traction	1
$n$	Exposant du critère de rupture	2

Les autres paramètres du modèle micromécanique "cohésif-cimenté" sont présentés dans le tableau 5.3.

#### 5.4.4.3 Comparaison expérience - modélisation

L'objectif de cette section est de modéliser l'essai FBS02-7MPa.

La réponse multi-échelle FEM  $\times$  DEM (l'essai *FDC-FBS*<sup>4</sup>) est comparée directement avec les données expérimentales disponibles. Les courbes macroscopiques (figure 5.15) montrent une bonne cohérence entre ces résultats. Les courbes macroscopiques trouvent leur pic à même valeur de la déformation axiale ( $\varepsilon_{11}$ ) avec une valeur de contrainte déviatorique  $q \approx 38$  MPa, et puis descendent vers un même plateau de contrainte.

À la phase initiale de montée, la courbe FEM  $\times$  DEM donne une raideur plus raide en terme du module élastique. En plus, il semble que dans cette phase, un comportement linéaire est observé expérimentalement, mais le résultat numérique donne celui non-linéaire.

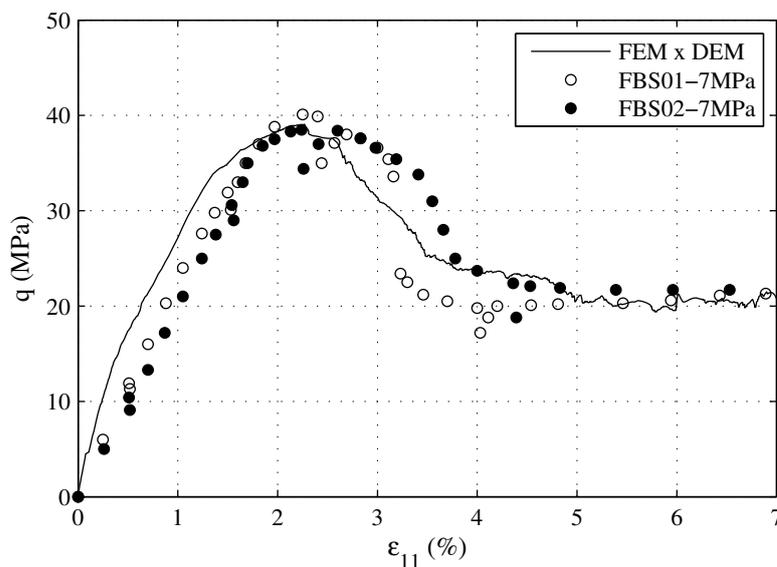


FIGURE 5.15 – Modélisation du grès Fontainebleau : Comparaison entre le résultat numérique (FDC-FBS) / expérimental (FBS02-7MPa).

Une simulation biaxiale en extension (notée *FDE-FBS*<sup>5</sup>) est également simulée par la méthode numérique FEM  $\times$  DEM. Cet essai est similaire à l'essai biaxial en compression (voir la section 5.4). La seule différence est de tirer la surface supérieure au lieu de la compresser. La réponse de cette simulation est montrée sur la figure 5.16. On voit très bien que la courbe est non-linéaire dès le début de l'extension ( $\varepsilon_{11} = 0.1\%$ ), et tend vers un palier de contrainte. Des observations similaires sont obtenues par Bésuelle *et al.* [15].

4. FDC-FBS : **FEM**  $\times$  **DEM** Compression – Fontainebleau Soft

5. FDE-FBS : **FEM**  $\times$  **DEM** Extension – Fontainebleau Soft

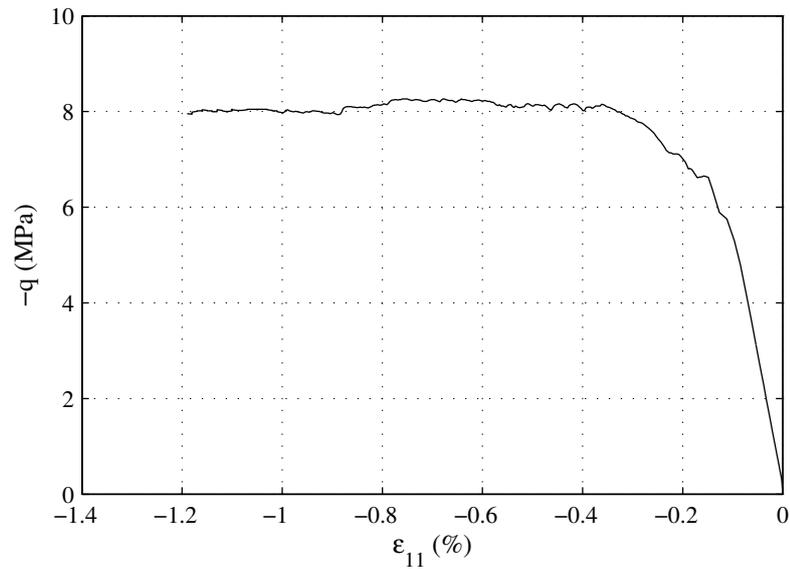


FIGURE 5.16 – Essai d’extension (FDE-FBS) par la simulation FEM  $\times$  DEM.

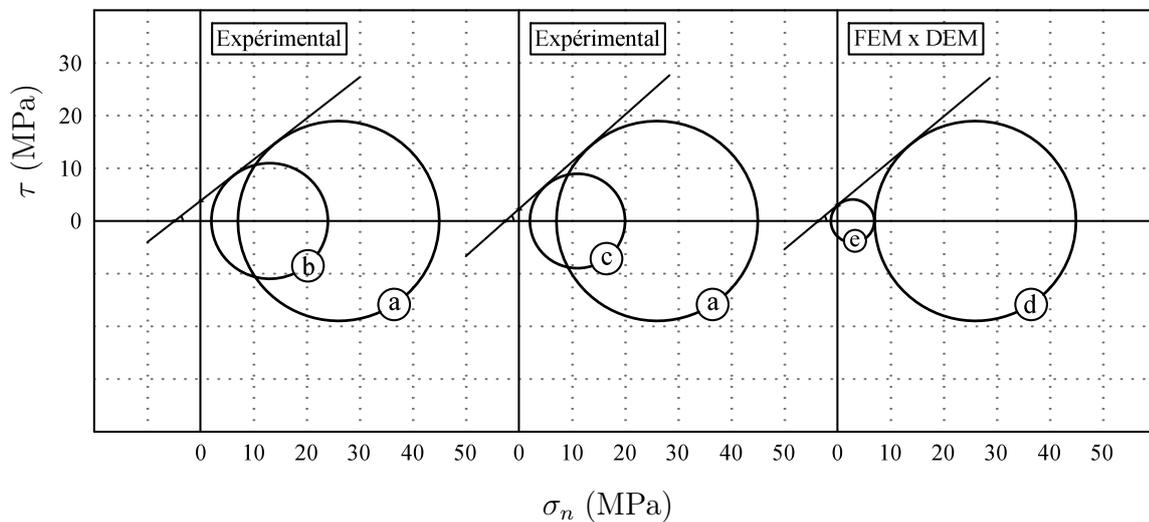


FIGURE 5.17 – Cercles de Mohr au pic des essais expérimentaux et numériques. Sur cette figure, les cercles (a), (b), (c) sont respectivement les cercles de Mohr des essais expérimentaux FBS02-7MPa, FBS03-2MPa, FBS04-2MPa; les cercles (d) et (e) sont ceux issues des essais numériques FDC-FBS (en compression) et FDE-FBS (en extension) par couplage FEM  $\times$  DEM.

Le critère Mohr-Coulomb est largement utilisé pour les matériaux granulaires cohésifs ou cimentés. Avec ce critère, la rupture est modélisée par l'équation  $\tau = \sigma_n \tan \varphi + C$ , avec deux paramètres intrinsèques : la macroscopique cohésion  $C$  et l'angle de frottement interne  $\varphi$ .

Pour avoir une vision plus nette sur les caractéristiques du matériau expérimental et simulé, on trace les cercles de Mohr dans le plan de contrainte  $(\sigma_n, \tau)$  (voir la figure 5.17) et puis on détermine les paramètres du matériau correspondant, la cohésion macroscopique  $C$  et l'angle de frottement interne  $\varphi$ . Comme les essais expérimentaux à faible confinement (FBS03-2MPa, FBS04-2MPa) montrent deux pic de contrainte différents (figure 5.12), on présente dans la figure 5.17 à gauche la combinaison (FBS02-7MPa, FBS03-2MPa) ; et au milieu (FBS02-7MPa, FBS04-2MPa). Les cercles de Mohr issus des simulations numériques (FDC-FBS et FDE-FBS) sont montrés sur l'image à droite. À partir de ces cercles, on peut déterminer  $(C, \varphi)$  correspondant à chaque cas. Ces valeurs sont résumées dans le tableau 5.4.

TABLE 5.4 – Modélisation du grès Fontainebleau : Paramètres du critère Mohr-Coulomb.

Combinaison	$C$ (MPa)	$\varphi$ ( $^{\circ}$ )
Expérimentale : FBS02, FBS03	3.78	38
Expérimentale : FBS02, FBS04	2.22	42
<b>Moyenne des expérimentations</b>	<b>3.00</b>	<b>40</b>
<b>Numérique : FDC-FBS, FDE-FBS</b>	<b>2.94</b>	<b>40</b>

Les paramètres  $(C, \varphi)$  obtenus grâce aux essais expérimentaux sont assez différents :  $(C_1, \varphi_1) = (3.78 \text{ MPa}, 38^{\circ})$  pour la première combinaison et  $(C_2, \varphi_2) = (2.22 \text{ MPa}, 42^{\circ})$  pour la deuxième alors que les essais numériques donnent  $(C_3, \varphi_3) = (2.94 \text{ MPa}, 40^{\circ})$ . Il est très intéressant de noter que  $((C_1 + C_2)/2, (\varphi_1 + \varphi_2)/2) \approx (C_3, \varphi_3)$ , c'est-à-dire que les calculs numériques donnent des résultats qui sont les moyennes des essais expérimentaux. Ces résultats montrent donc une très bonne comparaison entre les résultats expérimentaux et ceux numériques en termes des caractéristiques du matériau.

La localisation de la déformation se produit dans tous les cas expérimentaux et numériques. Les bandes de cisaillement observées dans l'expérimentation montrent une orientation de  $48^{\circ}$  et  $53^{\circ}$  par rapport à l'axe horizontale (figure 5.13). Une bande de cisaillement est également obtenue dans l'essai biaxial en compression. Elle s'oriente environ  $56^{\circ}$  par rapport à l'axe principale mineure, *i.e.* l'axe horizontale. Les figures 5.18 et 5.19 donnent la structure déformée ainsi que la carte du second invariant du tenseur de déformation à différents instants ( $\varepsilon_{11} = 1\%$ ,  $\varepsilon_{11} = 4\%$ ,  $\varepsilon_{11} = 8\%$ ) montrant la formation et le développement de cette bande.

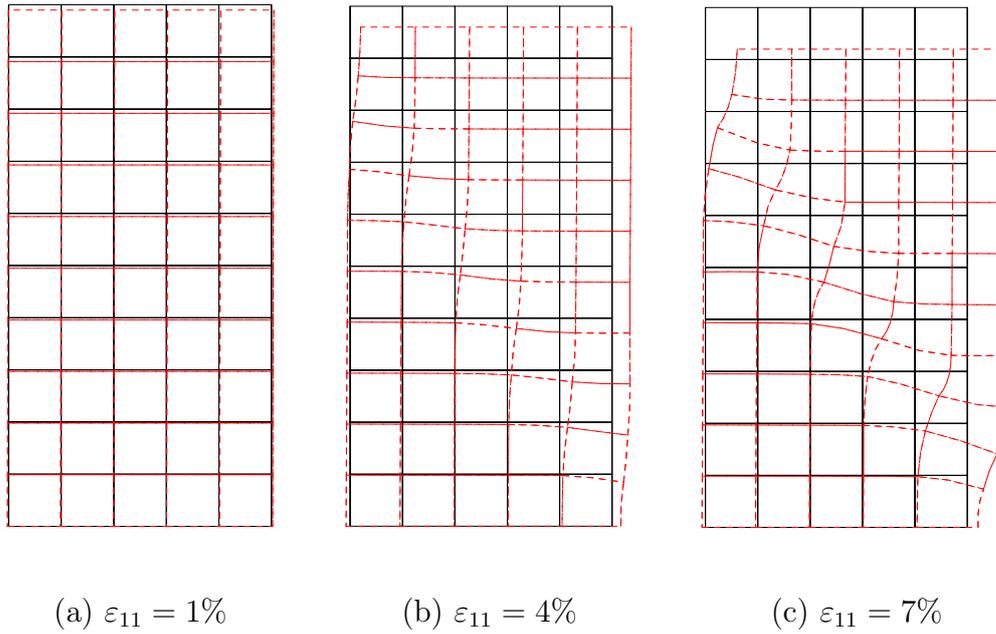


FIGURE 5.18 – Modélisation du grès Fontainebleau : Structure déformé à différents  $\varepsilon_{11}$  dans un essai biaxial en compression.

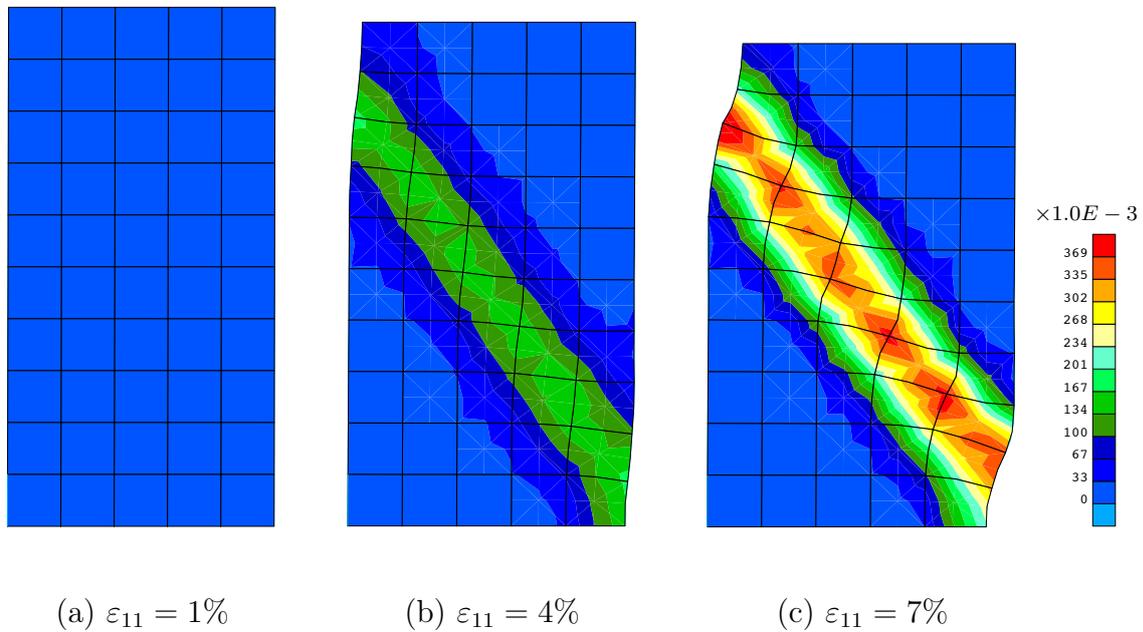


FIGURE 5.19 – Modélisation du grès Fontainebleau : Carte du second invariant du tenseur de déformation à différents  $\varepsilon_{11}$  dans un essai biaxial en compression.

Une comparaison expériences (sur le grès tendre de Fontainebleau) / numériques (par la méthode FEM  $\times$  DEM) est présentée dans cette partie. Les pics obtenus se comparent bien aux expériences. Le même plateau de contrainte obtenu au final montre également que l'assemblage numérique choisi (par les disques 2D) reproduit bien le matériau choisi au niveau de l'angle de frottement interne ( $\varphi$ ). Comme on l'a dit en introduction de cette section sur le grès de Fontainebleau, on ne peut pas ignorer cependant que le matériau réel est 3D et non pas 2D comme la simulation réalisée. Il n'est donc pas très utile d'aller plus loin que les grandes tendances dans la comparaison modèle – expérience, ni dans un calage plus "physique" des paramètres micro.

## 5.5 Essai sur un cylindre creux

### 5.5.1 Géométrie et conditions aux limites

La géométrie et les conditions aux limites du problème sont similaires à celles du cylindre creux traité dans le chapitre 4 (cf. la section 4.5.1). Ce cylindre creux est discrétisé en 400 éléments finis Q8. Le nombre point d'intégration utilisé pour chaque élément est de quatre.

Le chargement est effectué en deux étapes (voir la figure 4.24) : la première consiste à diminuer la contrainte à la paroi intérieure  $\sigma_{int} = \sigma_0 \rightarrow 0$  en gardant la contrainte extérieure en constante. Cette phase dure  $4200 s^6$  ; dans la deuxième phase durant  $5800 s$ , la contrainte extérieure ( $\sigma_{ext}$ ) est montée de  $\sigma_0$  à  $4\sigma_0$ , en même temps la contrainte intérieure est maintenue  $\sigma_{int} = 0$ .

### 5.5.2 Paramètres microscopiques

On utilise le modèle de contact "cohésif cimenté". Le VER utilisé en chaque point de Gauss est composé de 400 grains, initialement très dense ( $e = 0.183$ ) avec un nombre de coordination très élevé ( $z = 4.2$ ). Tous les contacts sont initialement collés. Comme pour tous les calculs numériques présentés précédemment, le VER utilisé dans le calcul FEM  $\times$  DEM est initialement identique et à l'état de contrainte isotrope à tous les points d'intégration.

En ce qui concerne le modèle micromécanique, les paramètres de la loi de contact (type cohésif cimenté) sont donnés dans le tableau 5.5. Ces paramètres sont les mêmes que ceux communs aux 3 VER de la section 5.4, sauf  $p^*$  qui est différent dans chacun de ces VER, voire hétérogène dans le cas du VER à *clusters*. Ici,  $p^*$  vaut 1.

---

6. Le temps affiché ici est un simple paramètre d'avancement, car nous ne considérons pas de viscosité dans le comportement homogénéisé du matériau, ni d'écoulement dans la porosité, qui pourrait introduire la grandeur temps dans le problème.

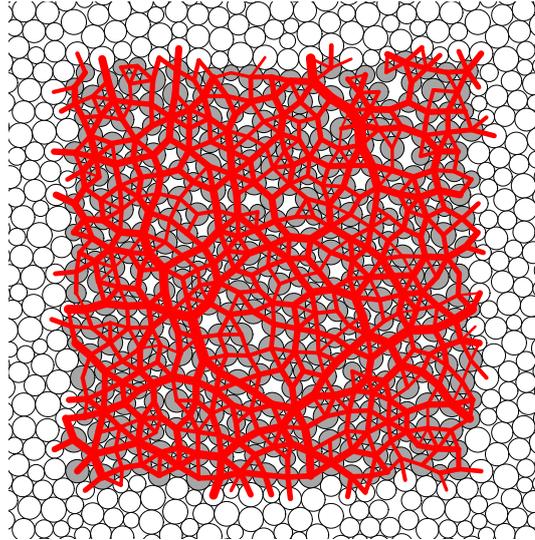


FIGURE 5.20 – Modélisation d'un cylindre creux. VER 400 grains avec CLP utilisé à l'instant initial.

TABLE 5.5 – Essai sur un cylindre creux : Paramètres du modèle microscopique de type 3.

	Paramètre	Valeur
$\kappa = k_n / (\sigma_0 \cdot a)$	Niveau de raideur	1000
$k_n / k_t$	Raideur normale/Raideur tangentielle	1
$\mu$	Coefficient de frottement intergranulaire	0.5
$p^*$	Niveau de cohésion	1
$\lambda$	Résistance en cisaillement/traction	1
$n$	Exposant du critère de rupture	2

### 5.5.3 Résultats numériques

#### 5.5.3.1 Analyse macroscopique

Comme dans la modélisation du même problème effectuée au chapitre 4, qui impliquait un matériau différent car doté d'une cohésion de type "attractif pur", on obtient ici à nouveau un processus de déformation qui se localise en plusieurs bandes de cisaillement. En comparant avec les résultats présentés dans la section 4.5.3.1, on constate que les bandes de cisaillement se déclenchent plus tôt, en fin de la première phase de déchargement (à  $t = 4200$  s,  $\sigma_{int} = 0$  et  $\sigma_{ext} = \sigma_0$ ). À ce stade, cinq bandes de cisaillement sont visibles dont trois bandes autour de la paroi, une bande sur le côté verticale et une autre sur le côté horizontal.

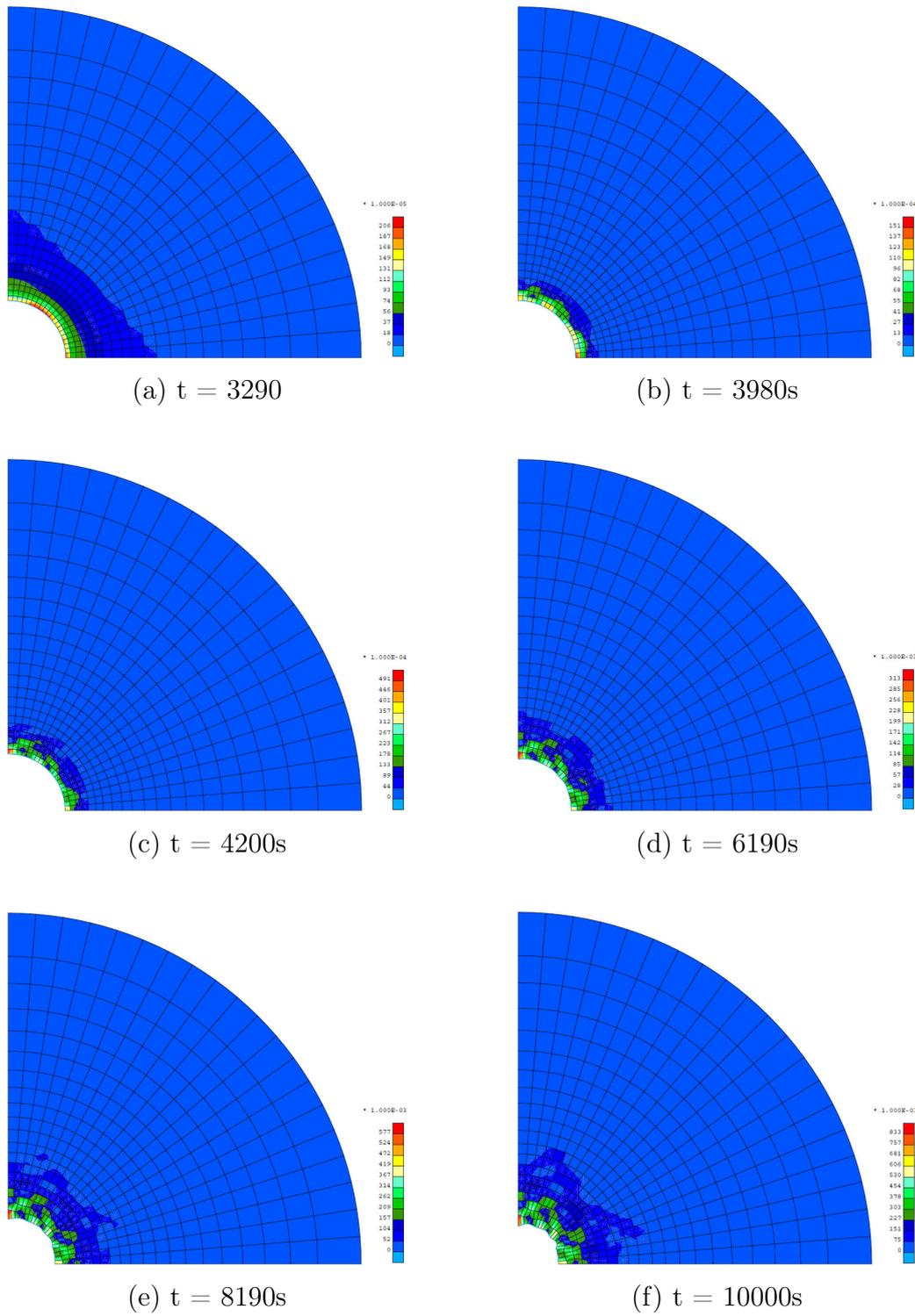


FIGURE 5.21 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations.

En effectuant la deuxième phase ( $\sigma_{ext} = \sigma_0 \rightarrow 4\sigma_0$ ), ces bandes continuent à se développer. La formation des bandes est assez stable à  $t = 6190 s$  avec une nouvelle bande est observée, donnant un nombre total des bandes à six. Lors de leur développement, ces bandes se croisent et on constate qu'il existe des réflexions des bandes sur les deux côtés horizontal et vertical. En fin du chargement ( $t = 10000 s$ ), on observe une distribution assez symétrique des bandes (voir l'allure générale des bandes sur la figure 5.22, néanmoins leur intensité sont différentes : plus importantes vers l'axe vertical et plus faibles vers l'axe horizontal).

En accord avec ces observations, le déplacement du point situé sur l'axe vertical est plus important que celui sur l'axe horizontal. En raison de l'apparition de plusieurs bandes de cisaillement, la paroi intérieure se déforme et atteint au final une forme très irrégulière.

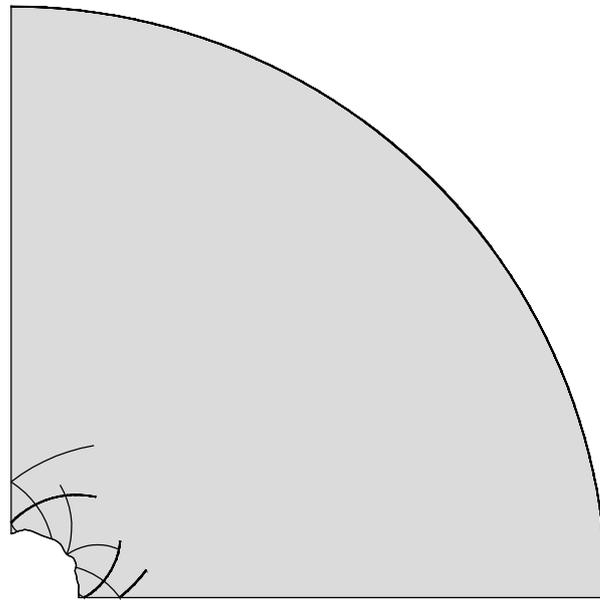


FIGURE 5.22 – Modélisation d'un cylindre creux : Allure des bandes de cisaillement à  $t = 10000 s$ .

### 5.5.3.2 Analyse microscopique

L'analyse microscopique dans quelques points d'intégrations choisis est présentée dans cette section. Ces points sont donnés par la figure 5.23.

Les éléments 1, 2, 12, 20 se situent sur la première couche, *i.e.* la paroi intérieure, dans une zone de déformation intense. C'est là où plusieurs bandes de cisaillement ont commencé. Les éléments 37, 75, 91 se situent également dans le développement des bandes de cisaillement, mais dans les couches plus loin de la paroi intérieure. L'élément 355 est dans la zone lointaine, dans une couche proche de la paroi extérieure.

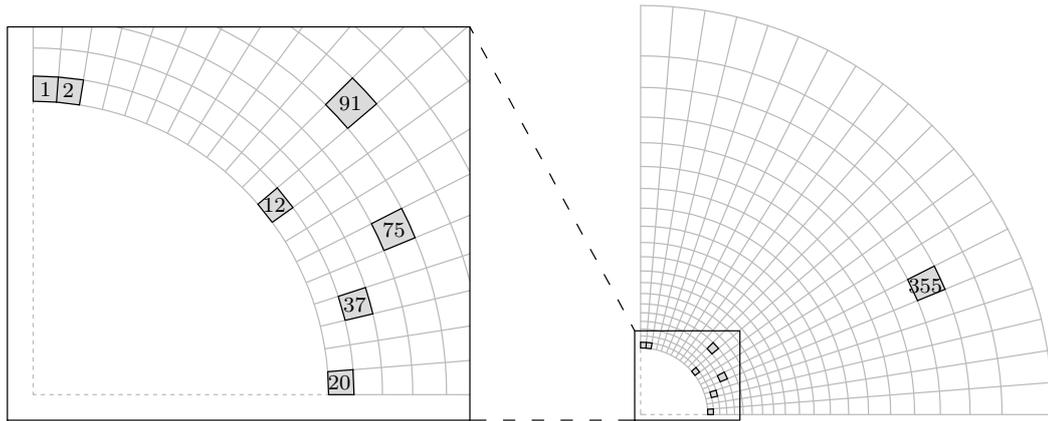
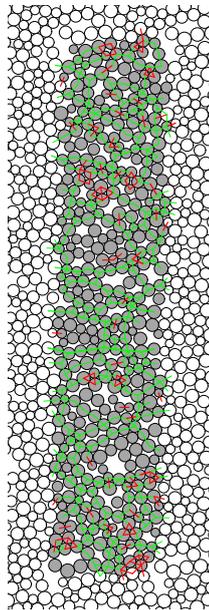


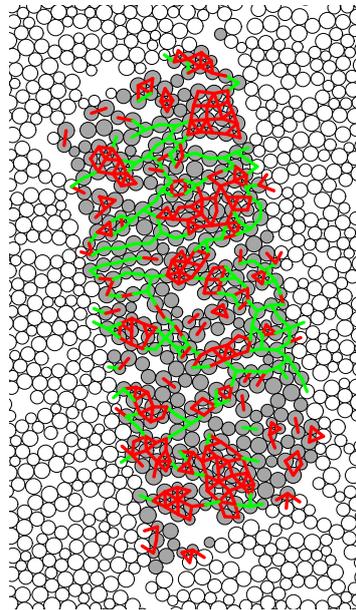
FIGURE 5.23 – Modélisation d'un cylindre creux : positions des éléments considérés.

L'élément 1 se trouve dans un endroit où une bande de cisaillement prend naissance. À l'état final, c'est aussi l'endroit dans la structure où l'intensité de la déformation est maximale. Le VER associé à cet élément subit une déformation intense sur un mode d'extension. Ce VER est allongé et conforme à la déformée de l'élément 1. On observe que presque tous les contacts cohésifs sont cassés dans ce VER, ils sont illustrés par les traits verts dont on voit bien qu'ils dominent dans le VER. L'élément 2, situé à côté de l'élément 1 subit également une déformation importante, quoique moindre que le 1. Ce VER est allongé lui aussi, mais avec une rotation assez importante. On a l'impression que la densité des cohésions locale détruites est beaucoup moins que l'élément 1, mais en effet, cette impression vient du fait d'un nombre de contacts est relativement faible dans ce VER, plusieurs grains sont libres sans contacts. Situé au milieu de la première couche, l'élément 12 est soumis à un cisaillement très fort, représentant une forme parallélogramme en fin du chargement. L'élément 20 est aussi un endroit où une bande de cisaillement a commencé. Dans cet élément, la déformé du VER est similaire à celui dans l'élément 2. La seule différence entre ces deux éléments, *i.e.* 2 et 20 est l'axe de la déformation principale majeure. Cette différence vient de l'emplacement de ces VER : l'élément 2 est proche de la paroi verticale alors que l'élément 20 est sur la paroi horizontale.

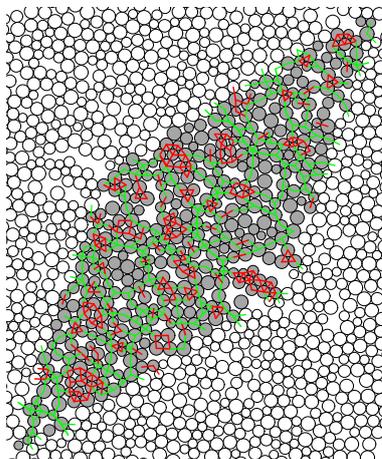
Les éléments 37, 75 et 91 sont situés sur le tracé de la propagation des bandes de cisaillement mais l'intensité de la déformation dans leur position est différente. Les VER associés à ces éléments se déforment ainsi beaucoup par rapport à leur forme initiale mais moins que les VER dans les éléments de la première couche, *i.e.* les éléments 1, 2, 12, 20.



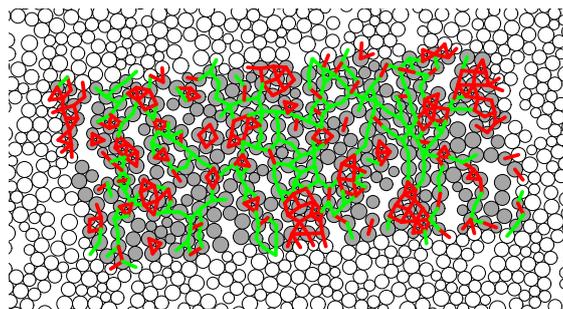
(a) Élément 1



(b) Élément 2

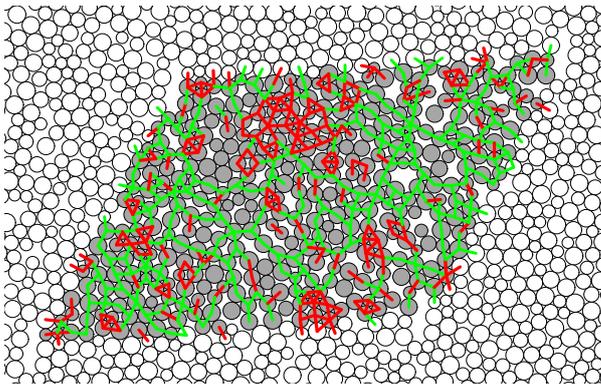


(c) Élément 12

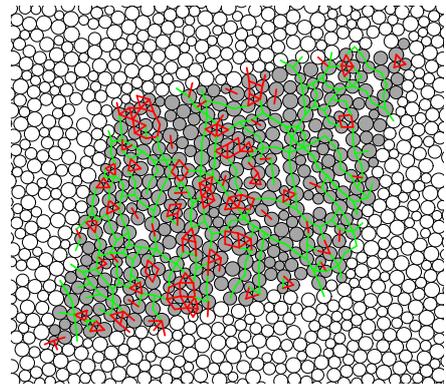


(d) Élément 20

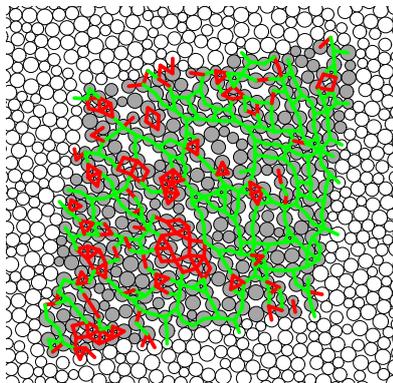
FIGURE 5.24 – Évolution des microstructures des éléments 1, 2, 12, 20. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec conventions : en rouge ( $p^* = 1.0$ ) et en vert (cohésion locale détruite).



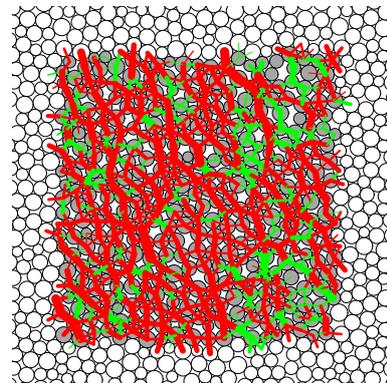
(a) Élément 37



(b) Élément 75



(c) Élément 91



(d) Élément 355

FIGURE 5.25 – Évolution des microstructures des éléments 37, 75, 91, 355. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec conventions : en rouge ( $p^* = 1.0$ ) et en vert (cohésion locale détruite).

Parmi les VER étudiés, le VER de l'élément 355 est dans une zone très loin des zones localisées. Par rapport à son état initial, ce VER garde encore sa forme, mais les chaînes des forces évoluent avec la présence des ruptures des liens cohésifs locaux. On constate qu'il existe plusieurs contacts qui n'ont pas de cohésion, car avant la localisation, des ruptures micro-fissure sont produites dans tous les VER du domaine.

On constate que les VER dans les éléments 1, 12, 20 et notamment l'élément 2 s'approchent au cas du "gaz granulaire". Ce problème est rencontré lors que le VER est en forte extension. Dans ce cas, la formulation du calcul de la contrainte dans un VER de Weber [183] n'est plus adaptée, le calcul doit être arrêté. Cette limitation du modèle reste à lever et ça nécessite également de définir un critère grâce auquel on peut évaluer l'état du VER et pouvoir savoir si c'est raisonnable de continuer les calculs ou les arrêter.

## 5.6 Conclusion

Une nouvelle loi de contact, basée sur les travaux antérieurs de Delenne [57], Delenne *et al.* [59], est intégrée dans l'outil numérique développé. Cette nouvelle intégration a pour objectif de modéliser les matériaux granulaires cimentés.

Des simulations numériques des essais biaxiaux ont été effectués dans ce chapitre en utilisant différents types des microstructures à l'échelle microscopique. La possibilité de définir des macro-grains, éventuellement cassables, sous la forme de *clusters* de particules liées par des contacts cohésifs plus résistants, est particulièrement intéressante et ouvre des perspectives stimulantes.

En faisant des comparaisons avec les données disponibles sur les grès tendres de Fontainebleau (Equipe GDR, Laboratoire 3SR, Grenoble), les résultats numériques montrent une bonne cohérence qualitative entre les aspects expérimentaux et numériques, et ouvre la perspective d'utiliser ces approches dans la modélisation des vrais matériaux, sans oublier toutefois que le passage à une modélisation micro 3D est indispensable pour cela. Finalement, un essai sur un cylindre creux du même type que celui du chapitre 4 a été fait avec ce modèle micromécanique "cohésif-cimenté". Des bandes de cisaillement, différentes de celles obtenues au chapitre 4, sont observées et les analyses des VER en quelques points de Gauss donnent des résultats très intéressants, confirmant la pertinence d'utiliser cette méthode FEM  $\times$  DEM pour d'autres problèmes géomécaniques et géotechniques.

---

## Conclusions et Perspectives

---

### Conclusions générales

Le travail de recherche exposé dans ce mémoire avait pour objectif de construire une loi équivalente à partir d'un assemblage granulaire constitué d'un certain nombre de grains en se basant sur la méthode des éléments discrets et puis de l'implémenter dans un code de calcul en éléments finis. Le code multi-échelle développé a permis de simuler avec succès des essais typiques de laboratoire (essais biaxiaux) ainsi qu'un exemple de décompression dans un tunnel (cylindre creux).

Une étude bibliographique sur le comportement des milieux granulaires, et sur les méthodes numériques classiquement utilisées pour modéliser ces milieux particuliers a été menée, notamment sous l'angle de la comparaison des points forts et des points faibles des approches FEM et DEM. Cette étude bibliographique a permis de fixer le cadre, et de confirmer l'intérêt de l'approche multi-échelle numérique qui a fait l'objet de cette thèse : il s'agit de construire une approche numérique basée sur la FEM, mais dans laquelle la loi (écriture analytique) de comportement phénoménologique est remplacée par une loi numérique générée par la DEM. Les approches multi-échelle sont de plus en plus souvent rencontrées dans la littérature ; une revue de ces approches est aussi proposée dans ce premier chapitre.

Le second chapitre se concentre sur la modélisation des milieux granulaires par la méthode aux éléments discrets. Une présentation concise des différentes lois de contact mises en œuvre dans cette thèse est effectuée : loi de contact "frottante", loi de contact "cohésive attractive pure" et enfin une loi de contact "cohésive-cimentée". Afin d'assurer au mieux l'homogénéité initiale des assemblées de particules, nous avons choisi d'utiliser des conditions aux limites bi-périodiques. Ces modèles et ces dispositions une fois implémentés dans notre code DEM, nous les avons validés dans des simulations directes, c'est-à-dire en DEM pure, d'essais de type biaxial, ce qui a aussi permis d'étudier la sensibilité à différents paramètres dont la taille du VER, ainsi que les effets de localisation à l'échelle micro.

On s'est ensuite attaché à construire, sur la base de la réponse mécanique d'un faible nombre de particules (400) simulée par DEM, une loi de comportement numérique par la technique *d'homogénéisation numérique*. Dans le chapitre 3, les propriétés de cette loi numérique ont été étudiées via la matrice tangente à la loi, par l'analyse de la

localisation de la déformation en bandes de cisaillement et par les réponses mécaniques représentées sur le diagramme de Gudehus. Une application à la modélisation de chemins de contrainte rencontrés lors de l'excavation d'ouvrages souterrains est également faite dans ce chapitre. En implémentant la loi DEM dans le logiciel ACTIV, de tels chemins de sollicitations en contrainte peuvent être appliqués au niveau d'un point matériel et la réponse de la loi numérique homogénéisée le long de ces chemins est calculée, en tant que réponse macroscopique, sans faire appel à un code FEM. Les résultats obtenus montrent que le principe d'homogénéisation numérique est tout à fait fonctionnel et prêt à être intégré dans une approche multi-échelle FEM  $\times$  DEM.

L'objectif final de ce travail est d'obtenir un *outil de calcul numérique multi-échelle en combinant la FEM et la DEM*. Pour ce faire, l'étape suivante est d'intégrer la loi DEM dans un code de calcul en éléments finis, qui sont capables des modéliser des problèmes aux limites en grandes déformations. Le code FEM choisi dans cette étude est le code Lagamine de l'Université de Liège (Belgique). Une implémentation de la loi DEM dans Lagamine est présentée d'une manière détaillée. L'outil numérique multi-échelle obtenu est d'abord validé par simulations d'essais élémentaires de type biaxial. Le choix d'un VER approprié à l'échelle microscopique, *i.e. au niveau du point d'intégration de Gauss*, est également discuté. En raison de la nature de la DEM, des sauts inattendus de contraintes sont rencontrés assez souvent, perturbant la matrice tangente consistante lors de l'utilisation de la méthode Newton-Raphson. Une correction par une matrice auxiliaire élastique est proposée. Cette proposition a permis de surmonter avec succès les difficultés discutées ci-dessus. En utilisant l'outil numérique développé, des essais biaxiaux et un essai sur un cylindre creux sont réalisés donnant des résultats extrêmement intéressants en terme de la localisation de la déformation. Pour chaque calcul, les analyses microscopiques sont faites sur quelques VER choisis. Ces résultats ont montré la robustesse remarquable de la méthode FEM  $\times$  DEM pour des problèmes en grandes déformations et laissent espérer une application fructueuse à des problèmes géomécaniques et géotechniques impliquant des matériaux granulaires.

Dans le chapitre 5, un pas supplémentaire est franchi en mettant en œuvre au niveau micro la loi de contact "cohésive-cimentée", qui ouvre la possibilité de définir des clusters dans le VER. L'utilisation de ce modèle de contact dans le cadre FEM  $\times$  DEM est illustrée avec une série de simulations d'essais biaxiaux munis de différentes microstructures, et ouvre des perspectives stimulantes. Des comparaisons de simulations avec les données d'essais réalisés récemment sous micro-tomographe au Laboratoire 3SR sur les grès tendres de Fontainebleau sont faites, et montrent une bonne cohérence qualitative entre les aspects expérimentaux et numériques. Finalement, une simulation d'essai sur un cylindre creux du même type que celui du chapitre 4 est également faite avec cette loi de contact cohésive-cimentée. Des bandes de cisaillement sont observées, conformément aux observations de terrain dans les galeries profondes, et les analyses en quelques points de Gauss donnent des résultats très intéressants.

## Perspectives

Ce travail de thèse a produit avec succès un outil numérique multi-échelle en combinant la FEM et la DEM. Grâce à cet outil, des résultats intéressants sont obtenus en termes de la localisation de la déformation. Cette méthode FEM  $\times$  DEM est donc très prometteuse et ouvrira donc plusieurs chantiers de travaux dans l'avenir. Ces perspectives portent sur plusieurs volets concernant notamment : l'approche numérique et les applications.

### Au niveau de l'approche numérique

#### *Échelle macroscopique*

Un premier objectif est la diminution du temps de calcul. Les constatations précédentes montrent que le temps de calcul par cette méthode est relativement important par rapport à ceux par FEM classique. Les développements numériques comme la parallélisation du code FEM est nécessaire afin d'accroître l'efficacité de cette méthode FEM  $\times$  DEM.

Les analyses en bande de cisaillement par le critère de bifurcation présentées dans le chapitre 3 restent encore à creuser en utilisant des VER non à l'état de contrainte initial isotrope mais anisotrope. En plus, on peut ajouter ce calcul du tenseur acoustique dans le projet FEM  $\times$  DEM. Ce calcul du tenseur acoustique dans chaque point d'intégration de Gauss, qui est souvent considéré comme le déclenchement de la bande de cisaillement, sera comparé directement avec l'apparition du bande de cisaillement par la réponse de la structure.

Le phénomène de la localisation de la déformation est observé dans tous les cas menés dans le cadre de ce travail de recherche. La dépendance des bandes de cisaillement au maillage est confirmée. On rappelle que, dans la phase post-pic, l'objectivité de la solution constitue d'un point de clé dans la modélisation numérique ; la dépendance vis-à-vis du maillage est clairement un problème de ce point de vue, bien que ce problème soit généralement passé sous silence et laissé non résolu dans beaucoup de simulations numériques présentées. Afin de préserver l'objectivité de la solution, une technique de régularisation tel que le modèle second gradient (Chambon *et al.* [36], Matsushima *et al.* [113]), introduisant une longueur interne caractéristique du matériau, sera envisagé. En outre, une fois la bifurcation atteinte, l'unicité du problème aux limites est perdue par définition. Il est donc intéressant, voire indispensable, de développer des outils permettant l'exploration de solutions multiples dans la méthode FEM  $\times$  DEM, par exemple en suivant les méthodes proposées par les mêmes auteurs.

#### *Échelle microscopique*

Les études numériques menées dans le cadre de travail de Szarf [165] mettent en évidence une forte dépendance du comportement du matériau à la forme des grains qui le constitue. Il est nécessaire d'étudier cette influence dans le cadre de la modélisation

multi-échelle en prenant en compte à l'échelle microscopique (*i.e.* VER dans chaque point d'intégration) une variation de leur forme avec par exemple des polygones ou des clusters de grains. En plus, l'utilisation des polygones et des clusters nous permet de rapprocher les grains modélisés de la forme des grains réels.

Le passage du problème 2D vers 3D est nécessaire pour produire d'une manière plus exacte et plus réaliste des propriétés physiques du matériau. En effet, les assemblages 3D offrent d'une manière naturelle une capacité d'évolution plus riche par rapport aux assemblages 2D ainsi qu'un plage de variation des indices de vide plus étendue et plus proche des observations. Ce développement constitue une perspective importante du travail présenté.

Et encore un chantier ambitieux : passer de l'expérience à la modélisation. Le microtomographie Rayon X au laboratoire 3SR permet de caractériser avec précision la microstructure de l'échantillon, c'est-à-dire de visualiser les formes des vrais grains dans un matériau granulaire. De cette manière, on peut construire un VER numérique dont ses particules s'approchent aux mieux la forme de particules réelles. En construisant des VER constitués des grains de forme réelle, la loi numérique équivalente reproduira au mieux le comportement des matériaux considérés.

### **Au niveau des applications**

Les résultats dans notre travail montrent la capacité de la méthode FEM  $\times$  DEM à modéliser des "vrais" matériaux granulaires. Des comparaisons avec des expériences sur sables (Desrues et Vigianni [69]), sur les grès de Vosges (Bésuelle [13]) montrant la dépendance du matériau à la pression moyenne pourront être réalisées. La modélisation d'autres types de milieux granulaires comme le béton est également possible.

Concernant des problèmes géotechniques, les simulations sur un cylindre creux éclairent ce chemin. D'autres problèmes comme le déconfinement d'une galerie, la stabilité des pentes etc. peuvent être simulés pour l'instant avec l'outil issu de ce travail et puis dans l'avenir avec des améliorations de la méthode numérique abordées plus haut.

Et enfin, le couplage hydromécanique reste aussi un chantier ouvert. Cela pourra être fait, soit à l'échelle microscopique (couplage solide-fluide dans DEM : pour les milieux granulaires saturés ou non saturés) ou soit à l'échelle macroscopique par FEM.

---

## Bibliographie

---

- [1] M.P. Allen and D.J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1987. 64
- [2] F. Alonso-Marroquin. *Micromechanical investigation of soil deformation : incremental response and granular ratcheting*. PhD thesis, University of Stuttgart, 2004. 66
- [3] G. Anciaux. *Simulation multi-échelles des solides par une approche couplé dynamique moléculaire / éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 2007.
- [4] Andra. *Référentiel du site de Meuse/ Haute-Marne Tome 1*. Rapport ANDRA no. C.RP.ADS.04.0022, 2005. 91
- [5] Andra. *Action Modèles transverse au CL Géomécanique et au Programme de simulation de l'Andra - Phase 2 : cas tests sur des chemins de sollicitation simples*. Document technique ANDRA - Ref CG.RP.AMFS.1 2.003 8, 2012. 87
- [6] J.R.F. Arthur and T. Dunstan. Rupture layers in granular media. In *IUTAM Conference of Deformation and Failure in Granular Media*, In Vermeer, P.A. Luger, H.J. (Eds), pages 453–459, 1982. 9
- [7] J.R.F. Arthur, T. Dunstan, Q.A.J.L. Al-Ani, and A. Assadi. Plastic deformation and failure in granular media. *Geotechnique*, 27 :53–74, 1977. 9
- [8] E. Azéma, F. Radjai, and R. Peyroux. Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Physical Review E*, 011301 :1–13, 2007. 8
- [9] J.P. Bardet. Numerical simulations of the incremental responses of idealized granular materials. *International Journal of Plasticity*, 10(8) :879–908, 1994. 66, 68
- [10] J.P. Bardet and J. Proubet. A numerical investigation of the structure of persistent shear bands in granular media. *Géotechnique*, 41(4) :599–613, 1991. 35, 36
- [11] T. Belytschko and S. Xiao. Coupling methods for continuum model with molecular dynamics. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1 :115–126, 2003. 15, 16, 17
- [12] A. Bensoussan, J-L. Lionis, and G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*. North-Holland, Amsterdam, 1978. 21

- [13] P. Bésuelle. *Déformation and rupture dans les roches tendres et les sols indutés : comportement homogène et localisation*. PhD thesis, Université de Grenoble, 1999. 11, 141, 174
- [14] P. Bésuelle. Compacting and dilating shear bands in porous rock : Theoretical and experimental conditions. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012)*, 106(B7) :13435–13442, 2001. 1
- [15] P. Bésuelle, J. Desrues, and S. Raynaud. Experimental characterisation of the localisation phenomenon inside a vosges sandstone in a triaxial cell. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 37 :1223–1237, 2000. 1, 2, 9, 118, 123, 141, 142, 159
- [16] P. Bésuelle, G. Viggiani, N. Lenoir, J. Desrues, and M. Bornert. X-ray micro ct for studying strain localization in clay rocks under triaxial compression. In *Advances in X-Ray CT for Geomaterials*, Desrues J., Viggiani G., Bésuelle P. eds, pages 35–52. ISTE pub., 2006. 9, 10
- [17] Davide Bigoni and Tomasz Hueckel. Uniqueness and localization? i. associative and non-associative elastoplasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 28(2) :197–213, 1991. 2, 11
- [18] Davide Bigoni and Tomasz Hueckel. Uniqueness and localization? ii. coupled elastoplasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 28(2) :215–224, 1991. 2, 11
- [19] J. Bonnet and R.D. Wood. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. Cambridge University Press, 1997.
- [20] R.I. Borja and J.R. Wren. Micromechanics of granular media part i. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127, 1995. 36
- [21] C. Boutin and S. Hans. Homogenisation of periodic discrete medium : Application to dynamics of framed structures. *Computers and Geotechnics*, 30(4) :303–320, 2003. 22
- [22] I. Bratberg, F. Radjai, and A. Hansen. Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly desposited two-dimensional granular beds. *Physical Review Letter E*, 66(3) :031303–, 2002. 38
- [23] D. Caillerie. Evolution quasi statique d’un milieu granulaire, loi incrémentale par homogénéisation. In *Des géomatériaux aux ouvrages*, pages 53–80. Hermès, 1995. 64
- [24] D. Caillerie. *Numerical Methods for Nonlinear Mechanics*. Cours Master International, Université de Grenoble, 2010. 84
- [25] D. Caillerie. *Homogénéisation des matériaux à structures périodiques*. Ecole d’été : Méthodes asymptotiques en mécanique, 2012. 21

- [26] D. Caillerie, P. Trompette, and P. Verna. Homogenisation of periodic trusses. In *Congres IASS*, pages 7139–7180, 1989. 21
- [27] F. Calvetti, G. Combe, and J. Lanier. Experimental micromechanical analysis of a 2d granular material : relation between structure evolution and loading path. *Mechanics of cohesive-frictional materials*, 2 :121–163, 1997. 7, 8, 119
- [28] F. Calvetti, G. Viggiani, and C. Tamagnini. A numerical investigation of the incremental behavior of granular soils. *Rivista Italiana di Geotecnica*, 3 :11–29, 2003. 66
- [29] B. Cambou, P. Dubujet, F. Emeriault, and F. Sidoroff. Homogenization for granular materials. *European Journal of Mechanics*, 14(2) :225–276, 1995. 20, 64
- [30] B. Cambou and M. Jean. *Micromécanique des matériaux granulaires*. Hermès Science Publications, 2001. 2, 7, 19, 21, 63
- [31] B. Cambou, M. Jean, and F. Radjai. *Matériaux granulaires : modélisation et simulation numérique*. Hermès Science Publications, 2012. 6, 19
- [32] E. Catalano. *A pore-scale coupled hydromechanical model for biphasic granular media. Application to granular sediment hydrodynamics*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2012.
- [33] B. CEGEO, K. Szarf, C. Voivret, E. Azéma, V. Richefeu, J-Y. Delenne, G. Combe, C. Nouguier-Lehon, P. Villard, P. Sornay, et al. Particle shape dependence in 2d granular media. *EPL (Europhysics Letters)*, 98 :44008, 2012. 51
- [34] S. Cescotto. *Simulation numérique du Lagamine en cannelures, essai de qualification de divers elements*. Université de Liège, 1983. 102
- [35] R. Chambon, D. Caillerie, and N. El Hassan. One-dimensional localisation studied with a second grade model. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 17(4) :637–656, 1998. 118, 119
- [36] R. Chambon, D. Caillerie, and T. Matsushima. Plastic continuum with microstructure, local second gradient theories for geomaterials : localization studies. *International Journal of Solids and Structures*, 38(46) :8503–8527, 2001. 119, 173
- [37] R. Chambon, J. Desrues, and W. Hammad. Cloe, a new type-rate constitutive model for geomaterials : theoretical basis and implementation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 18 :253–278, 1994. 12, 90, 100, 104
- [38] R. Chambon, J. Desrues, and D. Tillard. Shear modulus identification versus experimental localisation data. In *Chambon, R., Desrues, J., Vardoulakis, I. editors. Localisation and bifurcation theory for soils and rocks.*, pages 101–111, 1994. 2, 11, 12, 90
- [39] C.S. Chang and C.L. Liao. Estimates of elastic modulus for media of randomly packed granules. *Applied Mechanics Reviews*, 47 :197, 1994. 20

- [40] B. Chareyre. *Modélisation du comportement d'ouvrages composites sol-géosynthétique par élément discrets. Application aux ancrages en tranchées en tête de talus*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, 2003. 6, 44
- [41] R. Charlier. *Approche unifiée de quelques problèmes non linéaires de mécanique des milieux continus par la méthode des éléments finis*. PhD thesis, Université de Liège, 1987. 102
- [42] X. Chen, C.P. Tan, C.M. Haberfield, and B. Wu. Modelling of the undrained behaviour of wellbores. In *The Geotechnics of Hard Soils-Soft Rocks, proceedings of the second international symposium on hard soils-soft rocks, Napoli, Italy*, pages 483–489, 1998. 130
- [43] J. Christophersen, M.M. Mehrabadi, and S. Nemat-Nasser. A micromechanical description of granular material behaviour. *Journal of applied mechanics*, 48(2) :339–344, 1981. 64
- [44] J.L. Colliat-Dangus. *Comportement des matériaux granulaires sous fortes contraintes*. PhD thesis, USMG - INPG, 1986. 10
- [45] G. Combe. *Origines géométriques du comportement quasi-statique des assemblages granulaires denses : étude par simulation numérique*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2001. 6, 34, 35, 36, 48
- [46] G. Combe. *Mécanique des matériaux granulaires et origines microscopiques de la déformation*. Sciences pour le génie civil SI 8, Etudes et Recherches des Laboratoires des Ponts et Chaussées, Laboratoire centrale des Ponts et Chaussées, Paris, 2002. 15, 39, 64
- [47] G. Combe and J-N. Roux. Discrete numerical simulations, quasistatic deformation and the origins of strain in granular materials. In *Deformation characteristics of geomaterials*, In Di Benedetto *et al.*, pages 1071–1078. Swet and Zeitlinger, 2003. 15
- [48] P.A. Cundall. A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems. In *Proceedings of the Symposium of the International Society of Rock Mechanics*, volume 1, pages 132 – 150, 1971. 2
- [49] P.A. Cundall. Distinct element models of rock and soil structure. in analytical and computational methods in engineering rock mechanics. pages 129–163, 1987. 2
- [50] P.A. Cundall. Distinct element models of rock and soil structure. In *Proceedings of the Contact Mechanics International Symposium*, In E.T. Brown ed., pages 129 – 163. George Allen & Unwin, 2003. 15, 16, 17
- [51] P.A. Cundall, M. Ruest, A. Guest, and G. Chitombo. Evaluation of schemes to improve the efficiency of a complete model of blasting and rock fractures. In *Numerical modeling in micromechanics via particles methods*, In H. Konietzky ed., pages 107 – 115, 1987. 34

- [52] P.A. Cundall and O.D. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29 :47–65, 1979. 2, 14, 27, 64
- [53] P. Dantu. Contribution à l'étude mécanique et géométrique des milieux pulvérulents. In *Proceedings of 4th international conference on soil mechanics and foundation engineering*, pages 144 – 148. Butterworths Scientific Publications, 1957. 8
- [54] F. Darve. An incrementally non-linear constitutive law of the second order and its application to localisation. In *International Conference on Laws Engineering Materials*, 1987. 2, 11
- [55] F. Darve. Manuel de rhéologie des géomatériaux, chapitre les lois incrémentales non linéaires. *Presses ENPC*, pages 215–234, 1987. 12
- [56] Université de Liège. *Code de calcul aux éléments finis*. 102
- [57] J-Y. Delenne. *Milieux granulaires à comportement solide : Modélisation, analyse expérimentale de la cohésion, validation et applications*. PhD thesis, Université Montpellier II, 2002. 3, 32, 170
- [58] J-Y. Delenne, V. Topin, and F. Radjai. Failure of cemented granular materials under simple compression : experiments and numerical simulations. *Acta Mech*, (205) :9–21, 2009.
- [59] J-Y. Delenne, M.S.E. Youssoufi, F. Cherblanc, and J-C. Bénéat. Mechanical behaviour and failure cohesive granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, (28) :1577–1594, 2004. 3, 32, 170
- [60] J. Desrues. *La localisation de la déformation dans les matériaux granulaires*. PhD thesis, Université Grenoble, 1984. 1, 2, 3, 9, 39, 114, 144
- [61] J. Desrues. Shear bands in plane strain compression of loose sand. In *Geomaterials Constitutive Equations and Modelling*, pages 283–310. Elsevier, Amsterdam, 1990. 9
- [62] J. Desrues. *Strain localization*. Cours Master International, Université de Grenoble, 2008. 10, 11
- [63] J. Desrues, E. Andò, and T-K. Nguyen. Multiscale analysis : experimental and numerical advances. In *ICACM US-France workshop*, 2013.
- [64] J. Desrues and R. Chambon. Shear band analysis for granular materials : the question of incremental non-linearity. *Ing-Arch*, 59 :187–196, 1989. 2, 11
- [65] J. Desrues and R. Chambon. Shear band analysis and shear moduli calibration. *International Journal of Solids and Structures*, 39 :3757–3776, 2002. 2, 3, 8, 9, 74, 82, 83, 100, 118
- [66] J. Desrues, R. Chambon, M. Mokni, and F. Mazerolle. Void ratio evolution inside shear bands in triaxial sand specimens studied by computed tomography. *Geotechnique*, 46(3) :529–546, 1996. 2, 9

- [67] J. Desrues and B. Duthilleul. Stereophotogrammetric method applied to the determination of plane strain fields. *Journal de Mécanique théorique et appliqué*, 3, 1984.
- [68] J. Desrues, J. Lanier, and P. Stutz. Localization of the deformation in tests on sand sample. *Engineering Fracture Mechanics*, 21 :909–921, 1985. 9
- [69] J. Desrues and G. Viggiani. Strain localization in sand : an overview of the experimental results obtained in grenoble using stereophotogrammetry. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 28 :278–321, 2004. 1, 39, 114, 118, 144, 174
- [70] T. Doanh. Strain response envelope : a complementary tool for evaluating hypoplastic constitutive equations. In *Constitutive Modelling of Granular Materials*, pages 375–396. Springer, 2000. 65
- [71] C.M. Dury, G.H. Ristow, J.L. Moss, and M. Nakagawa. Boundary effects on the angle of repose in rotating cylinders. *Physical Review E*, 57(4) :4491, 1998. 27
- [72] A. El Bied, J. Sulem, and F. Martineau. Microstructure of shear zone in fontainebleau sandstone. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science*, 39(7) :917–932, 2002. 9, 142, 143
- [73] F. Emeriault, B. Cambou, and A. Mahboubi. Homogenization for granular materials : non reversible behaviour. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials*, 1(2) :199–218, 1996. 20
- [74] F. Feyel. A multilevel finite element method ( $fe^2$ ) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 192(28-30) :3233–3244, 2003. 1, 22
- [75] F. Feyel and J-L. Chaboche.  $Fe^2$  multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 183 :309–330, 2000. 1, 22
- [76] R.J. Finno, W.W. Harris, M.A. Mooney, and G. Viggiani. Strain localization and undrained steady state of sands. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 122(6) :462–473, 1996. 9
- [77] R.J. Finno and G. Viggiani. Shear bands in plane strain compression of loose sand. *Geotechnique*, 47(1) :149–165, 1997. 2, 9
- [78] J. Fish. Bridging the scales in nano engineering and science. *Journal of Nanoparticle Research*, 8(5) :577–594, 2006. 1
- [79] J. Fish. *Multiscale methods : bridging the scales in science and engineering*. Oxford University Press, 2009. 1
- [80] J. Fonseca, P. Bésuelle, and G. Viggiani. Micromechanisms of inelastic deformation in sandstones : an insight using x-ray microtomography. *Géotechnique (A appareil)*, 2013. 155, 156, 158

- [81] J. Frey. *Modélisation multi-échelle de l'endomagement hydromécanique des roches argileuses*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2010. 22
- [82] M.G.D. Geers, V.G. Kouznetsova, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale computational homogenization : Trends and challenges. *Journal of computational and applied mathematics*, 234(7) :2175–2182, 2010. 1
- [83] S. Ghosh, K. Lee, and S. Moorthy. Two scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and voronoi cell finite element model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 132(1) :63–116, 1996. 1
- [84] S. Ghosh, K. Lee, and P. Raghavan. A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 38(14) :2335–2385, 2001. 1
- [85] F.A. Gilabert, J-N. Roux, and A. Castellanos. Computer simulation of model cohesive powders : Influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states. *Physical Review Letter E*, 75 :011303(1–26), 2007. 29, 30, 31
- [86] G. Gudehus. A comparison of some constitutive laws for soils under radially symmetric loading and unloading. In *Proceedings of 3rd Int. Conf. on Numerical Methods in Geomechanics*, pages 1309–1323. Aachen, 1979. 3, 65, 68, 100
- [87] A.M.H. Habraken. *Contribution à la méthode du formage des métaux par la méthode des éléments finis*. PhD thesis, Université de Liège, 1989. 102
- [88] J. Hadamard. *Leçons sur la propagation des ondes et les équations de l'hydrodynamique*. A. Hermann, 1903. 70
- [89] C. Han and I. Vardoulakis. Plane-strain compression experiments on water-saturated fine-grained sand. *Geotechnique*, 41(1) :49–78, 1991. 9
- [90] R. Hill. Acceleration waves in solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(1) :1–16, 1962. 70
- [91] T. J. R. Hughes. *The finite element method : linear static and dynamic finite element analysis*. DoverPublications. com, 2012. 13
- [92] K. Iwashita, K. Matura, and M. Oda. Distinct element method with the effect of moment transfer at the contact points. *Journal of Geotechnical Engineering*, III(33) :145–154, 1995. 35
- [93] K. Iwashita and M. Oda. Rotational resistance at contacts in the simulation of shear band developpement by dem. *ASCE Journal of Engineering Mechanics*, 124 :285–292, 1998. 27, 31
- [94] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177(3-4) :235–257, 1999. 15, 39

- [95] M. Jean and J-J. Moreau. Unilaterality and granular friction in the dynamics of rigid body collections. In *Proceedings of the Contact Mechanics International Symposium*, In A. Curnier editor. Presses Polytechniques Universitaires Romandes, 1992. 15, 39
- [96] H. Joer, J. Lanier, J. Desrues, and E. Flavigny.  $1\gamma 2\varepsilon$  : a new shear apparatus to study the behavior of granular materials. *Geotechnical Testing Journal*, 15(2) :129–137, 1992. 7
- [97] T. Kaneko, K. Terada, T. Kyoya, and Y. Kishino. Global-local analysis of granular media in quasistatic equilibrium. *International Journal of Solids and Structures*, 40(15) :4043–4069, 2003. 15
- [98] J.B. Knight, C.G. Fandrich, C.N. Lau, H.M. Jaeger, and S.R. Nagel. Density relaxation in a vibrated granular material. *Physical Review Letter E*, 51(5) :3957–, 1995. 38
- [99] D. Kolymbas. Birfucation analysis for sand sample with non-linear constitutive equation. *Ing-Arch*, 50 :187–196, 1981. 2, 11
- [100] D. Kolymbas. An outline of hypoplasticity. *Archive of applied mechanics*, 61 :143–151, 1991. 90
- [101] V.G. Kouznetsova, W.A.M. Brekelmans, and F.P.T. Baaijens. An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational Mechanics*, 27 :37–48, 2001. 1, 22
- [102] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54 :1235–1260, 2002. 1, 22
- [103] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :5525–5550, 2004. 22
- [104] V. Labiouse, C. Sauthier, and S. You. Hollow cylinder simulation experiments of galleries in boom clay formation. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, pages 1–13, 2012. 3, 126
- [105] V. Labiouse and T. Vietor. Laboratory and in situ simulation tests of the excavation damaged zone around galleries in opalinus clay. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, pages 1–14, 2013. 3, 126
- [106] J. Lanier. *Mécanique des milieux granulaires*. Hermès Science Publications, 2001. 6
- [107] J. Lemaitre and J.L. Chaboche. *Mechanics of Solids Materials*. Cambridge Univ. Press, 1994. 68

- [108] R. Lewis and B. A. Schrefler. *The Finite Element Method in Static and Dynamic Deformation and Consolidation of Porous Media*. John Wiley & Son, 1998. 84
- [109] A.E.H. Love. *A treatise on the mathematical theory of elasticity*. Dover publication, 1944. 64
- [110] S. Luding. Stress distribution in static two dimensional granular model media in absence of friction. *Physical Review Letter E*, 55 :4720–4729, 1997. 34
- [111] J Mandel. Conditions de stabilité et postulat de drucker. In *Rheology and Soil Mechanics/Rhéologie et Mécanique des Sols*, pages 58–68. Springer, 1966. 70
- [112] F. Marinelli. *Comportement couplé des géomatériaux : deux approches de modélisation numérique*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, 2013. 11, 22, 131
- [113] T. Matsushima, R. Chambon, and D. Caillerie. Large strain finite element analysis of a local second gradient model : application to localization. *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 28 :499–521, 2002. 118, 119, 173
- [114] H.A. Meier, P. Steinmann, and E. Kuhl. Towards multiscale computation of confined granular media : contact forces, stresses and tangent operators. *Technische Mechanik*, 28(1) :32–42, 2007. 1, 23
- [115] C. Miehe and J. Dettmar. A framework for micro-macro transitions in periodic particle aggregates of granular materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 193 :225–256, 2003. 1
- [116] C. Miehe, J. Dettmar, and Zah. Homogenization and two-scale simulations of granular materials for different microstructural constraints. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83 :1206–1236, 2010. 1, 23
- [117] C. Miehe, J. Schroder, and J. Schotte. Computational homogenization analysis in finite plasticity, simulation of texture development in polycrystalline materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 171 :387–418, 1999. 22
- [118] R.E. Miller and E.B. Tadmor. The quasicontinuum method : Overview, applications and current directions. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 9 :203–239, 2002. 15, 16
- [119] M. Mokni. *Relations entre dé formations en masse et dé formations localisé es dans les maté riaux granulaires*. PhD thesis, Université de Grenoble, 1992. 3, 144
- [120] M. Mokni and J. Desrues. Strain localisation measurements in undrained plane-strain biaxial tests on hostun sand. *Mech. Cohes.-Fric. Mater*, 4 :419–441, 1999. 3, 9, 144
- [121] G. Moreau and D. Caillerie. Continuum modelling of lattice structures in large displacement. application to bucking analysis. *Computers and Structures*, 68(1-3) :181–189, 1998. 22
- [122] J-J. Moreau. Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. 1988. 15

- [123] J-J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. In *Friction, Arching, Contact Dynamics*, In Grassberger P. and Wolfs D.E. (dir), pages 233–247. Editions World Scientific, 1997. 64
- [124] A. Munjiza. *The combined Finite-Discrete Element Method*. Wiley, 2004. 15, 17
- [125] A. Munjiza, D.R.J. Owen, and N. Bicanic. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Engineering Computations*, 12(2) :145–174, 1995. 15
- [126] T-K. Nguyen, G. Combe, D. Caillerie, and J. Desrues. Investigation of a cohesive granular material : multi-scale modelling by fem-dem approach. In *XVI French-Polish Colloquium of Soil and Rock Mechanics*, 2013. 106
- [127] T-K. Nguyen, G. Combe, D. Caillerie, and J. Desrues. Modeling of a cohesive granular materials by a multi-scale approach. *Powders and Grains*, 1542 :1194–1197, 2013. 106
- [128] T-K. Nguyen, G. Combe, D. Caillerie, and J. Desrues. Modélisation double échelle appliquée aux milieux granulaires cohésifs. In *Réunion GDR MeGe*, 2013.
- [129] T-K. Nguyen, G. Combe, D. Caillerie, and J. Desrues. Fem  $\times$  dem modelling of cohesive granular materials : numerical homogenisation and multi-scale simulation. *Acta Geophysica*, (submitted), 2014.
- [130] T-K. Nguyen, G. Combe, D. Caillerie, and J. Desrues. A numerical law based on particles interactions for continuum modeling. *Computational Particles Mechanics*, (to be submitted), 2014.
- [131] F. Nicot and R. Wan. *Miromécanique de la rupture dans les milieux granulaires*. Hermès Science Publications, 2008.
- [132] M. Nitka. *Multi-scale modeling of granular media*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, 2010.
- [133] M. Nitka, G. Combe, C. Dascalu, and J. Desrues. Two-scale modeling of granular materials : a dem-fem approach. *Granular Matter*, 13 :277–281, 2011.
- [134] M. Nitka, T-K. Nguyen, G. Combe, C. Dascalu, D. Caillerie, and J. Desrues. Two scale dem-fem numerical approach for granular media. In *Particles-Based Method II : Fundamentals and Applications*, 2011.
- [135] E. Oñate and J. Rojek. Combination of discrete element and finite element method for dynamic analysis of geomechanics problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :3087–3128, 2004. 15, 17
- [136] M. Oda. The mechanism of fabric changes during compressional deformation of sand. *Soils and foundations*, 12(2) :1–18, 1972. 7
- [137] M. Oda, J. Konishi, and S. Nemat-Nasser. Experimental micromechanical evaluation of strength of granular materials : Effects of particle rolling. *Mechanics of Materials*, 27, 1982.

- [138] L. Oger, S.B. Savage, D. Corriveau, and M. Sayed. Yield and deformation of an assembly of disks subjected to a deviatoric stress loading. *Mechanics of Materials*, 27 :189–210, 1998. 35
- [139] W.A. Olsson. Theoretical and experimental investigation of compaction bands in porous rock. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012)*, 104(B4) :7219–7228, 1999. 1
- [140] A. Ord, I. Vardoulakis, and R. Kajewski. Shear band formation in gosford sandstone. In *International journal of rock mechanics and mining sciences & geomechanics abstracts*, volume 28, pages 397–409. Elsevier, 1991. 123
- [141] S. Ouaguenouni and J-N. Roux. Force distribution in frictionless granular packings at rigidity threshold. *EPL (Europhysics Letters)*, 39(2) :117, 1997. 35
- [142] D.R.J. Owen, F.M. Andrade Pires, E.A. de Souza Neto, and Y.T. Feng. Continuous/discrete strategies for the modelling of fracturing solids. In *Engineering Structures under Extreme Conditions*, Ibrahimbegovic, A. and Brank, B. eds, pages 230–266. IOS Press, 2005. 15, 17
- [143] M. S. Paterson. *Experimental rock deformation-the brittle field*. Springer, 1978. 148
- [144] F. Radjai. *Constitutive behavior and numerical methods*. Summer school, Course OZ Alert Part 1, 2011.
- [145] F. Radjai and F. Dubois. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*. Hermès Science Publications, 2011. 2, 14, 30, 36, 38
- [146] F. Radjai, H. Troadec, and S. Roux. Granular materials : Fundamentals and applications. *The Royal Society of Chemistry, Cambridge*, 1 :3, 2004. 7
- [147] F. Radjai, D. Wolf, M. Jean, and J-J. Morreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Physical Review Letters*, 80(1) :61–64, 1998. 8, 135
- [148] F. Radjai, D.E. Wolf, S. Roux, M. Jean, and J-J. Moreau. Force networks in dense granular media. 1997. 135
- [149] J. N. Reddy. *An introduction to the finite element method*, volume 2. McGraw-Hill New York, 2006. 13
- [150] J. Rice. The localization of plastic deformation. In *14th International Congress on Theoretical and Applied Mechanics*, volume 1, pages 207–220. North-Holland Publishing Company, 1976. 2, 3, 11, 70, 73, 100
- [151] V. Richefeu, G. Combe, and G. Viggiani. An experimental assessment of displacement fluctuations in a 2d granular material subjected to shear. *arXiv preprint arXiv :1208.0485*, 2012. 115
- [152] H. Ristow. Critical exponents for granular phase transitions. *EPL (Europhysics Letters)*, 40(6) :625, 1997. 27

- [153] P.G. Rognon, J-N. Roux, D. Wolf, M. Naaïm, and F. Chevoir. Rheophysics of cohesive granular materials. *EPL (Europhysics Letters)*, 74(4) :644, 2006. 29
- [154] J-N. Roux. The nature of quasistatic deformation in granular materials. In *Powders and Grains 2005*, pages 261–265, 2005. 49
- [155] J-N. Roux and G. Combe. Quasistatic rheology and the origins of strain. *Comptes Rendus Physique*, 3 :131–140, 2002. 15
- [156] J-N. Roux and G. Combe. On the meaning and microscopic origins of quasistatic deformation of granular materials. In *16th ASCE Engineering Mechanics Conference*, 2003. 48, 56
- [157] P. Royis and T. Doanh. Theoretical analysis of strain response envelopes using incrementally non-linear constitutive equations. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 22(2) :97–132, 1998. 65
- [158] J.W. Rudnicki and J.R. Rice. Conditions for the localisation of the deformation in pressure sensitive dilatant materials. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 23 :371–394, 1975. 2, 11
- [159] E. Sanchez-Palencia. Non-homogeneous media and vibration theory. *Lecture Notes in Physics*, 127, 1980. 21
- [160] L. Scholtès. *Modélisation Micro-Mécanique des Milieux Granulaires Partiellement Saturés*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2008.
- [161] L. Sibille, F. Nicot, F.V. Donzé, and F. Darve. Analysis of failure occurrence from direct simulation. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 13 :187–201, 2009. 66
- [162] Y. Sieffert, S. Al Holo, and R. Chambon. Loss of uniqueness of numerical solutions of the borehole problem modelled with enhanced media. *International Journal of Solids and Structures*, 46(17) :3173–3197, 2009. 131
- [163] J.C. Simo and T.J.R. Hughes. *Computational Inelasticity*. Springer, 1998. 85
- [164] J. Sulem, I. Vardoulakis, E. Papamichos, A. Oulahna, and J. Tronvoll. Elastoplastic modelling of red wildmoor sandstone. *Mechanics of Cohesive-Frictional Mater*, 4 :215–245, 1999. 2, 11
- [165] K. Szarf. *A Numerical Study of the Influence of Grain Shape on the Mechanical Behaviour of Granular Materials. Application : Load Transfer above Underground Conduits*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2012. 173
- [166] K. Szarf, G. Combe, and P. Villard. Polygons vs. clumps of discs : A numerical study of the influence of grain shape on the mechanical behaviour of granular materials. *Powder Technology*, 208(2) :279–288, 2011. 119
- [167] F. Tatsouka, T. Nakamura, C.C. Huang, and K. Tani. Strength anisotropy and shear band direction in plane strain test of sand. *Soils and Foundations*, 30(1) :35–54, 1990. 2, 9

- [168] F. Tatsouka, M. Sakamoto, T. Kawamura, and S. Fukushima. Strength and deformation characteristics of sand in plane strain compression at extremely low pressures. *Soils and Foundations*, 26(1) :65–84, 1986. 9
- [169] H. Tollenaere and D. Caillerie. Continuum modeling of lattice structures by homogenization. *Advances in Engineering Software*, 29(7-9) :699–705, 1998. 21, 22
- [170] A. Tordesillas and D.C. Stuart. Incorporating rolling resistance and contact anisotropy in micromechanical models of granular media. *Powder Technology*, 124 :106–111, 2002. 27
- [171] S. Torquato and F.H. Stillinger. Computer simulation of model cohesive powders : Influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states. *Physical Review Letter E*, 73(3) :031106–8, 2006. 38
- [172] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials : Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer, Berlin, 2002. 38
- [173] P.J. Van den Hoek. Prediction of different types of cavity failure using bifurcation theory. In *DC Rocks 2001, The 38th US Symposium on Rock Mechanics (USRMS)*, 2001. 130
- [174] I. Vardoulakis. Rock bursting as a surface instability phenomenon. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, pages 137–144, 1984. 11
- [175] I. Vardoulakis, M. Goldscheider, and G. Gudehus. Formation of shear bands in sand bodies as a bifurcation problem. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, pages 99–128, 1978. 2, 9, 11
- [176] I. Vardoulakis and B. Graf. Calibration of constitutive models for granular materials using data from biaxial experiments. *Geotechnique*, 35(3) :299–317, 1985. 9
- [177] G. Viggiani. *Localizzazione delle deformazioni e fenomeni di rottura nelle argille consistenti sovaconsolidate*. PhD thesis, Università di Roma, 1994. 11
- [178] M.J. Vold. A numerical approach to the problem of sediment volume. *Journal of Colloid Science*, 14(2) :168–174, 1959. 38
- [179] M.J. Vold. Sediment volume and structures in dispersions of anisometric particles. *J. Phys. Chem.*, 63(10) :1608–1612, 1959. 38
- [180] M.J. Vold. The sediment volume in dilute dispersions of spherical particles. *J. Phys. Chem.*, 64(11) :1616–1619, 1960. 38
- [181] G. J. Wagner and W. K. Liu. Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. *Journal of Computational Physics*, 1 :249–274, 2003. 16
- [182] P. Watson, H. Mizes, A. Castellanos, and A. Pérez. The packing of fine cohesive powders. In *Powders and Grains 1997*, pages 109–112, 1997. 38

- 
- [183] J. Weber. *Recherches concernant les contraintes intergranulaires dans les milieux pulvérulents*. Bul. liaison P. et Ch. No. Juillet-août, 1966. 2, 64, 170
- [184] C. Wellmann and P. Wriggers. A two-scale model of granular materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 205-208 :46–58, 2010. 15
- [185] S. Xiao and T. Belytschko. A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. *Computer Methods in applied mechanics and engineering*, 193 :1645–1669, 2004. 15, 16, 17
- [186] O.C. Zienkiewicz. *La méthode des éléments finis*. McGraw - Hill Inc., 1979. 2, 13

---

Calcul du tenseur acoustique

---

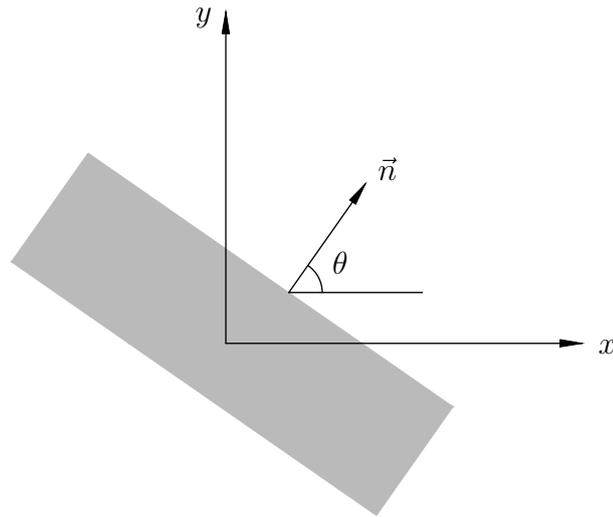


FIGURE A.1 – L'orientation de la bande : définition de l'angle d'orientation  $\theta$

On présente le calcul analytique du tenseur acoustique  $\det(nLn)$ . Sur la figure A.1,  $\vec{n}$  est le vecteur normal de la bande. On appelle  $L_{ijkl}$  la matrice tangente à la loi caractérisée par la loi de comportement.

Par définitions, nous avons :

$$\vec{n} = (n_1, n_2) = (\cos \theta, \sin \theta) \quad (\text{A.1})$$

Posons nous :  $Q = nLn$ , donc :

$$Q_{jk} = L_{1jk1} \cos^2 \theta + (L_{1jk2} + L_{2jk1}) \cos \theta \sin \theta + L_{2jk2} \sin^2 \theta \quad (\text{A.2})$$

Explicitement, nous avons :

$$\begin{aligned}
Q_{11} &= L_{1111} \cos^2 \theta + (L_{1112} + L_{2111}) \cos \theta \sin \theta + L_{2112} \sin^2 \theta \\
Q_{22} &= L_{1221} \cos^2 \theta + (L_{1222} + L_{2221}) \cos \theta \sin \theta + L_{2222} \sin^2 \theta \\
Q_{12} &= L_{1121} \cos^2 \theta + (L_{1122} + L_{2121}) \cos \theta \sin \theta + L_{2122} \sin^2 \theta \\
Q_{21} &= L_{1211} \cos^2 \theta + (L_{1212} + L_{2211}) \cos \theta \sin \theta + L_{2212} \sin^2 \theta
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Le déterminant de  $Q$  :  $\det Q = Q_{11} \cdot Q_{22} - Q_{12} \cdot Q_{21}$

$$\begin{aligned}
Q_{11} \cdot Q_{22} &= L_{1111} L_{1221} \cos^4 \theta + \\
&+ [L_{1111} (L_{1222} + L_{2221}) + (L_{1112} + L_{2111})] \cos^3 \theta \sin \theta + \\
&+ [L_{1111} L_{2222} + (L_{1112} + L_{2111}) (L_{1222} + L_{2221}) + L_{2112} L_{1221}] \cos^2 \theta \sin^2 \theta + \\
&+ [(L_{1112} + L_{2111}) L_{2222} + L_{2112} (L_{1222} + L_{2221})] \cos^3 \theta \sin \theta + \\
&+ L_{2112} L_{2222} \sin^4 \theta
\end{aligned} \tag{A.4}$$

$$\begin{aligned}
Q_{12} \cdot Q_{21} &= L_{1121} L_{1211} \cos^4 \theta + \\
&+ [L_{1121} (L_{1212} + L_{2211}) + (L_{1122} + L_{2121}) L_{1211}] \cos^3 \theta \sin \theta + \\
&+ [L_{1121} L_{2212} + (L_{1122} + L_{2121}) (L_{1212} + L_{2211}) + L_{2122} L_{1211}] \cos^2 \theta \sin^2 \theta + \\
&+ [(L_{1122} + L_{2121}) L_{2212} + L_{2122} (L_{1212} + L_{2211})] \cos \theta \sin^3 \theta + \\
&+ L_{2122} L_{2212} \sin^4 \theta
\end{aligned} \tag{A.5}$$

$\det Q = \det(nLn) = Q_{11} \cdot Q_{22} - Q_{12} \cdot Q_{21}$  nous donne le tenseur acoustique qui est écrits sous forme :

$$\det(nLn) = A_0 + A_1 \cdot \tan \theta + A_2 \cdot \tan^2 \theta + A_3 \cdot \tan^3 \theta + A_4 \cdot \tan^4 \theta \tag{A.6}$$

Avec  $A_0, A_1, A_2, A_3, A_4$  :

$$\begin{aligned}
A_0 &= L_{1111} \cdot L_{1221} - L_{1121} \cdot L_{1211} \\
A_1 &= [L_{1111} \cdot (L_{1222} + L_{2221}) + (L_{1112} + L_{2111}) \cdot L_{1221}] - \\
&\quad [L_{1121} \cdot (L_{1212} + L_{2211}) + (L_{1122} + L_{2121}) \cdot L_{1211}] \\
A_2 &= [L_{1111} \cdot L_{2222} + (L_{1112} + L_{2111}) \cdot (L_{1222} + L_{2221}) + L_{2112} \cdot L_{1221}] - \\
&\quad [L_{1121} \cdot L_{2212} + (L_{1122} + L_{2121}) \cdot (L_{1212} + L_{2211}) + L_{2122} \cdot L_{1211}] \\
A_3 &= [L_{2222} \cdot (L_{1112} + L_{2111}) + (L_{1222} + L_{2221}) \cdot L_{2112}] - \\
&\quad [L_{2212} \cdot (L_{1122} + L_{2121}) + (L_{1212} + L_{2211}) \cdot L_{2122}] \\
A_4 &= L_{2112} \cdot L_{2222} - L_{2122} \cdot L_{2212}
\end{aligned} \tag{A.7}$$

---

## Loi DEM 686 dans Lagamine

---

### B.1 Law name

Equivalent law DEM

Preprocessor : LDEM

Equivalent law DEM (Discrete Element Method) for continuum description for granular materials.

### B.2 Availability

Available for plane stress state	:	NON
Available for plane strain state	:	YES
Available for axisymmetric state	:	NON
Available for 3D state	:	NON
Available for generalized state	:	NON

### B.3 Parameters

#### B.3.1 Parameters defining the type of constitutive law (2I5,60A1)

IL	=	law number
ITYPE	=	686
COMMNT	=	any comment (up to 60 characters) that will be reproduced on the output listing

**B.3.2 Integer parameters (9I5)**

NINTV	=	1 : par default
ISOL	=	0 : use of total stresses in the constitutive law
	≠	0 : use of effective stresses in the constitutive law
IPAR	=	0 : computation of the consistent tangent operator
	=	1 : elastic operator is used
IPER	=	0 : perturbation parameters
ILEV	=	convergence level in DEM code (0,1,2,3,4,5)
ICOH	=	0 : no cohesion at particles's level
	=	1 : cohesion at particles's level
IFOR	=	0 : "fragile" cohesion
	=	1 : "recoverable" cohesion
IROL	=	0 : no rolling resistance
	=	1 : rolling resistance effect is used
IPAS	=	number of considered step for elastic operator

**B.3.3 Real parameters (6G10)**

ALPHA	=	value for alpha step (computation of moduli tangent operator for bifurcation analysis)
EPSI	=	value for perturbed step (computation of moduli tangent operator for bifurcation analysis)
AKN	=	normal stiffness coefficient
AKT	=	tangential stiffness coefficient
AFRIC	=	intergranular friction
ARI	=	inertial number

**B.3.4 Stress**

For 2D case.

SIG(1)	=	$\sigma_{xx}$
SIG(2)	=	$\sigma_{yy}$
SIG(3)	=	$\sigma_{xy}$
SIG(4)	=	0

**B.3.5 State variables**

Number of state variables :  $4 \cdot n_{pa} + 7 \cdot n_{cont} + 7$

**Meaning**

Q(1)	= 1	in plane strain condition
Q(2)	= npa	number of particles in VER at microscopic level

Particles coordinates to repeat :  $i = 1, npa$

Q( $4 \cdot i - 1$ )	= $x_i$	postion of grain $i$
Q( $4 \cdot i$ )	= $y_i$	postion of grain $i$
Q( $4 \cdot i + 1$ )	= $\gamma_i$	rotation of grain $i$
Q( $4 \cdot i + 2$ )	= $r_i$	grain radius

Box dimension

Q( $4 \cdot npa + 3$ )	= $h_{xx}$	
Q( $4 \cdot npa + 4$ )	= $h_{xy}$	
Q( $4 \cdot npa + 5$ )	= $h_{yx}$	
Q( $4 \cdot npa + 6$ )	= $h_{yy}$	
Q( $4 \cdot npa + 7$ )	= ncont	number of contacts

Contact list : two grains ( $i, j$ ) in contact,  $il = 1, ncont$

Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il$ )	= ncont	
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 1$ )	= $i$	
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 2$ )	= $j$	
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 3$ )	= $f_n$	normal contact force
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 4$ )	= $f_t$	tangential contact force
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 5$ )	= 0	no sliding
	= 1	sliding
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 6$ )	= $M_\gamma$	moment transmitted by contact
Q( $4 \cdot npa + 7 \cdot il + 7$ )	= $f_{n0}$	normal cohesion



---

## Loi DEM 696 dans Lagamine

---

### C.1 Law name

Equivalent law DEM-CIMENT

Preprocessor : LDEM-CIMENT

Equivalent law DEM (Discrete Element Method) for continuum description for cemented granular materials.

### C.2 Availability

Available for plane stress state	:	NON
Available for plane strain state	:	YES
Available for axisymmetric state	:	NON
Available for 3D state	:	NON
Available for generalized state	:	NON

### C.3 Parameters

#### C.3.1 Parameters defining the type of constitutive law (2I5,60A1)

IL	=	law number
ITYPE	=	696
COMMNT	=	any comment (up to 60 characters) that will be reproduced on the output listing

### C.3.2 Integer parameters (6I5)

NINTV	=	1 : par default
ISOL	=	0 : use of total stresses in the constitutive law
	≠	0 : use of effective stresses in the constitutive law
IPAR	=	0 : computation of the consistent tangent operator
	=	1 : elastic operator is used
IPER	=	0 : perturbation parameters
ILEV	=	convergence level in DEM code (0,1,2,3,4,5)
IPAS	=	number of considered step for elastic operator

### C.3.3 Real parameters (9G10)

ALPHA	=	value for alpha step (computation of moduli tangent operator for bifurcation analysis)
EPSI	=	value for perturbed step (computation of moduli tangent operator for bifurcation analysis)
AKN	=	normal stiffness coefficient
AKT	=	tangential stiffness coefficient
AFRIC	=	intergranular friction
ARI	=	inertial number
CRITERIA	=	1
ARUPTURE	=	$n$ in equation 2.10
ALAMBDAT	=	ratio between shear and tension strength at contact level

### C.3.4 Stress

For 2D case.

SIG(1)	=	$\sigma_{xx}$
SIG(2)	=	$\sigma_{yy}$
SIG(3)	=	$\sigma_{xy}$
SIG(4)	=	0

### C.3.5 State variables

Number of state variables :  $4 \cdot \text{npa} + 10 \cdot \text{ncont} + 7$

#### Meaning

Q(1)	=	1	in plane strain condition
Q(2)	=	npa	number of particles in VER at microscopic level

Particles coordinates to repeate :  $i = 1, npa$

$Q(4 \cdot i - 1)$	=	$x_i$ postion of grain $i$
$Q(4 \cdot i)$	=	$y_i$ postion of grain $i$
$Q(4 \cdot i + 1)$	=	$\gamma_i$ rotation of grain $i$
$Q(4 \cdot i + 2)$	=	$y_i$ grain radius

Box dimension

$Q(4 \cdot npa + 3)$	=	$h_{xx}$
$Q(4 \cdot npa + 4)$	=	$h_{xy}$
$Q(4 \cdot npa + 5)$	=	$h_{yx}$
$Q(4 \cdot npa + 6)$	=	$h_{yy}$
$Q(4 \cdot npa + 7)$	=	ncont number of contacts

Contact list : two grains  $(i, j)$  in contact,  $il = 1, ncont$

$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il - 2)$	=	ncont
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il - 1)$	=	$i$
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il)$	=	$j$
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 1)$	=	$f_n$ normal contact force
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 2)$	=	$f_t$ tangential contact force
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 3)$	=	0 no sliding = 1 sliding
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 4)$	=	$M_\gamma$ moment transmitted by contact
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 5)$	=	$f_{n0}$ tension strength
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 6)$	=	$f_{t0}$ shear strength
$Q(4 \cdot npa + 10 \cdot il + 7)$	=	$M_{\gamma 0}$ rotation strength



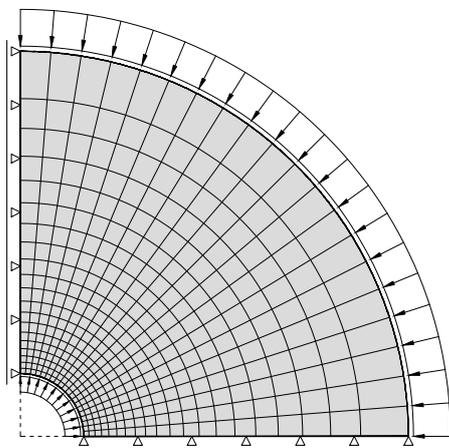
---

## Essai sur un cylindre creux

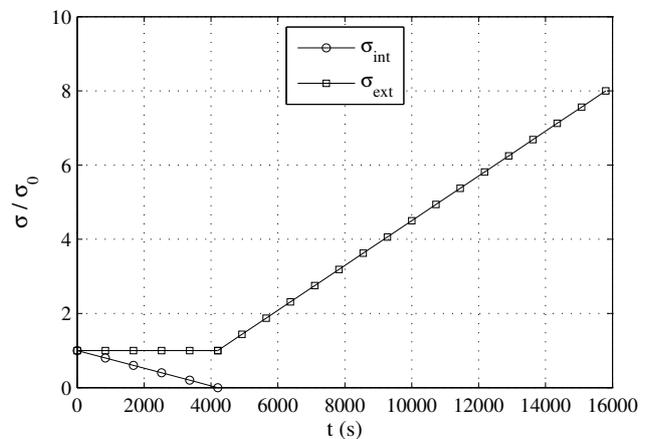
---

L'essai présenté ici est similaire à celui dans la section 4.5 mais dans ce cas, dans la deuxième phase, la contrainte extérieure  $\sigma_{ext}$  est augmenté de  $\sigma_0$  à  $8\sigma_0$ . La figure D.1 détaille la géométrie et le chemin de sollicitation en contrainte du problème.

Le modèle micromécanique utilisé est la loi de contact avec frottement et la cohésion attractive pure (contact de type 2) présenté dans la section 2.2.2.2.



(a) Un quart d'un cylindre creux



(b) Chemin en contrainte

FIGURE D.1 – Essai sur un cylindre creux

Les cartes du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à différents instants sont données sur les figures D.2, D.3, D.4, D.5, D.6, D.7.

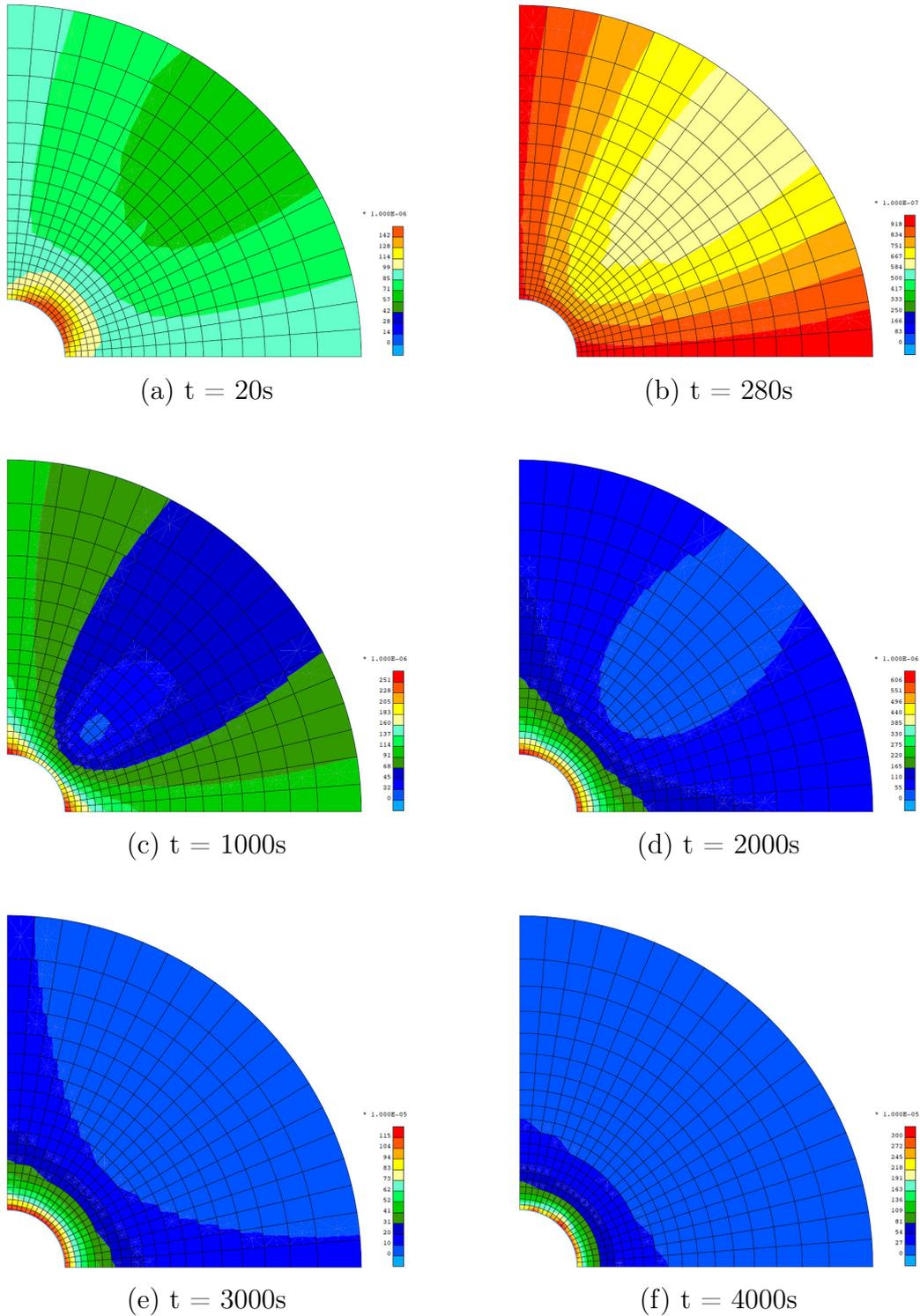


FIGURE D.2 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 20, 280, 1000, 2000, 3000, 4000 s$

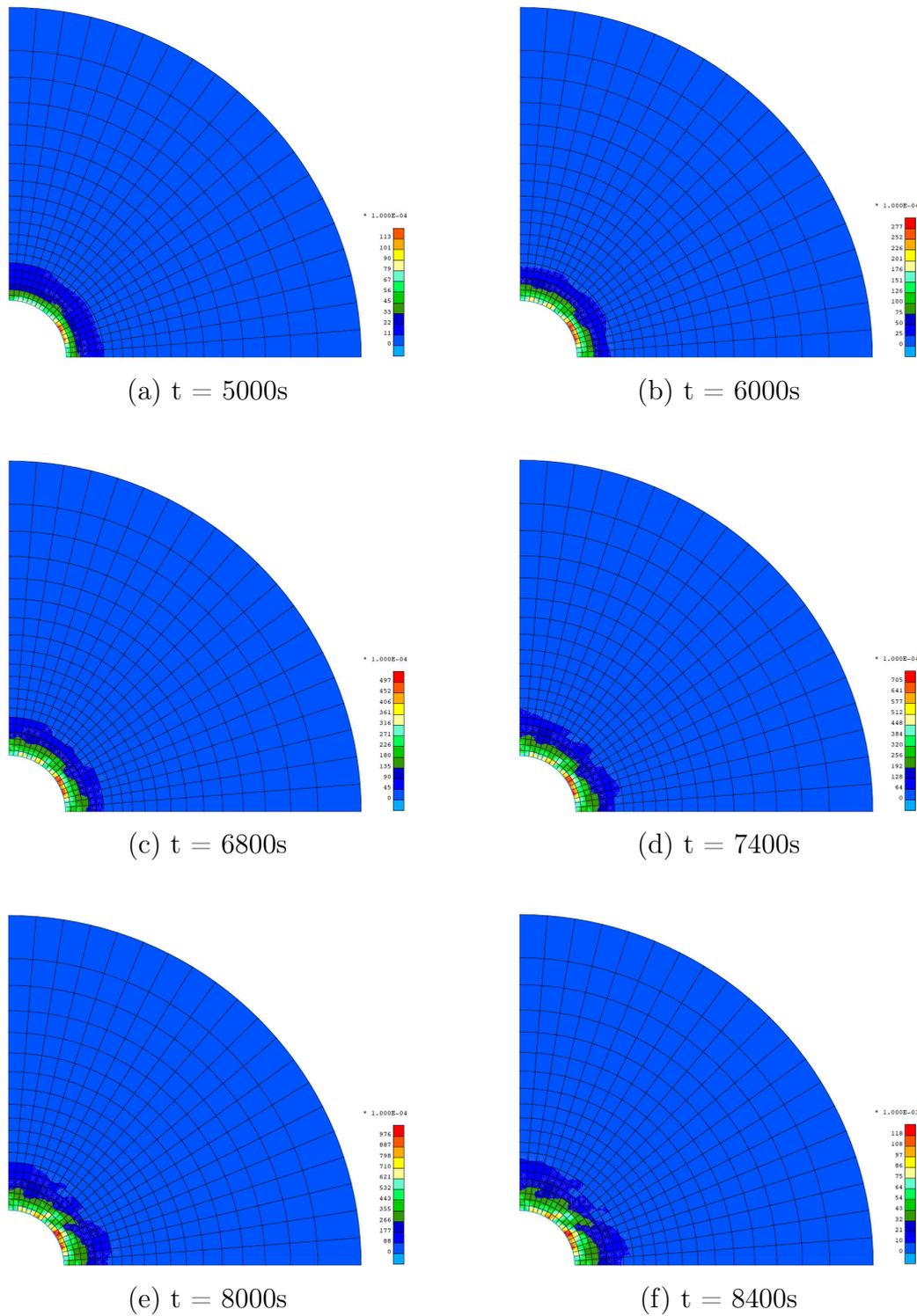


FIGURE D.3 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 5000, 6000, 6800, 7400, 8000, 8400 s$

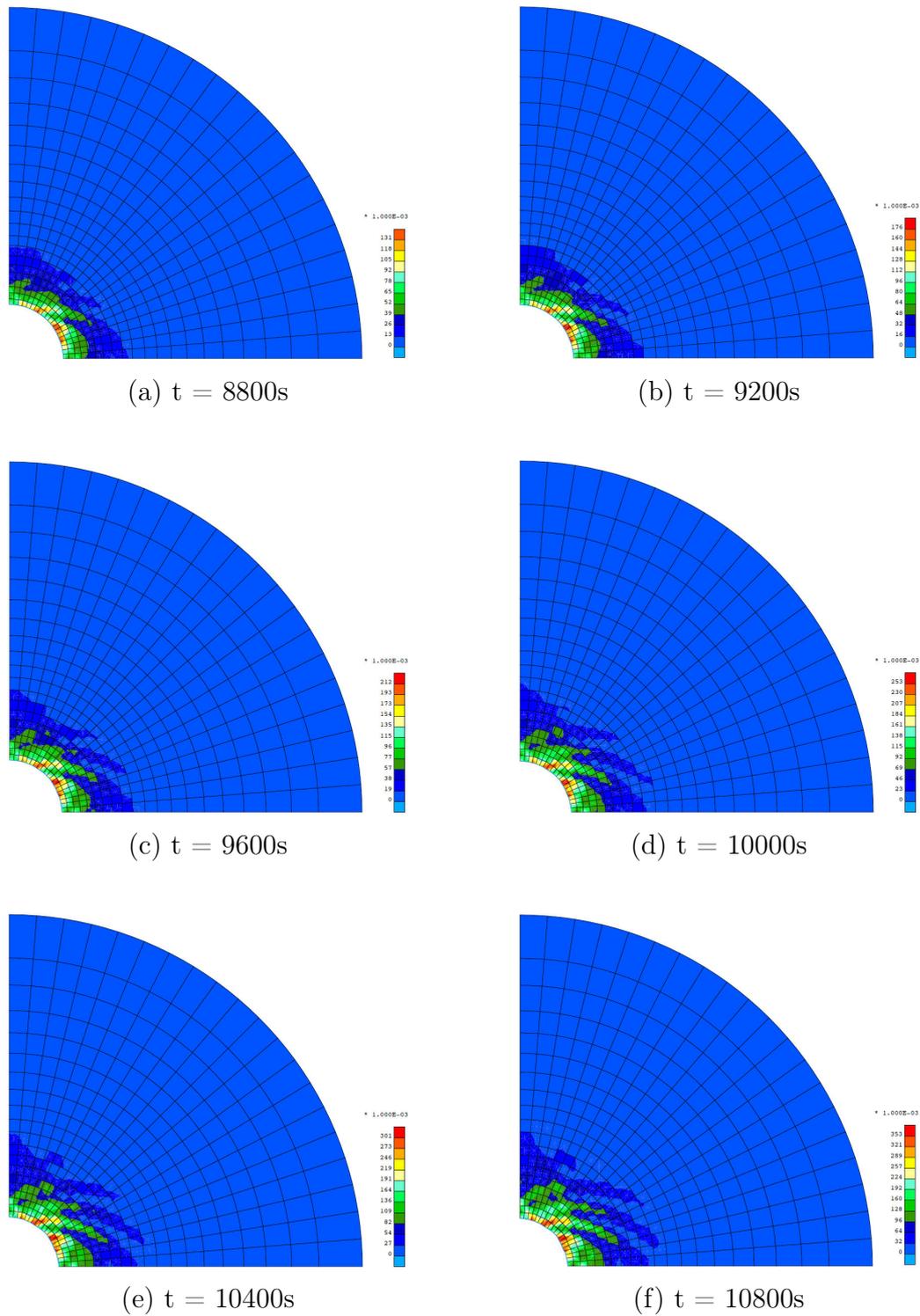


FIGURE D.4 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 8800, 9200, 9600, 10000, 10400, 10800 s$

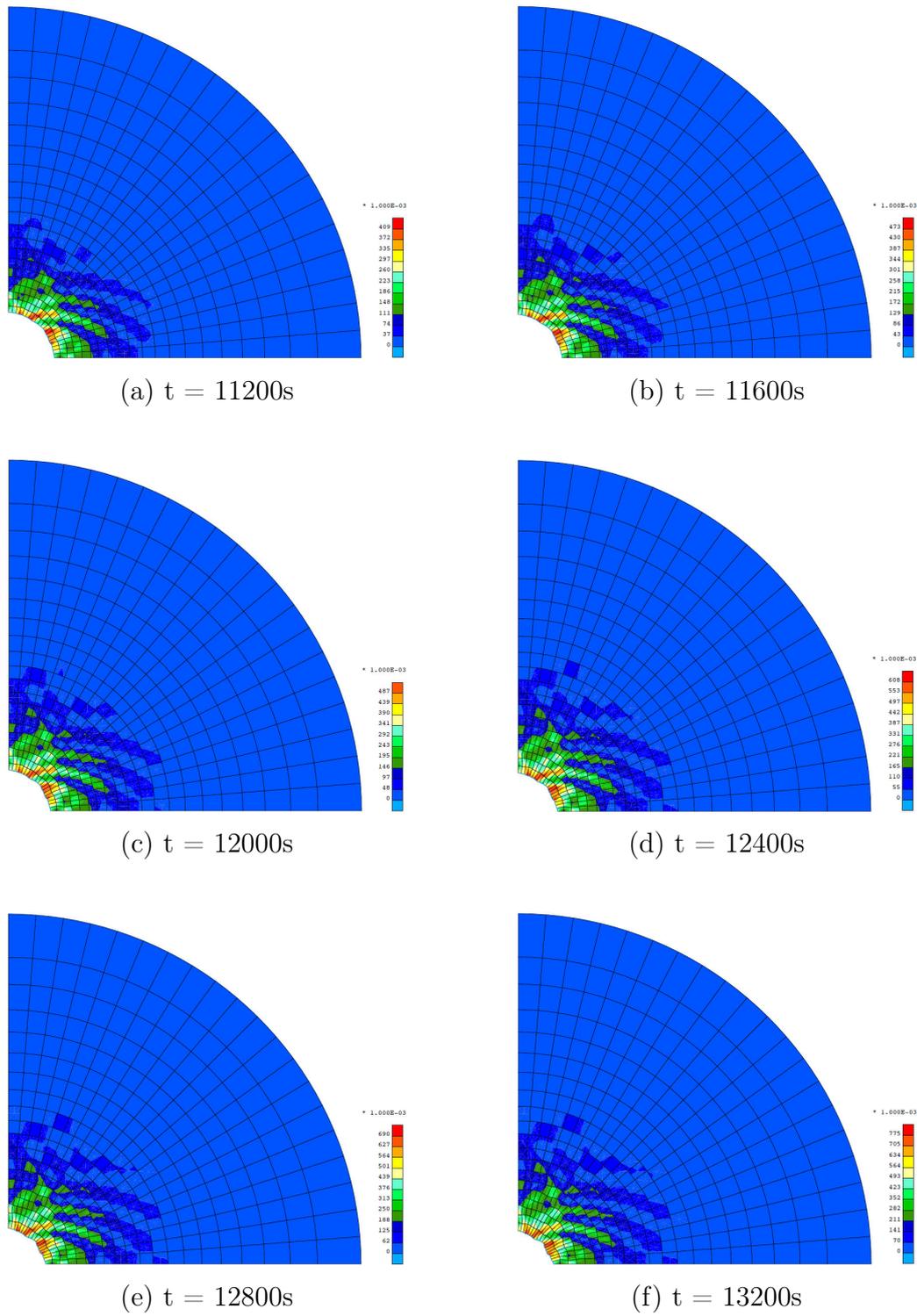


FIGURE D.5 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 11200, 11600, 12000, 12400, 12800, 13200 s$

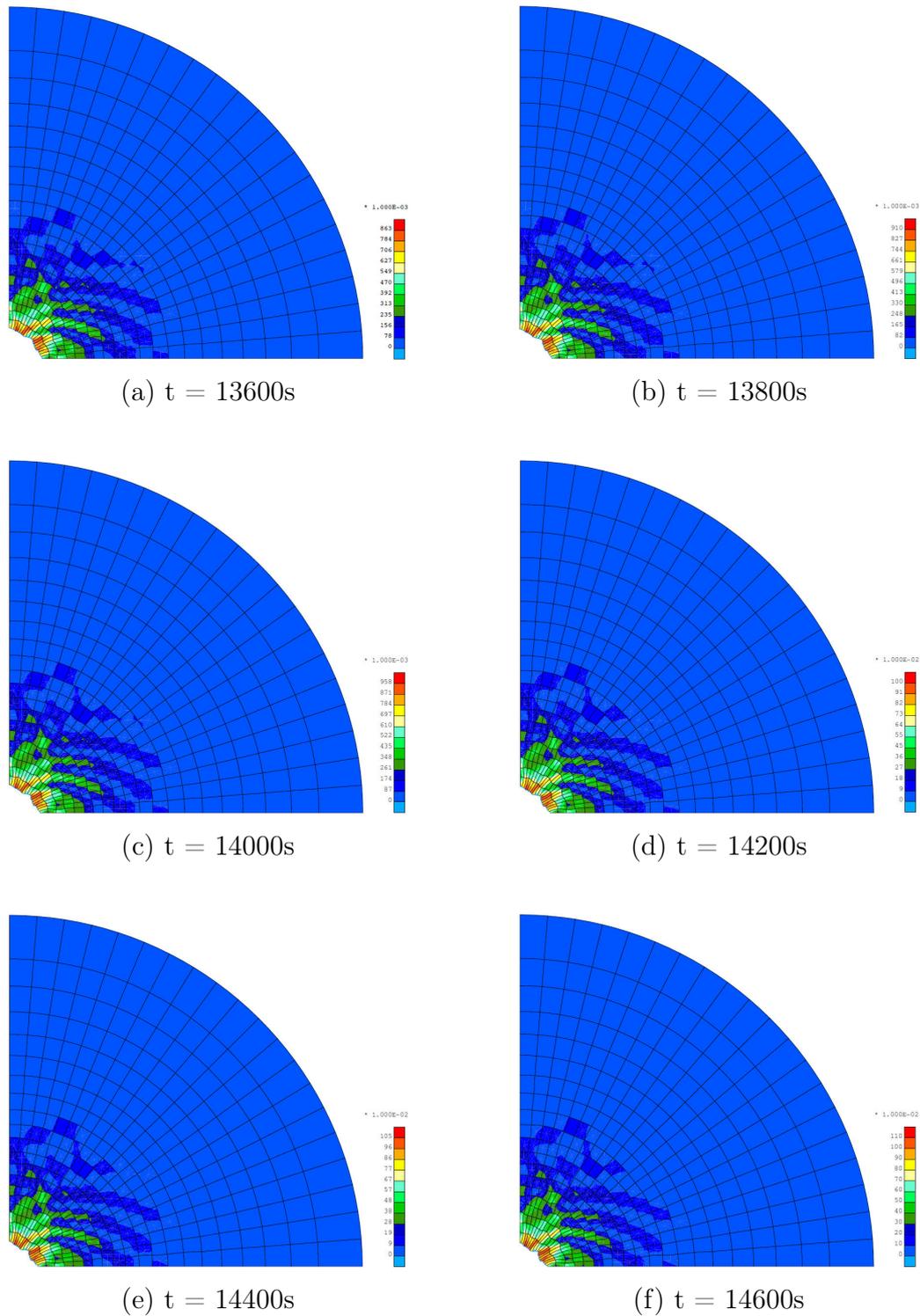


FIGURE D.6 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 13600, 13800, 14000, 14200, 14400, 14600 s$

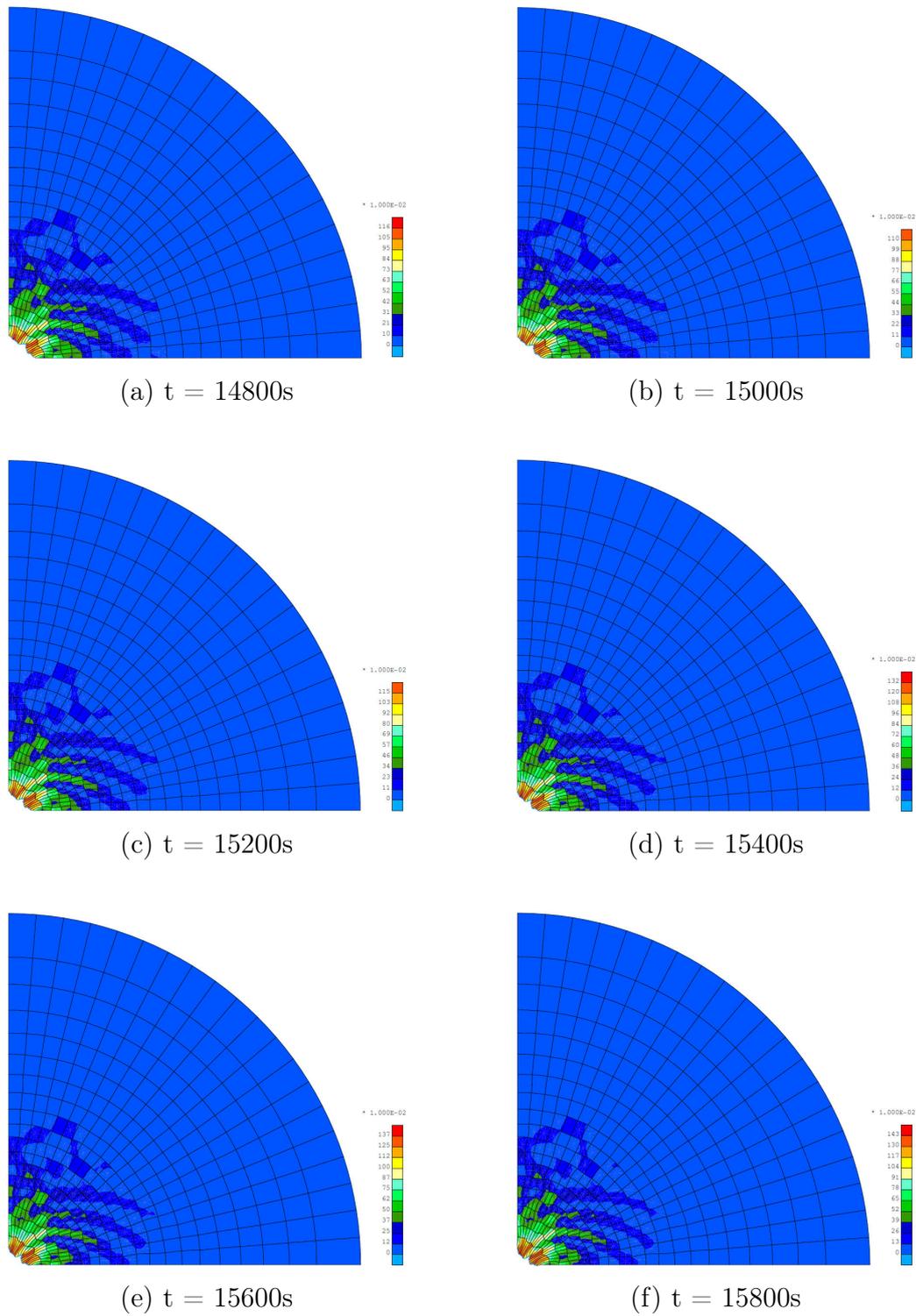


FIGURE D.7 – Modélisation d'un cylindre creux. Carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformations à  $t = 14800, 15000, 15200, 15400, 15600, 15800 s$



---

## Essai biaxial FDBMGC02

---

Les évolutions des microstructures dans deux points de Gauss choisis (un à l'intérieur et l'autre à l'extérieur de la bande de cisaillement) de l'essai biaxial numérique FDBMGC02 (celui avec les cluster à l'échelle microscopique) sont présentés dans cette annexe.

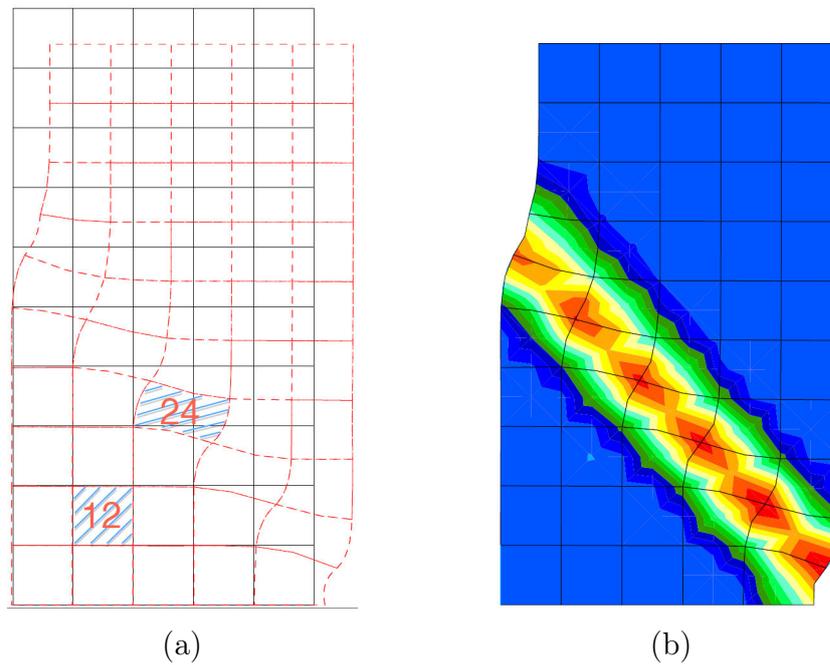
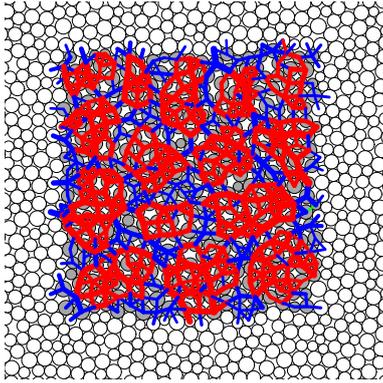
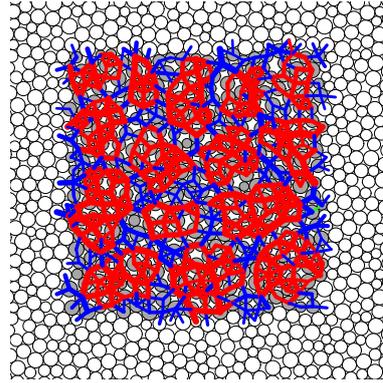


FIGURE E.1 – Location des éléments 12 et 24 : (a) la structure déformée et (b) la carte du  $2^{nd}$  invariant du tenseur de déformation à  $\varepsilon_{11} = 6\%$ .



(a) Etat initial



(b) Etat initial

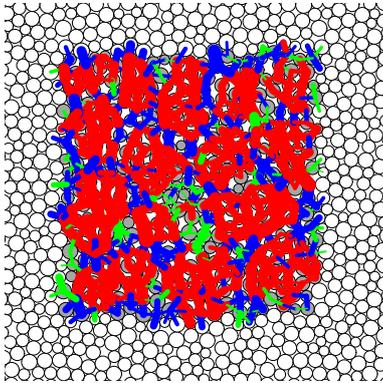
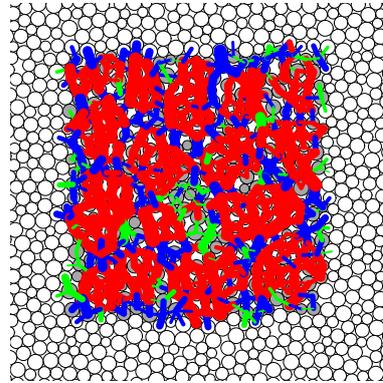
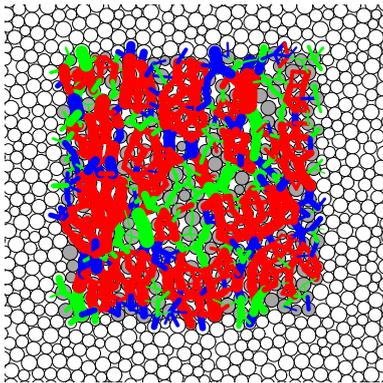
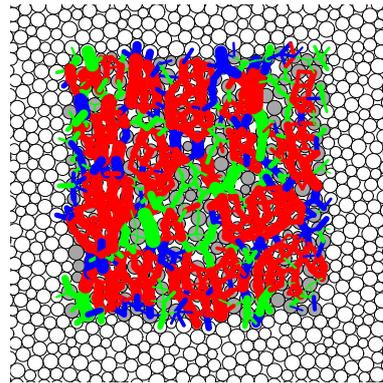
(c)  $\varepsilon_{11} = 0.27\%$ (d)  $\varepsilon_{11} = 0.27\%$ (e)  $\varepsilon_{11} = 0.51\%$ (f)  $\varepsilon_{11} = 0.51\%$ 

FIGURE E.2 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_{11} = 0, 0.27, 0.51\%$  : élément 12 à gauche, élément 24 à droite. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 0.5$ ) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.

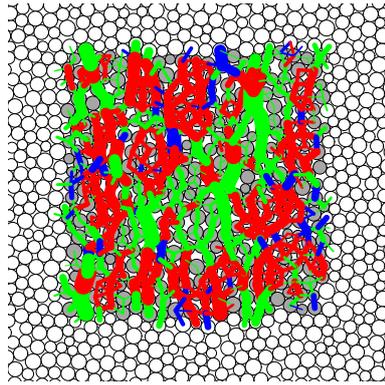
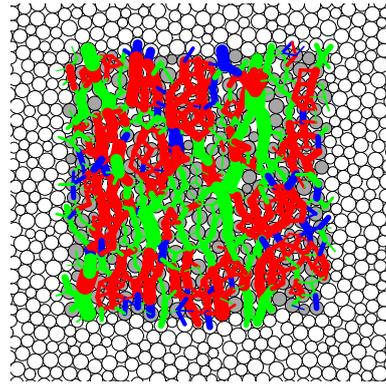
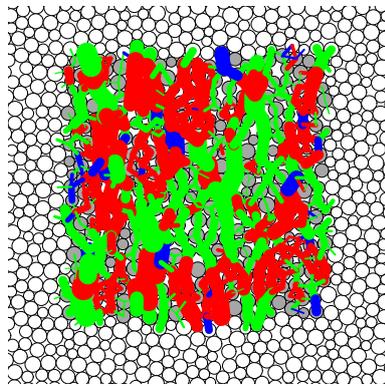
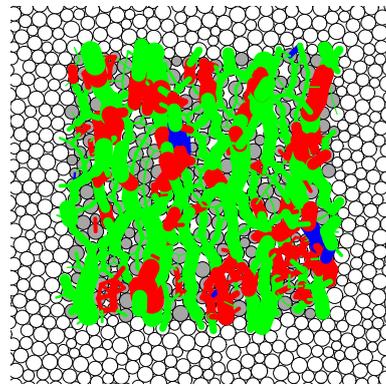
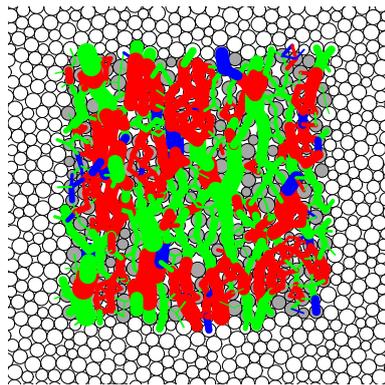
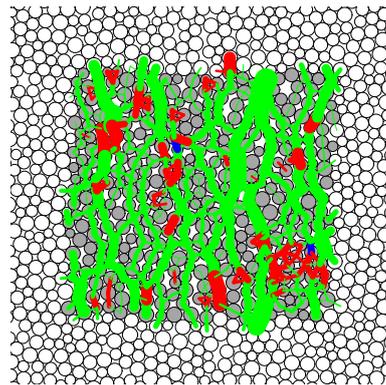
(a)  $\varepsilon_{11} = 0.86\%$ (b)  $\varepsilon_{11} = 0.86\%$ (c)  $\varepsilon_{11} = 1.15\%$  (pic)(d)  $\varepsilon_{11} = 1.15\%$  (pic)(e)  $\varepsilon_{11} = 1.42\%$ (f)  $\varepsilon_{11} = 1.42\%$ 

FIGURE E.3 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_{11} = 0.86, 1.15, 1.42\%$  : élément 12 à gauche, élément 24 à droite. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 0.5$ ) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.

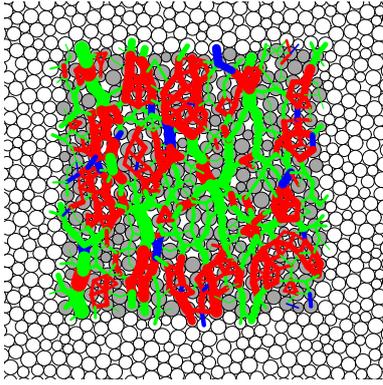
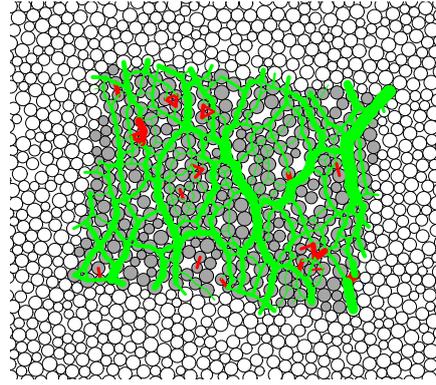
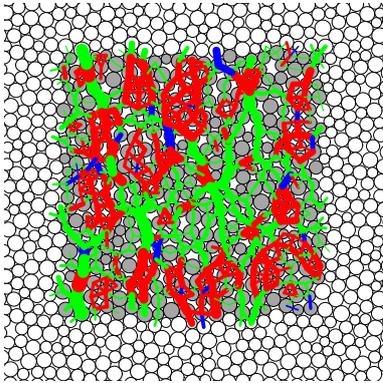
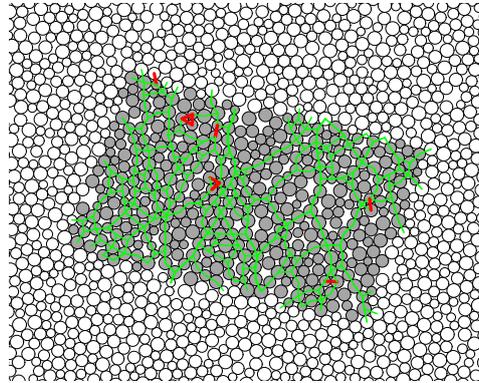
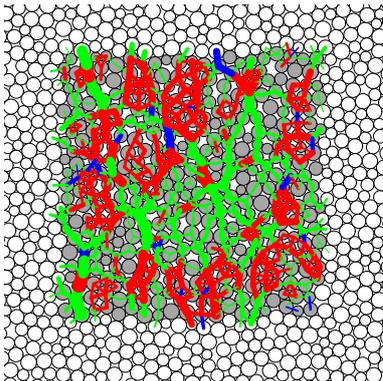
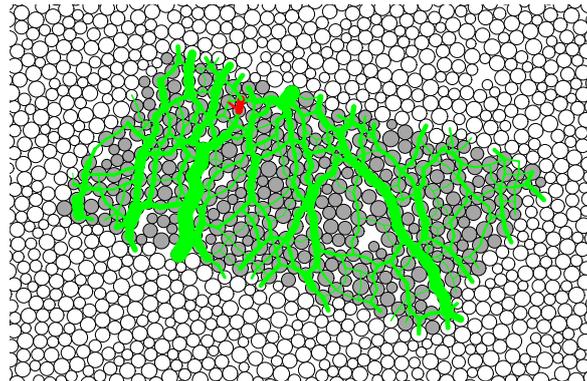
(a)  $\varepsilon_{11} = 2.44\%$ (b)  $\varepsilon_{11} = 2.44\%$ (c)  $\varepsilon_{11} = 4.33\%$ (d)  $\varepsilon_{11} = 4.33\%$ (e)  $\varepsilon_{11} = 6.00\%$ (f)  $\varepsilon_{11} = 6.00\%$ 

FIGURE E.4 – Évolution des microstructures à  $\varepsilon_{11} = 2.44, 4.33, 6.00\%$  : élément 12 à gauche, élément 24 à droite. L'épaisseur du trait proportionnelle aux valeurs de la force élastique  $f_{el}$ . Les couleurs sont utilisées avec les conventions suivantes : en rouge ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 2.0$ ) en bleu ( $f_{n0}$  effective,  $p^* = 0.5$ ) et en vert ( $f_{n0} = 0$ ) cohésion locale détruite.



# Thèse de doctorat de l'Université de Grenoble

## Modélisation multi-échelle des matériaux granulaires frottant-cohésifs

### Résumé

Ce travail de recherche présente une modélisation du comportement mécanique des matériaux granulaires cohésifs par une approche multi-échelle combinant la méthode des éléments finis (FEM) et la méthode des éléments discrets (DEM). Le principe de cette approche peut se résumer en disant que la modélisation d'un problème aux limites concernant un domaine constitué d'un matériau de type frottant-cohésif, typiquement un milieu granulaire cimenté ou non, est abordée par une méthode aux éléments finis à l'échelle macroscopique, alors qu'à l'échelle microscopique, la DEM est utilisée pour modéliser l'assemblage granulaire. Afin de faire un pont entre l'échelle micro et macroscopique, un Volume Élémentaire Représentative (VER) est considéré dans lequel la contrainte résultant d'une déformation imposée est obtenue d'un calcul numérique de type DEM. De cette manière, la loi numérique constitutive repose sur la modélisation de la microstructure, et par conséquent prend en compte la nature des matériaux granulaires.

Après avoir exposé la construction de la loi numérique, on propose d'étudier les propriétés de cette loi incrémentale en terme des enveloppes de réponse Gudehus, de l'analyse en bande de cisaillement. Cette étude nous permet d'avoir une vision générale sur cette nouvelle loi.

Ensuite, on implémente la loi numérique DEM dans un code de calcul par éléments finis, ce qui nous donne un outil numérique multi-échelle que nous testons alors sur la simulation d'essais de laboratoire, ainsi que des modèles de problèmes de terrain (cylindre creux, tunnel). Les résultats obtenus montrent l'émergence de solutions avec déformation localisée en bandes de cisaillement ; ces résultats sont analysés et discutés.

**Mots-clés :** FEM, DEM, homogénéisation numérique, matériaux granulaires frottant-cohésifs, localisation de la déformation, cylindre creux.

### Abstract

This thesis presents a multi-scale modeling approach of cohesive granular materials combining the Finite Element Method (FEM) and the Discrete Element Method (DEM). At the microscopic level, a DEM is used to model dense grains packing. At the macroscopic level, the numerical solution is obtained by a FEM. In order to bridge the micro and macro scales, the concept of Representative Elementary Volume (REV) is applied, in which the average REV stress and the consistent tangent operators are obtained at each macroscopic integration point as the results of DEM's simulation. In this way, the numerical constitutive law is determined through the detailed modeling of the microstructure, therefore taking into account the nature of granular materials.

After completing the building of the numerical law, we aim to investigate the properties of this incremental law in terms of the response envelopes Gudehus and the shear band analysis. This study allows us to better understand this new constitutive law.

On the side of multi-scale numerical contribution, the numerical law DEM is implemented in a finite elements code. The numerical tool obtained is used to simulate a series of biaxial test in plane strain condition and the hollow cylinder test in laboratory. Macroscopic strain localization is observed and discussed.

**Keywords :** FEM, DEM, numerical homogenization, cohesive-frictional granular materials, strain localization, hollow cylinder.