



Compaction des matériaux granulaires fragmentables en 3D

David Cantor Garcia

► To cite this version:

David Cantor Garcia. Compaction des matériaux granulaires fragmentables en 3D. Matériaux. Université Montpellier, 2017. Français. NNT : 2017MONT073 . tel-01948489

HAL Id: tel-01948489

<https://theses.hal.science/tel-01948489>

Submitted on 7 Dec 2018

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

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

THÈSE

Pour obtenir le grade de
Docteur

Délivré par l'**UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER**

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

Et de l'unité de recherche
Laboratoire de Mécanique et Génie Civil

Spécialité : **Mécanique et Génie Civil**

Présentée par **DAVID CANTOR GARCÍA**

COMPACTION DES MATERIAUX GRANULAIRES FRAGMENTABLES EN 3D

Soutenue le 30 novembre 2017 devant le jury composé de

M. Gaël COMBE	Professeur	Université Grenoble Alpes	Président
Mme. Pascale AUSSILLOUS	Maître de conférences	Aix-Marseille Université	Rapporteur
M. Jean-Noël ROUX	Chercheur	IFSTTAR, Laboratoire Navier	Rapporteur
M. Jean-Yves DELENNE	Directeur de recherche	INRA, Laboratoire IATE	Examineur
M. Alfredo TABOADA	Maître de conférences	Université de Montpellier	Examineur
M. Farhang RADJAI	Directeur de recherche	CNRS	Directeur de thèse
M. Emilien AZÉMA	Maître de conférences	Université de Montpellier	Co-encadrant
M. Philippe SORNAY	Expert senior	CEA - Cadarache	Co-encadrant

*A mis padres
y a mi hermano*

COMPACTION DES MATERIAUX GRANULAIRES FRAGMENTABLES EN 3D

Relation entre les propriétés des particules et la tenue mécanique
des assemblages granulaires

Remerciements

- Tu en as trois options. Laquelle tu préfères ?
- Moi – j’ai répondu avec une toute petite voix – je préfère *los Andes*.
- C’est difficile. Tu sais que c’est cher.
- Oui.

Je le savais très bien. On vivait relativement bien à l’époque mais nos moyens n’étaient pas assez souples pour payer le coût de l’inscription et soutenir dans cette université.

Je n’arrive pas à imaginer toutes les choses auxquelles elle était en train de penser, les économies à prévoir, les sacrifices à faire. Alors, elle m’a regardé dans les yeux comme seul une mère sait le faire et sans consulter l’avis de mon père elle dit :

- Tu étudieras là-bas alors... et il vaut mieux que tu sois pas mauvais.

JE pense que la prise de cette décision, un peu risquée et à la fois courageuse, a été un des instants les plus importants pour que je sois aujourd’hui en train d’écrire ces mots. Ce choix, et des grands efforts derrière, m’ont permis de faire connaissance de personnes magnifiques, de voyager un peu dans le monde, d’apprendre d’autres langues, de rire comme je ne l’avais pas imaginé, et du coup à finir une thèse. Bien sûr, je n’aurais pas pu le faire seul. De nombreuses personnes m’ont aidé, m’ont soutenu, et m’ont conseillé. C’est le moment pour leur dire merci.

Je remercie particulièrement Farhang RADJAÏ, pour sa patience et pour son esprit heureux et travailleur sans cesse. Emilien AZÉMA, merci pour son pragmatisme et son amour pour la Colombie. Cet amour qui arrivait même à recharger mes sentiments pour mon pays. Philippe SORNAY, merci pour la manière comme tu arrivais à remettre les idées, les résultats et la motivation en course lorsque je me trouvais perdu. Nicolás ESTRADA, pour être sans doute l’un de meilleurs exemples de chercheur, professeur et personne que je n’ai jamais vu. Merci.

Je remercie également Alfredo TABOADA, Arcesio LIZCANO, Gilberto RODRÍGUEZ, Bernardo CAICEDO et Silvia CARO. Au travers de plusieurs discussions, des travaux de

veloppés ensembles, ou simplement de votre exemple comme chercheurs et être humains, vous m’avez formés énormément. Vous m’avez guidé en moments de doute et, surtout, vous m’avez transmis l’amour pour apprendre et pour enseigner. Si j’avais une forte envie de faire une thèse c’est en grande partie grâce à vous.

À Montpellier, je remercie d’abord François, Odile, et Benoît RICHARD. Vous avez été un soutien très important pour moi depuis mon premier arrivé à Montpellier, là-bas vers 2010, et tout le long de mon séjour en France. J’ai pu m’adapter rapidement à la vie dans ce pays grâce à vous.

Au CEA, je remercie Jérôme LAMONTAGNE, Nicole BUON, Corinne DRUESNE, et Sylvie CAMARO. Des personnes incroyablement amicales et gentilles qui ont fait très agréables mes séjours, présentations, et formations à Cadarache.

Au labo, je remercie Frédéric DUBOIS, Mathieu RENOUF, Rémy MOZUL, Saied NEZAMABADI, Serge MORA, Caroline DAT, Chantal ROMANO, Cyril VIDEAU, et Roxanne CREMER. Votre aide à différents instants de cette thèse a été toujours précieuse pour moi.

Pendant ces trois ans j’ai rencontré des personnes incroyables au LMGC. Merci Kajetan WOJTACKI (pour nos innombrables aventures, pour les milliers de kilomètres qu’on a roulé, et toutes les bêtises qu’on a fait – je remercie aussi ta famille), Julia LAITHIER (–la française la plus latina– pour ta patience, soutien et compagnie), Lhassan AMARSID (pour ta folie et amitié sincère), Paul SCHUHMACHER (–le relecteur de ce mémoire et le professeur de français– pour nos engueulades ! tu m’as appris énormément de choses l’ami), Lơ VŨ et Minh PHẠM (pour votre gentillesse infinie... – on se reverra au Vietnam), Luisa OROZCO (pour ton soutien inconditionnel), Komlanvi LAMPOH (pour être la personne la plus optimiste que j’aie connu et pour nous transmettre cet esprit tous les jours ... et aussi pour nous montrer comment on répare des choses au Togo), Cécile BATIER (pour ton amitié... et pour aller tout droit), Julia ADAMEK (pour être un soutien à la distance), María VILLAVICENCIO et Ogier DOLLÉ (pour votre esprit plein d’énergie et toujours chaleureux).

Je remercie également Mahmoud FAKIH, Ángela FERNANDEZ, Pénélope GRENIER, Aditi CHAKRABARTI, Riccardo FERRARA, Đức Hạnh NGUYỄN, Thành Trung VÕ (tout à fait !), Chaoqun ZENG, Thanh Hải NGUYỄN, Patrick MUTABARUKA, Nicolas BERGER, Léa ATMANI (oui oui oui !), Pierre-Louis VALDENNAIRE (on va taffer ?), Amael OBLIGER, Anna LUSHNIKOVA, Fabien ROZAR, Brice NKOMBOU, Pankaj YADAV (ma man !), Vicent SERANTONI, Jonaz VASQUEZ-VILLEGAS, Joeffrey LHONNEUR, Noémie PETITJEAN, Thierry SATOH, Theechalit BINAREE, Asma IDRISI, Nicolas FALGAYRETTES, Camille OLLIER, Romane LAITHIER...

Que les éventuels oubliés me pardonnent...

Je me sens très chanceux d’avoir fait votre connaissance. Je me suis régalé à Montpellier

et ailleurs grâce à vous. Merci !

En Colombia, les doy gracias a Juan Pablo VARGAS, Daniel CASTI, Diego ROJAS, Sandra MEDINA, Andrés BARRERO, Fidel GÓMEZ, Oscar Daniel GALVIS, Ángela QUINTERO, Ángela LLANOS, Fabio GRACIA, Raquel ROMERO, Laura HENAO, Natalia QUINTERO, Eliana AMAYA, Juan Pablo ALVARADO, Julieth MONROY, Miguel Angel CABRERA, William OQUENDO, Cristhian MENDOZA, Hugo NUÑEZ. Ustedes hicieron muy alegre mi paso por la universidad y los meses antes de venir a Francia. Igualmente a la gente del colegio a quienes llevo en una parte especial de mis recuerdos Hector MORA, Juan APONTE, y Uriel ORJUELA. Gracias.

Enfin, mais certainement la plus importante, merci à ma famille. En especial Rosalba GARCÍA, Ismael CANTOR, Daniel CANTOR y Lina CARDONA. Gracias por su apoyo, su paciencia, su entrega, su generosidad infinita. No encuentro palabras para describir todo lo que les agradezco. Son lo más importante para mi.

Gracias ma, gracias pa.

David Cantor García
À Montpellier, le 9 février 2018.

Table des matières

Introduction Générale	1
1 Contexte industriel et scientifique	7
1.1 Le combustible uranium	9
1.1.1 La poudre de dioxyde d'uranium	9
1.1.2 Le procédé de fabrication du combustible	10
1.2 La fragmentation des matériaux granulaires	11
1.2.1 Observations et expériences	11
1.2.2 Modèles analytiques et des milieux continus	18
1.2.3 Modèles numériques discrets	19
1.3 La variabilité des forme et des tailles de grains	22
1.3.1 Observations et expériences	22
1.3.2 Effet de la forme et des tailles des grains	24
Conclusion	28
2 Modélisation discrète et analyse microstructurale	31
2.1 Modélisation numérique par éléments discrets	33
2.1.1 La dynamique moléculaire	33
2.1.2 Dynamique des Contacts	34
2.1.3 Remarques sur le choix de la méthode numérique	40
2.1.4 Remarques sur la simulation de grains polyédriques	40
2.2 Microstructure d'un matériau granulaire	42
2.2.1 La texture	42
2.2.2 Les chaînes de forces	45
Conclusion	49
3 Fragmentation d'un grain individuel	51
3.1 Modèle numérique 3D : Modèle de cellules collées	53
3.1.1 Géométrie des grains et des fragments	53
3.1.2 Loi d'interaction entre cellules	55
3.2 Compression de grains individuels	56
3.2.1 Effet des paramètres géométriques du maillage	59
3.2.2 Effet des paramètres mécaniques	60

Conclusion	67
4 Compaction uniaxiale d'assemblages de grains sécables	69
4.1 Procédures numériques	71
4.2 Comportement macroscopique	72
4.2.1 Charge, déformation et volume	72
4.2.2 Évolution des tailles des particules	74
4.2.3 Coefficient de pression latérale	78
4.3 Microstructure	80
4.3.1 Production de fragments	80
4.3.2 Connectivité	81
4.3.3 Évolution des formes de fragments	84
4.3.4 Transmission des contraintes	88
Conclusion	90
5 Micromécanique des milieux granulaires polydisperses en 3D	93
5.1 Préparation des assemblages granulaires	95
5.2 Équilibre statique	96
5.2.1 Compacité et connectivité	96
5.2.2 Transmission des forces	98
5.3 Résistance au cisaillement des assemblages	99
5.3.1 Comportement à l'échelle macroscopique	100
5.3.2 Microstructure granulaire	102
Conclusion	112
Conclusion générale	115
Bibliographie	123
Annexes	135
A. Article publié dans Computational Particle Mechanics	137

Introduction Générale

À la plage, lorsque vous mettez un pied sur le sable, vous avez probablement remarqué que des centaines de grains se mettent en mouvement, comme s'il se formait une substance fluide sous le pied. Le pied du marcheur s'enfonce progressivement et les grains de sable se déplacent, se réorganisent et cherchent la meilleure façon d'équilibrer les efforts exercés par le pied. La charge se distribue alors jusqu'à des grains situés plus en profondeur et le pied cesse de s'enfoncer. Le sable ne vous a pas englouti ; les grains, dans leur assemblage, ont créé une substance solide capable de soutenir votre pied. Ceci a été possible, d'une part, grâce aux réarrangements des particules de sable, et d'autre part, à leur abrasion et même leur fragmentation.

Les grains les plus chargés, ceux qui étaient dans des configurations moins privilégiées, ou les grains les plus fragiles, s'usent et se brisent, redistribuant ainsi les efforts à travers leurs fragments. Cet ensemble de grains ne sera plus jamais comme avant. La nouvelle distribution spatiale des grains et fragments conduit à une augmentation de la densité locale, modifiant la connectivité des grains et la distribution des efforts et probablement aussi la résistance mécanique de l'assemblage. Si vous venez un jour y reposer votre pied, l'empreinte que vous y laisserez sera elle aussi différente.

Bien qu'au cours de ce mémoire nous n'invoquerons ni pieds ni sable, le procédé de compaction des matériaux granulaires étudié dans ce travail de thèse a, quant à lui, tout de comparable. Le combustible usuellement utilisé dans les réacteurs nucléaires à eau est composé d'un minéral polycristallin d'uranium (dioxyde d'uranium - UO_2) qui arrive dans les usines de fabrication sous forme de poudre ; voir Fig. 1(a). Dans ces usines, le minéral est traité afin d'obtenir des cylindres ou pastilles d'environ 10 millimètres de diamètre et de hauteur. Cette mise en forme de l' UO_2 s'effectue généralement en 3 étapes. La poudre, n'ayant pas une bonne coulabilité, est soumise à un procédé d'agglomération qui permet de former des grains, aussi connus sous le nom de *granulés*, dont la taille ne dépasse pas le millimètre ; voir Fig. 1(b). Ensuite, des matrices de presse cylindriques sont remplies avec ces granulés et, sous l'action d'un piston, la poudre d' UO_2 est compactée jusqu'à l'atteinte de la densité désirée. Au cours du pressage, les réarrangements des granulés, leur fragmentation, et leur enchevêtrement confèrent aux comprimés la capacité de maintenir une forme cylindrique, ce qui les rend facilement manipulables sans qu'ils se brisent. Enfin, les comprimés sont prêts pour être soumis à un dernier traitement de type thermique (frittage) qui finira par lier intimement les granulés d' UO_2 . Il est important de noter que la

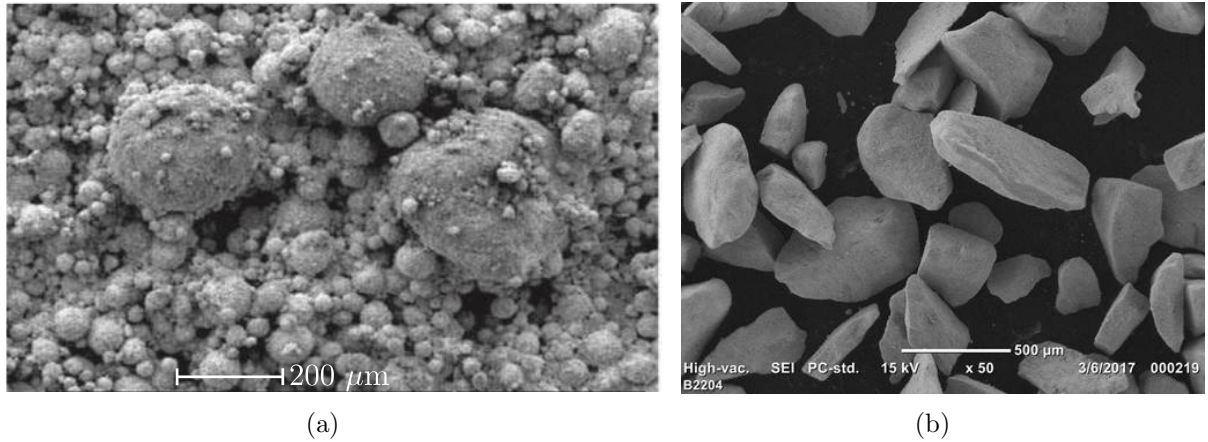


FIGURE 1 – Images obtenues par microscope électronique à balayage des (a) agglomérats d' UO_2 et de (b) granulés obtenus après le procédé d'agglomération de la poudre [64].

structure de l'assemblage granulaire (la densité, la porosité . . .) et donc la tenue mécanique du comprimé sont des propriétés qui sont fixées à l'étape de pressage et vont jouer un rôle déterminant pour le comportement du combustible au sein du réacteur.

Ces procédés de fabrication des comprimés ont typiquement lieu dans des environnements fermés, ce qui les rend peu accessibles à l'instrumentation et à la prise de mesures pendant l'évolution de la structure granulaire. De plus, la taille relativement petite des granulés et la haute densité qui est atteinte limitent l'usage de méthodes alternatives de suivi de l'arrangement granulaire telles que la tomographie aux rayons X. Par ailleurs, les concepts classiques fondés sur la mécanique de la rupture ne sont pas facilement applicables à l'étude de la fragmentation d'un système multi-contacts comme un matériau granulaire, où les distributions des contraintes entre les grains et à l'intérieur de chaque grain sont complexes et variables.

Face à ces restrictions, la modélisation numérique discrète apparaît comme un outil privilégié afin d'étudier, à partir de l'échelle des grains et de leur interactions, l'évolution d'un assemblage granulaire sous chargement. Jusqu'à présent, la complexité des formes et des distributions des tailles de grains lors de la fragmentation ont été difficiles à reproduire et à traiter du point de vue numérique. Plusieurs approches ont été proposées et mises en œuvre à partir de simulations 2D mais il en existe très peu en 3D. Les simulations 3D sont particulièrement exigeantes et nécessitent une puissance de calcul importante, de la mémoire et des espaces de stockage conséquents. Aujourd'hui, grâce à une avancée constante aux niveaux techniques et des méthodes de simulation, nous pouvons réaliser des études numériques systématiques du procédé de compaction de poudres avec la prise en compte des interactions réalistes entre grains, de leur forme et de leur taille, en passant par leur fragmentation. Ces études devront permettre d'atteindre une compréhension plus fine des phénomènes physiques liés à la texture et son rapport avec le comportement collectif d'un ensemble de grains susceptibles de se fragmenter.

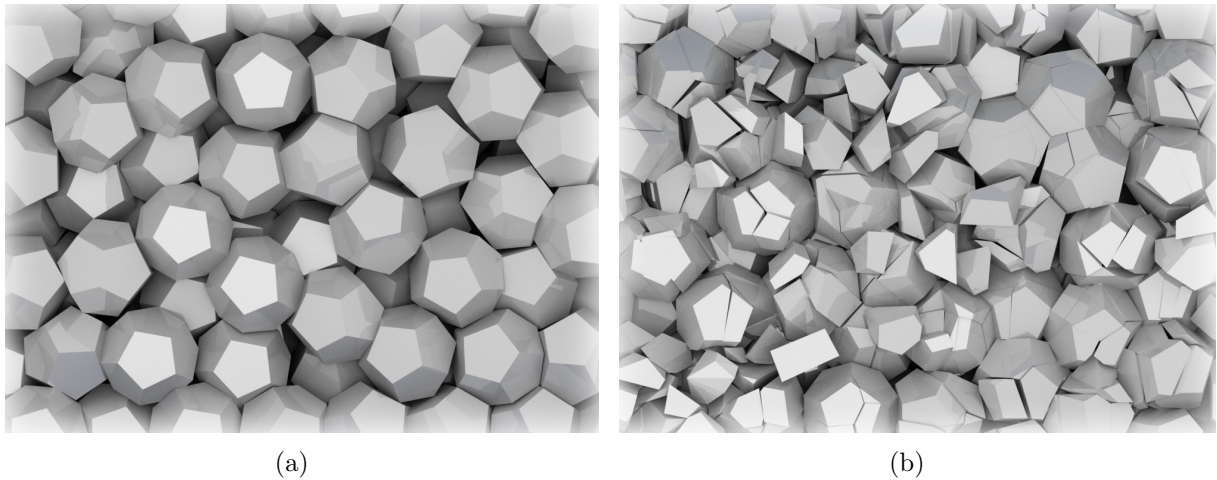


FIGURE 2 – Image d'un échantillon numérique composé de grains polyédriques sécables soumis à une compression uniaxiale à une faible (a) et à une forte (b) contrainte appliquée ; voir Chapitre 4.

Les principaux objectifs de ce travaux de thèse sont les suivants :

1. Mettre en œuvre un modèle numérique tridimensionnel nous permettant d'explorer le comportement de grains cassables tant à l'échelle d'un grain individuel qu'à l'échelle d'un assemblage de grains,
2. Analyser l'effet de la fragmentation des grains sur la tenue mécanique du matériau soumis au procédé de compaction,
3. Analyser l'évolution de la fragmentation des grains en termes de fraction, taille et formes lors de la compaction,
4. Explorer l'effet de la variabilité des tailles de grains sur le comportement mécanique en compaction et sous cisaillement.

Pour atteindre ces objectifs, nous avons développé un modèle de fragmentation basé sur la représentation des grains de forme quelconque comme un agrégat de fragments potentiels (cellules) en utilisant un maillage de Voronoï 3D dont nous pouvons contrôler la géométrie et la finesse. Ce modèle a été implanté sur une plateforme logicielle basée sur la méthode de Dynamique des Contacts et appliqué pour l'étude du comportement des grains individuels et des assemblages de grains sécables pour une large gamme de valeurs de paramètres géométriques et mécaniques. Ces études ont permis de montrer que notre modèle permet d'obtenir des distributions réalistes de tailles et de formes des grains comme illustré sur la Fig. 2.

Ce mémoire est organisé en 5 chapitres comme suit :

Dans le chapitre 1, nous présentons le contexte industriel et scientifique de cette étude. Les caractéristiques physiques et mécaniques de la poudre d' UO_2 , ainsi que le procédé industriel de fabrication du combustible uranium, y sont présentés en détail. Ensuite, une

synthèse bibliographique est présentée à partir des observations, expériences, et modèles proposés dans la littérature sur l'étude de la fragmentation des matériaux granulaires et la variabilité des formes et des tailles des fragments. Le chapitre 2 est consacré à une présentation détaillée de la méthode de Dynamique des Contacts utilisée dans le cadre de cette thèse. Nous présentons également dans ce chapitre les différents concepts et outils d'analyse pour la microstructure des matériaux granulaires qui seront appliqués dans les chapitres qui vont suivre.

Dans le chapitre 3, nous introduisons notre modèle de fragmentation de grains. Comme première application, nous utilisons notre approche numérique pour l'étude de la fragmentation d'un grain sous compression diamétrale entre deux parois rigides. Nous montrons en détail l'effet des paramètres géométriques et mécaniques des grains sur leur tenue mécanique. Par la suite, on considère le comportement des assemblages de grains soumis à des essais de compression uniaxiale. On analyse les relations charge-densité, l'évolution des tailles et des formes de fragments, ainsi que la microstructure granulaire et la transmission de contraintes.

Dans le chapitre 5, nous allons analyser des assemblages de grains non-sécables 3D de tailles fortement variables où nous cherchons à identifier l'effet de l'étalement granulométrique sur la compaction et la résistance au cisaillement.

Le mémoire se termine par les conclusions générales et perspectives de cette thèse.

“ Me atrevo a pensar, que es esta realidad descomunal [de América Latina], no es la del papel, sino que vive con nosotros y determina cada instante de nuestras incontables muertes cotidianas, y que sustenta un manantial de creación insaciable, pleno de desdicha y de belleza, del cual este colombiano errante y nostálgico no es más que una cifra más señalada por la suerte.”

G.G. Márquez

Chapitre 1

Contexte industriel et scientifique

L'OBJET de ce chapitre est de présenter les propriétés physiques et mécaniques de la poudre de dioxyde d'uranium et le procédé de fabrication du combustible UO_2 . Nous allons souligner le rôle de la fragmentation et de l'arrangement des grains sur la tenue mécanique des comprimés de poudre UO_2 . Nous allons ensuite placer ces aspects dans le contexte plus général de la mécanique des milieux granulaires. À l'aide de plusieurs observations et approches expérimentales menées dans des domaines tels que la mécanique de sols et la rhéologie des poudres, nous allons montrer les caractéristiques principales de la rupture fragile des matériaux granulaires. La variabilité de forme et de taille de fragments issus des ruptures de grains sera également discutée avec son effet sur la rhéologie. Ensuite, nous allons présenter quelques approches remarquables pour la modélisation de la fragmentation de grains, la variabilité géométrique des particules, et leur rapport avec la résistance mécanique d'assemblages de grains. Dans une dernière partie, nous allons mettre l'accent sur les études numériques discrètes car nos travaux s'effectuent dans le cadre de cette approche.

Sommaire

1.1	Le combustible uranium	9
1.1.1	La poudre de dioxyde d'uranium	9
1.1.2	Le procédé de fabrication du combustible	10
1.2	La fragmentation des matériaux granulaires	11
1.2.1	Observations et expériences	11
1.2.2	Modèles analytiques et des milieux continus	18
1.2.3	Modèles numériques discrets	19
1.3	La variabilité des forme et des tailles de grains	22
1.3.1	Observations et expériences	22
1.3.2	Effet de la forme et des tailles des grains	24
	Conclusion	28

1.1 Le combustible uranium

Le combustible utilisé dans les réacteurs à eau est principalement constitué de dioxyde d'uranium (UO_2) sous forme de petits cylindres appelés pastilles. Les réactions de fission à l'intérieur des pastilles libèrent de l'énergie qui permet chauffer un fluide caloporteur. Ce fluide alimente des turbines couplées à des alternateurs pour produire de l'électricité. Le comportement du combustible en réacteur est déterminé entre autre par 1) le spectre neutronique 2) les propriétés physico-chimiques du matériau UO_2 et 3) la manière dont les comprimés sont fabriqués (le procédé).

1.1.1 La poudre de dioxyde d'uranium

L'uranium naturel contenu dans les minerais est extrait et concentré par attaque acide (ou alcaline) et précipitation. Le précipité obtenu ou "yellowcake" contient environ 75% d'uranium. Il est ensuite converti en UF_4 pour être purifié. Comme l'enrichissement est réalisé à l'état gazeux (sous forme d' UF_6), seules les opérations situées en aval de cette étape ont une influence sur la poudre de combustible obtenue.

Le fluorure d'uranium est transformé en oxyde d'uranium à partir d'un procédé de *conversion* en voie sèche ou voie humide [64]. La poudre obtenue est de couleur noire-grisâtre et sa structure cristalline est principalement cubique. La particule primaire de la poudre est connue sous le nom de *cristallite* dont la taille est inférieure à $1\ \mu\text{m}$ et la forme est typiquement ovoïdale [103]. La plupart des cristallites se trouvent liés par des ponts solides, créant des agrégats de formes irrégulières dendritiques ou non-convexes dont la taille est inférieure à quelques micromètres. Les agrégats de taille micronique se lient entre eux sous l'effet d'interactions faibles telles que les forces de van der Waals ou des ponts liquides. La distribution des tailles des agglomérats d' UO_2 et leur compacité varient en fonction de la méthode de conversion ; voir Fig. 1.1.

Les techniques et les conditions (notamment de température) utilisées lors de la préparation de la poudre peuvent affecter ses propriétés dont quelques valeurs moyennes ou théoriques sont listées dans le Tableau 1.1. Les poudres d' UO_2 sont très cohésives et s'écoulent fort mal. Il est ainsi possible de former des colonnes de poudre de 10 mm de diamètre et de plus de 35 mm de haut en introduisant la poudre dans un moule puis en retirant délicatement le moule. Il est important de souligner que la poudre d' UO_2 est préférée à d'autres composants à base d'uranium étant donnée sa bonne résistance aux températures élevées et aux radiations, et son caractère stable (faible risque d'inflammation spontanée) [64].

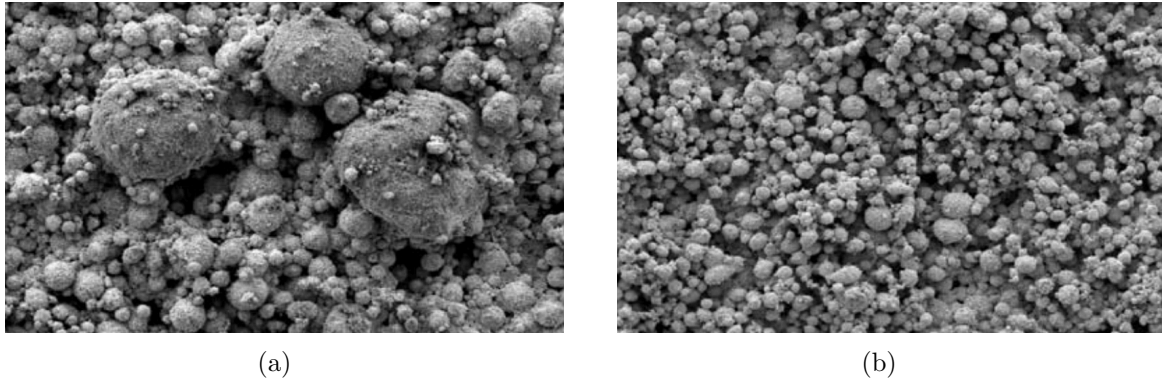


FIGURE 1.1 – Images au MEB des agglomérats d' UO_2 obtenues à partir du procédé (a) voie sèche et (b) voie humide. La largeur des images est de l'ordre de 1 mm [64].

Propriété	Valeur
Surface spécifique	$\sim 2 \text{ m}^2/\text{g}$
Densité théorique	$10,96 \text{ g}/\text{cm}^3$
Point de fusion	$\sim 3130 \text{ K}$
Taille des particules	$0,1 \text{ à } 50 \text{ }\mu\text{m}$

TABLE 1.1 – Quelques propriétés de la poudre de dioxyde d'uranium [64, 19].

1.1.2 Le procédé de fabrication du combustible

La fabrication des combustibles nucléaires actuels à base de dioxyde d'uranium UO_2 repose sur un procédé de métallurgie des poudres. Il comporte trois étapes principales qui sont très brièvement décrites ci-après :

- la première étape concerne la préparation des poudres. Elle consiste à mélanger de manière plus ou moins énergétique les poudres avec un produit organique se décomposant au frittage pour maîtriser la densité et un agent lubrifiant pour diminuer et faciliter leur mise en forme. Compte tenu du mauvais écoulement des poudres, une opération de granulation mécanique est nécessaire pour conférer à la poudre une vitesse d'écoulement suffisante pour répondre aux cadences industrielles. Cette opération consiste à compacter les poudres puis à concasser les compacts pour former des granulés de taille inférieure au millimètre et de forme polyédrique ;
- la deuxième étape concerne la mise en forme de la poudre constituée de granulés. La poudre est déversée dans le moule de presse cylindrique puis comprimée sous une contrainte voisine de 400 MPa. Le compact est alors éjecté. Il a un diamètre voisin de 10 mm et une hauteur d'environ 15 mm comme présenté sur la Fig. 1.2(a). Sa densité est de l'ordre de 60% de la densité théorique de l' UO_2 . Pendant la compaction, les granulés se réarrangent et se fragmentent pour réduire les vides entre particules. À l'issue de la compaction, la cohésion du comprimé doit être suffisante pour qu'il soit

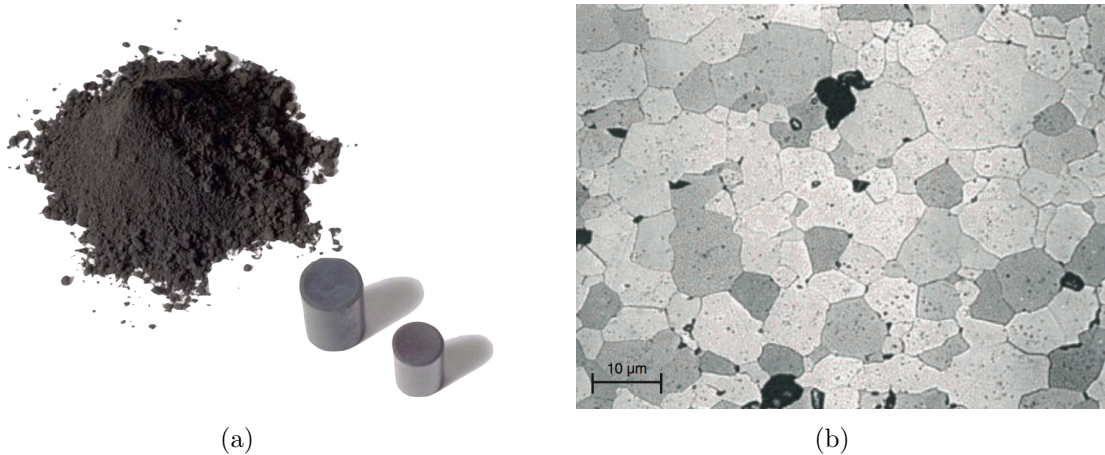


FIGURE 1.2 – Images de (a) la poudre et des comprimés d' UO_2 après la compaction [2], et (b) céramographie révélant l'arrangement et la disposition finale des grains et des pores dans un comprimé [64].

manipulable. Il est à noter que contrairement à beaucoup d'industries, aucun agent liant est ajouté à la poudre pour augmenter la tenue mécanique du comprimé. Seul l'enchevêtrement et les forces entre particules participent à la cohésion du compact ;

- la troisième étape est un frittage. Autrement dit, les comprimés sont traités thermiquement afin de les consolider et de les densifier. La résorption de la porosité du comprimé dépend, entre autres, de la texture de l'empilement granulaire résultant de la mise en forme du compact. On montre sur la Fig. 1.2(b) une céramographie sur laquelle on peut observer la microstructure après frittage

Il faut remarquer que ces différents procédés sont effectués dans des installations fermées et restreintes où les rythmes de production industrielle rendent difficile la caractérisation en détail de tous les phénomènes qui ont lieu à l'échelle des particules.

1.2 La fragmentation des matériaux granulaires

1.2.1 Observations et expériences

De nombreux exemples de la fragmentation de grains existent dans la nature. Un exemple que l'on connaît bien est la dégradation et la fragmentation des roches en zones d'escarpement. Ces matériaux sont typiquement fragiles et des chargements liés à des variations de température ou à l'écoulement de l'eau peuvent conduire à leur rupture de manière subite à des niveaux de déformation très faibles. La résistance à la traction dans ce type de matériaux est faible en comparaison à leur résistance en compression. Bien qu'il soit rare d'observer en situations naturelles des roches soumises à des efforts de traction pure, celles-ci se développent suite à une combinaison de contraintes compressives et cisailantes.



FIGURE 1.3 – Photographies (a) d’une roche calcaire montrant l’évolution progressive d’une fissure [56], et (b) d’un conglomérat basal montrant la fragmentation parallèle de plusieurs de ses gallets [57]. Dans les deux cas, les fissures ont été produites en mode ouverture à cause des contraintes en traction, c’est à dire les ouvertures sont propres sans présence de trituration (broyage par friction) et il y a une absence de déplacements relatifs des fragments.

La Fig. 1.3 présente deux exemples qui montrent des fissures engendrées par des contraintes de traction. L’image (a) montre l’évolution d’une fissure qui se propage de haut en bas dans la roche. Cette fissure n’a pas traversé complètement le bloque rocheux. Pourquoi ? L’ouverture d’une fissure est, en fait, un procédé fortement dissipatif dont l’énergie libérée est proportionnelle aux nouvelles surfaces créées [62]. Dans ce cas, l’énergie disponible par la déformation élastique associée n’est pas suffisante pour que la fissure aille jusqu’au bas de la roche. Le deuxième exemple montre un conglomérat de roches où plusieurs événements de fissuration ont eu lieu avec une orientation privilégiée ($\sim 45^\circ$ sur l’image). Ceci est connu comme un cas de fissuration parallèle. Étant donné que les fissures manifestent une certaine continuité d’une gallet à l’autre, on peut supposer que le conglomérat n’a pas subi de déplacements relatifs de ses grains de sorte qu’il s’est comporté de manière monolithique et les forces de cisaillement sur cet ensemble n’ont pas eu une influence significative sur le mécanisme de fissuration. Des cas similaires de fragmentation de grains et de roches sont également observables au sein des failles tectoniques [132, 34], des surfaces de rupture de glissement de terrains [44, 153], et des réservoirs souterrains fracturés par des charges hydrauliques [78].

La détermination de la résistance à la traction est donc importante pour la compréhension des phénomènes de rupture fragile. Par exemple, face à la difficulté d’effectuer des essais de traction pure sur des noyaux de roches obtenus par carottage, des essais de compression diamétrale aussi connus sous le nom d’*essais brésiliens*, constituent le moyen le plus utilisé pour déterminer la résistance à la traction de manière indirecte. Si la force maximale appliquée sur un noyau de roche avant sa rupture est f_c , la contrainte en tension

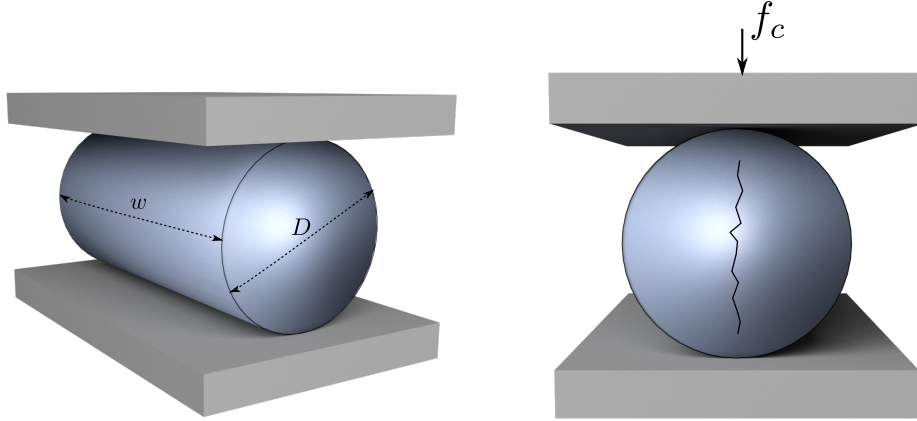


FIGURE 1.4 – Schéma de l'essai brésilien (compression diamétrale) pour déterminer la résistance à la traction de roches.

critique σ_t^c peut être estimée à partir de la relation suivante [74, 89] :

$$\sigma_t^c = \frac{2f_c}{\pi Dw}, \quad (1.1)$$

où D est le diamètre du cylindre et w sa longueur. La contrainte σ_t^c est atteinte au centre du cylindre et son orientation est perpendiculaire à la direction de la charge. On considère dans ce cas que la rupture se développe à partir du centre du noyau et se propage vers les points d'application de la charge ; voir Fig. 1.4. Mais ce n'est pas toujours le cas car des concentrations de contraintes aux points de contact peuvent localement provoquer l'attrition et augmenter l'aire de contact entre le cylindre et la plaque qui exerce la charge, et modifier ainsi la valeur de f_c .

Il faut également remarquer que l'équation 1.1 s'applique pour les matériaux homogènes - élastiques linéaires et pour une géométrie cylindrique. Pour d'autres matériaux où des déformations plastiques importantes ont lieu avant la rupture, cette équation n'est plus valable. Des approches similaires ont été appliquées afin de caractériser la résistance mécanique de grains ou de cailloux d'origine naturelle [37, 70, 88], des grains fabriqués [32, 36, 28, 35, 140], et même sur des grains de sucre [141]. Pour des grains qui présentent des formes variables, il n'est plus possible d'estimer une valeur théorique de résistance à la compression. Néanmoins, pour un chargement diamétral, on peut caractériser la résistance par une mesure σ^c définie par

$$\sigma^c = \frac{f_c}{d^2}, \quad (1.2)$$

avec d le diamètre moyen du grain. Pour les grains qui présentent une forme irrégulière ou allongée, la distribution de contraintes dans son sein peut être très hétérogène et donc la résistance à la compression ne reflète pas uniquement la résistance du matériau à la traction [31].

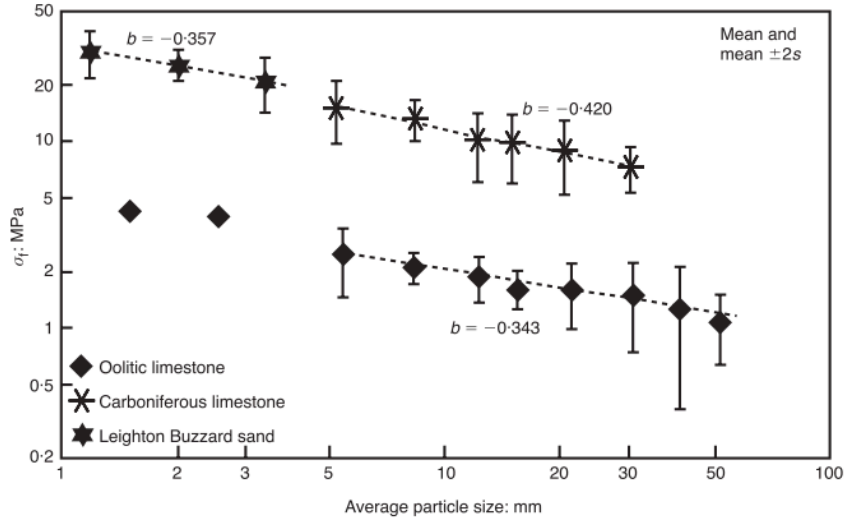


FIGURE 1.5 – La résistance moyenne σ_f des particules de trois matériaux différents en fonction de la taille des particules. ‘ b ’ est l’exposant de la loi de puissance que relie les deux variables [88].

Les expériences ont permis de mettre en évidence une relation entre la résistance individuelle des grains et leur taille. La résistance diminue généralement lorsque la taille du grain augmente. Cette propriété est liée aux nombre, tailles, et distribution spatiale des défauts à l’intérieur des grains. En effet, la probabilité de trouver des défauts plus grands augmente avec la taille des grains, ce qui conduit à une résistance plus faible. Lee a montré qu’une relation en loi de puissance entre la taille des grains et leur résistance à la rupture [88] est capable de capturer ce comportement (voir sur la Fig. 1.5).

McDowell et Bolton [98] ont déterminé la probabilité de survie des grains P_s , définie comme la probabilité qu’un grain ne se fragmente pas, en fonction de la charge appliquée σ et de la taille moyenne du grain d . Cette probabilité est régie par la loi de Weibull :

$$P_s(d) = \exp \left[- \left(\frac{d}{d_0} \right) \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \right], \quad (1.3)$$

où σ_0 et d_0 sont, respectivement, une contrainte et une taille de particule de référence, et l’exposant m est le module de Weibull qui détermine la forme de la distribution de probabilité. Ce coefficient est considéré par quelques auteurs comme un paramètre propre du matériau [96, 46, 114], tandis que d’autres auteurs considèrent qu’il dépend des interactions entre fissures et le type de chargement [4]. Dans tous les cas, il faut garder à l’esprit qu’il s’agit d’une loi empirique et les mécanismes d’évolution et d’interaction entre fissures ne sont pas encore bien compris.

La fragmentation de grains individuels suite à un impact a également été étudiée. Par exemple, Wu et Chau ont exploré la fragmentation de grains sphériques de plâtre en collision avec une plaque rigide [156]. Ces essais ont mis en évidence l’influence de l’énergie

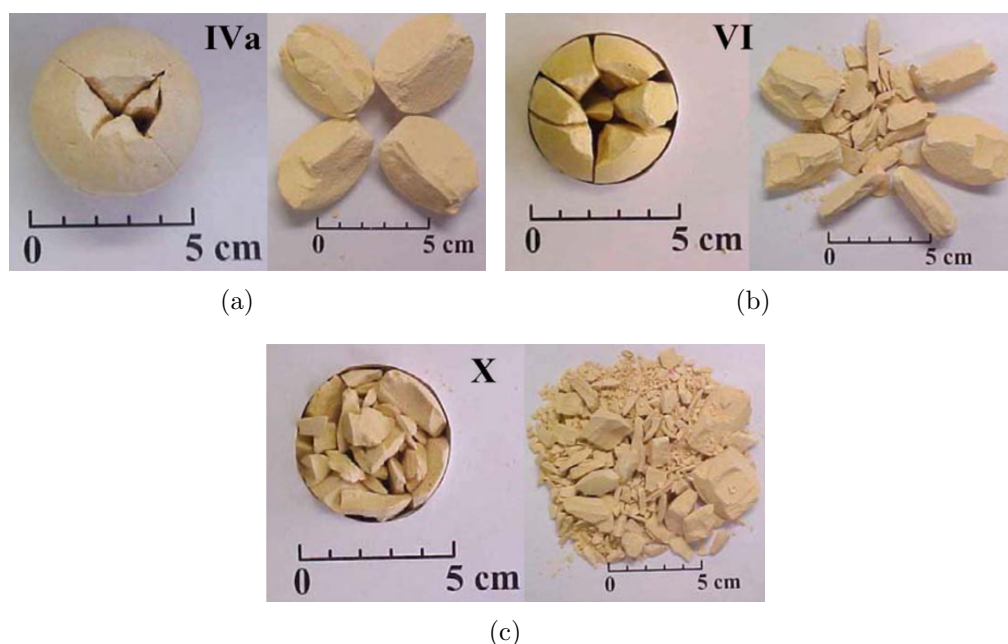


FIGURE 1.6 – Fragmentation de particules sphériques en plâtre sous l'effet d'un choc sur un plan rigide. Suivant l'énergie cinétique au moment de l'impact, différents modes de rupture et nombres de fragments ont été observés [156].

cinétique au moment de l'impact sur la forme et le nombre des fragments produits ; voir quelques exemples sur la Fig. 1.6.

Dans le cas d'assemblages de grains soumis à un chargement, les mécanismes conduisant à la rupture sont clairement plus difficiles à identifier et ils dépendent du réseau de contacts et de la transmission des efforts. Dans ce sens, plusieurs travaux ont été menés pour l'étude de l'évolution de la distribution des tailles des grains et des fragments, des relations charge-densité, ou encore de l'effet du type de chargement comme on verra plus bas.

L'évolution des tailles de grains

Les tailles des grains et des fragments ont été étudiées à travers l'évolution de la courbe granulométrique. Une des premières méthodes pour quantifier le niveau de fragmentation dans un échantillon a été proposée par Hardin [67], en comparant l'aire sous la courbe granulométrique initiale et à certains instants du chargement. Dans cette méthode, on suppose qu'il existe une taille minimale de fragment et que, au-dessous de cette taille, les particules ne participent pas à la réponse mécanique du matériau. Bien que l'évolution des tailles des fragments ne tende pas vers une valeur unique, le choix d'une taille limite permet de calculer une mesure de l'état de l'échantillon par rapport à une courbe granulométrique

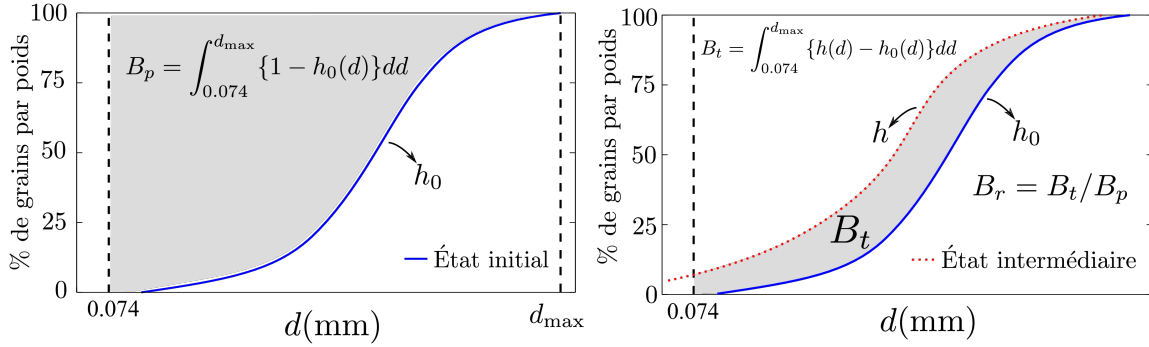


FIGURE 1.7 – Schéma de l'évolution de la courbe granulométrique lors de la fragmentation de grains. La mesure B_r , d'après Hardin [67], est illustrée en fonction des aires sous les courbes granulométriques à différents instants du chargement.

potentielle B_p . Cette mesure est définie par :

$$B_r = \frac{\int_{0.0074}^{d_{max}} \{1 - h_0(d)\} dd}{\int_{0.074}^{d_{max}} \{h(d) - h_0(d)\} dd}, \quad (1.4)$$

où $h_0(d)$ est la granulométrie initiale, on suppose une granulométrie potentielle (définie à partir de la taille de grain égale à 0.074 mm), et $h(d)$ est la granulométrie actuelle. Les diamètres d_{max} et d_{min} sont, respectivement, la taille maximale et minimale des particules dans l'échantillon ; voir Fig. 1.7. On peut remarquer que B_r varie entre 0 et 1, avec $B_r = 0$ pour l'échantillon initial et $B_r = 1$ pour l'état complètement fragmenté. Des modifications à la définition de B_r ont été proposées suite à des observations menées sur des échantillons soumis à de grandes déformations cisailantes où la courbe granulométrique tend vers une distribution de tailles en loi de puissance [53].

Comme on le verra plus bas, des mesures comme B_r ou la probabilité de survie des grains ont été reprises dans différents modèles de comportement pour prendre en compte la fragmentation pendant la déformation du matériau.

La loi de compressibilité

Lors de la compression uniaxiale à déformation latérale nulle (aussi connue comme compression œdométrique) ou la compression isotrope d'un échantillon, la relation entre la charge appliquée et l'évolution du volume de l'assemblage implique normalement deux étapes ou régimes. Le premier régime de densification est induit par les réarrangements des grains alors que le second reflète leur fragmentation. Sur la Fig. 1.8, on peut observer cette différence dans l'évolution du volume pour différents sables sous compression uniaxial. La fraction volumique occupée par les grains, étudiée dans ce cas à partir de l'indice des vides, défini comme le rapport entre le volume des pores et le volume des grains, est montrée en fonction de la charge appliquée P' . On observe que pour des charges inférieures à $\simeq 2$ MPa, la pente des courbes est relativement faible. Donc, la réorganisation des grains

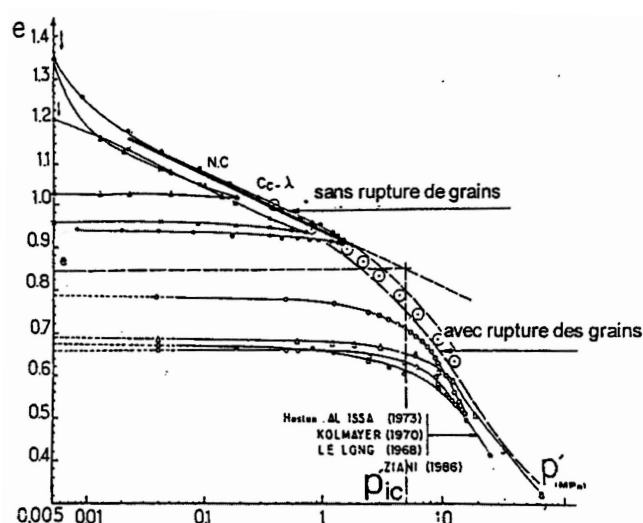


FIGURE 1.8 – Évolution de l'indice de vides en fonction de la charge appliquée dans des essais de compaction uniaxiale pour différents types de sable [22].

et la densification de l'ensemble s'effectue de manière graduelle et par les déplacements relatifs des grains. Lorsque la pression excède 2 MPa, le taux de réduction du volume augmente, traduisant la fragmentation des particules. Les pentes dans chaque régime sont des paramètres caractéristiques d'un matériau granulaire, ainsi que la pression P'_{ic} où la transition entre les deux régimes a lieu.

Au sein des assemblages de grains cassables, il est possible de trouver des hétérogénéités considérables lors de la compaction à cause des taux de fragmentation différentiels (bandes de compaction) [107]. Les variations de densité et de structure granulaire locales peuvent être très importantes. De même, la fraction volumique, la connectivité et la microstructure locale semblent avoir une influence très importante sur la fragmentation d'assemblages de grains.

Effet du type de chargement et absence de dilatance

Le type et le chemin de chargement jouent un rôle très important pour le taux de fragmentation des grains dans un milieu granulaire. Le cisaillement simple ou l'essai triaxial génèrent typiquement plus de ruptures et donc une évolution plus rapide des tailles de grains [63]. Les chargements comme la compaction isotrope ou uniaxial présentent moins d'événements de rupture. Dans ce cas, la densification et l'augmentation du nombre de contacts par particule contraignent cinématiquement les grains, en même temps que les forces supportées par les grains deviennent plus fortes dans toutes les directions.

Dans le cas des essais triaxiaux ou de cisaillement, le comportement dépend aussi de la densité du matériau. Les échantillons denses montrent typiquement une expansion de leur volume lorsqu'ils sont cisailés. Ce phénomène, aussi connu sous le nom de *dilatance*,

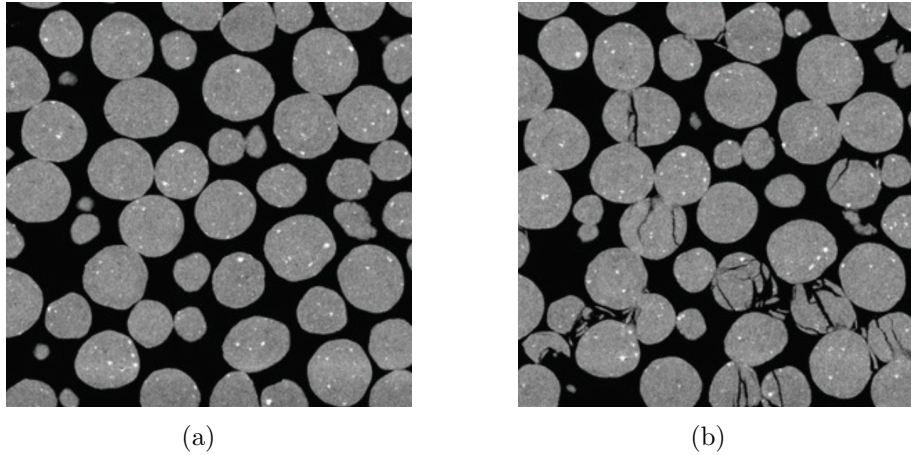


FIGURE 1.9 – Images obtenues à partir de rayons X et reconstruction par microtomographie d'un matériau granulaire [79].

s'explique par le fait que les grains sont obligés de sortir de leur arrangement serré en roulant/glissant les uns sur les autres. Le mécanisme de déformation par glissement est relativement moins facile à cause des fortes contraintes cinématiques. Au contraire, le volume des échantillons lâches tend toujours à diminuer lors du cisaillement. Lorsqu'il s'agit de grains sécables, la déformabilité des matériaux granulaires est fortement modifiée. En fonction de la pression appliquée, la dilatance peut être pratiquement supprimée dans des essais de cisaillement. Dans des essais de compaction, la fraction volumique occupée par les grains et ses fragments peut atteindre des valeurs de l'ordre de 90% [107].

Ces observations macroscopiques ne permettent pas de relier facilement le comportement des particules à la réponse macroscopique d'un ensemble granulaire. Des relations entre les propriétés des grains et leur comportement collectif sont difficiles à trouver dans la littérature. Aujourd'hui, en utilisant des tomographies aux rayons X [5, 79], il est possible de reconstruire la géométrie des grains fragmentés dans un échantillon, ou bien d'identifier des endroits où plus d'événements de fracture de grains se produisent ; voir Fig. 1.9. L'émission acoustique, où la rupture des grains est associée à des émissions sonores particuliers, est une autre technique permettant d'explorer la fragmentation à l'intérieur d'un ensemble de grains [68, 39].

Bien que ces approches expérimentales modernes constituent des méthodes intéressantes dans l'étude de la fragmentation, d'autres approches, en particulier numériques, permettent d'avoir accès aux informations au niveau des grains et leurs contacts.

1.2.2 Modèles analytiques et des milieux continus

Au début du 20^{ème} siècle, les approches classiques de la résistance des matériaux n'arrivaient pas à expliquer la rupture d'objets fragiles. Alors, Griffith propose une théorie selon laquelle la présence de défauts et la propagation de fissures étaient les éléments clés

qui contrôlaient la résistance mécanique de tels matériaux [62]. Cette théorie, connue sous le nom de *mécanique de la rupture*, a été le cadre adéquat pour l'analyse de la propagation des fissures de métaux, polymères, et composites. Pourtant, il faut remarquer qu'elle n'est valide que pour un comportement élastique-linaire parfaitement plastique. Dans le cas d'un système hétérogène ou multi-contacts où la distribution de contraintes à l'intérieur de chaque grain est complexe et impossible à calculer analytiquement, l'applicabilité de la mécanique de la rupture est limitée, ou il est nécessaire d'introduire des paramètres permettant de prendre en compte la microstructure [87, 86]

Si on s'intéresse plutôt au comportement des matériaux granulaires à l'échelle macroscopique, on peut négliger leur nature discrète ainsi que les hétérogénéités locales et l'influence des fissures. On se concentre alors sur les relations moyennes entre les contraintes et les déformations du milieu. Ces lois constitutives permettent d'établir des modèles de comportement phénoménologiques comme, par exemple, le modèle de Mohr-Coulomb pour les sols granulaires, le modèle Hoek-Brown pour les roches, et le modèle Cam Clay pour les argiles. Néanmoins, la fragmentation des matériaux granulaires est un phénomène assez particulier dans la mesure où la composition du milieu évolue. On peut trouver des approches continues qui considèrent dans leur formulation l'évolution de la courbe granulométrique [53, 54, 33], l'endommagement des particules [66, 72], la dilatance [151, 152], la dégradation du module d'élasticité en fonction de la texture [43], et des approches basées sur la conservation de l'énergie à partir de l'échelle des particules [65]. Bien que ces modèles constituent des avancées importantes pour rationaliser la réponse mécanique des milieux granulaires sécables, ils ne prennent pas nécessairement en compte le processus de fragmentation qui implique un désordre local et une évolution de la texture. C'est le domaine où la simulation numérique discrète peut jouer un rôle important pour nous permettre de mieux caractériser la fragmentation à ces échelles.

1.2.3 Modèles numériques discrets

Dans le cadre de la simulation par la méthode des éléments discrets, on s'intéresse aux mouvements des grains et à leurs interactions. La prise en compte de la fragmentation des grains dans les modèles DEM a été effectuée initialement en 2D par Kun et Herrmann [83] et Tsoungui et al. [145] dans les années 90. En 3D, les modèles de fragmentation sont plus récents et en développement rapide. D'une manière très générale, il est possible de classer les modèles de fragmentation en deux groupes : 1) Des méthodes de remplacement de grains et 2) des méthodes de grains collés ou liés.

Dans le premier groupe, le but est de simuler la fragmentation en remplaçant des grains par un groupe de sous-grains de tailles plus petites [7, 145, 27, 146, 93, 55, 45, 38]. Ce remplacement est effectué une fois qu'un ensemble de critères sont atteints. Dans la littérature, les critères de rupture sont assez variés et peuvent être basés, par exemple, sur la valeur de la pression moyenne sur chaque grain, sur la valeur maximale des forces de contact, ou même sur le nombre de contacts par grain. De même, la façon de remplacer des grains par leur fragments est variable. Par exemple, les sous-grains peuvent être placés de telle

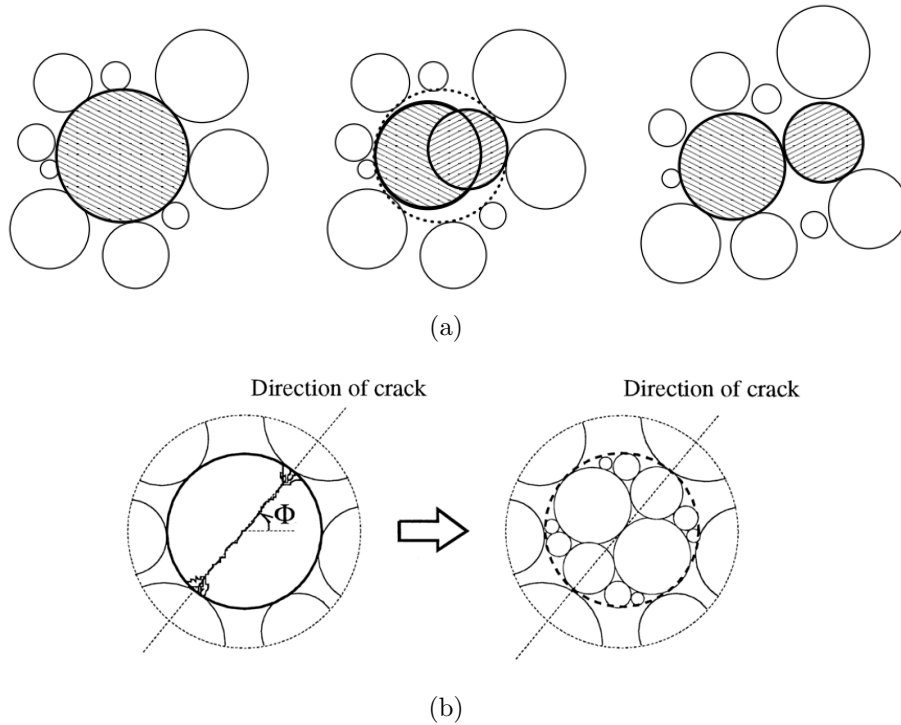


FIGURE 1.10 – Exemples des méthodes de fragmentation en remplaçant le grain originel par (a) par un couple de grains qui conservent le volume du grain mais qui sont obligés de se chevaucher créant des pressions locales artificielles et poussant les grains voisins [27] et (b) par un certain nombre de sous-grains plus petits [145].

sorte qu'ils se trouvent superposés. Cette configuration produit pourtant des contraintes locales artificielles qui modifient localement l'organisation et la transmission des efforts entre grains; voir Fig. 1.10(a). Une autre façon d'effectuer le remplacement consiste à substituer le grain originel par des petits grains qui se touchent à peine entre eux. Dans ce cas, il y a une perte de masse car la somme des volumes des sous-grains ne correspond pas à celui du grain originel; voir Fig. 1.10(b). Malgré ces limitations, des avancées importantes ont été faites avec ces modèles concernant l'évolution du nombre et taille de fragments, la compressibilité d'assemblages de grains, et l'évolution de la porosité locale. Des applications précises ont été aussi étudiées telles que le battage de pieux dans un terrain granulaire [146], la dégradation du ballast sur les chemins de fer [92], ou la fragmentation dans des tambours tournants [27].

Dans le deuxième groupe de méthodes de fragmentation, les grains sont modélisés comme des agglomérats de fragments potentiels liés par des contraintes mécaniques ou cinématiques [82, 116, 155, 48, 104, 101]. Ces liaisons peuvent se perdre en fonction des sollicitations externes sur les agglomérats. Sur la Fig. 1.11 nous montrons quelques exemples de l'usage de cette méthode en 2D et 3D respectivement. Bien que cette technique de fragmentation soit probablement la plus utilisée aujourd'hui, l'effet de la distribution des tailles

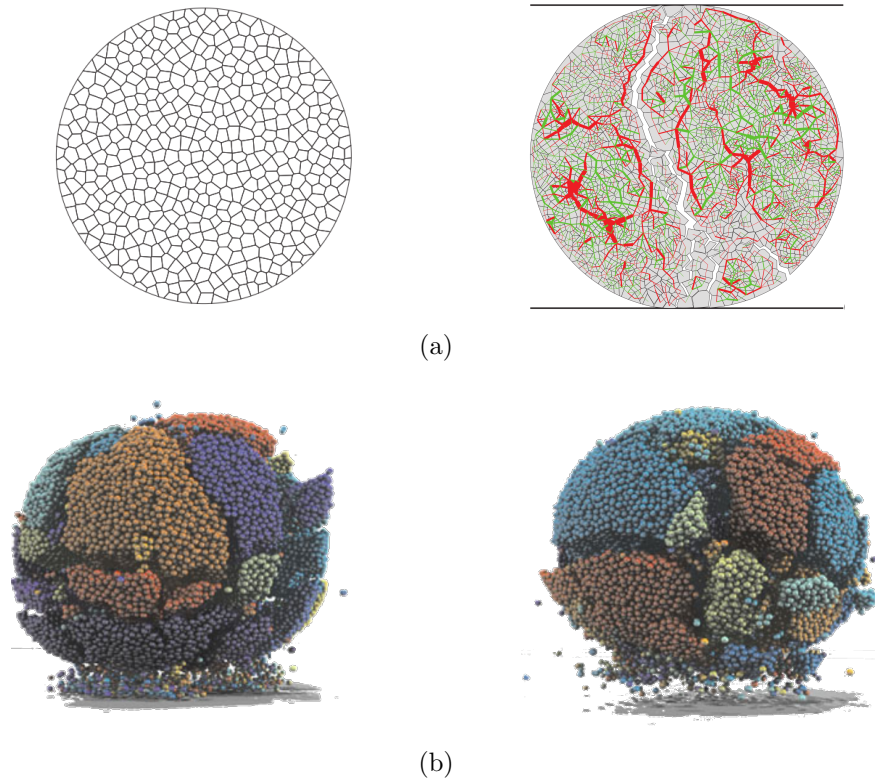


FIGURE 1.11 – Exemples des méthodes de fragments potentiels collés en (a) 2D où les sous-particules sont de forme polygonal [104] et en (b) 3D où les grains sont construits à partir de sphères liées par des éléments de type poutre [155].

et des formes de fragments reste encore à explorer. Ceci s'explique, en partie, par le fait que la simulation de géométries de grains polyédriques de tailles variables demande de lourdes ressources numériques, et que les analyses associées sont complexes. En conséquence, les modèles à sphères collées sont les plus employés dans la simulation de grains sécables.

On peut encore citer d'autres méthodes telles que les modèles de matériaux fragiles représentés par des objets simples qui interagissent à travers des éléments de type poutre [160, 69], ou des modèles de zones cohésives où des interfaces entre objets se rompent progressivement à travers des fissures pré-existantes [17, 112]. L'implantation de ces modèles en 3D est rare et rapidement limitée à cause des orientations complexes des fissures à l'intérieur d'un grain.

Une idée générale qui ressort des travaux est que, au moins d'un point de vue macroscopique, l'élément clé est *juste* de diviser des particules en petits morceaux, quel que soit le mode de fragmentation ou la forme des fragments. Par cette méthode, il a été possible de reproduire l'évolution de la distribution des tailles des particules, et même de retrouver la dépendance de la résistance par rapport à la taille de grains et fragments. À l'échelle microscopique, les choses sont moins claires étant donnée la richesse (pour ne pas dire complexité) que représente la texture granulaire et la transmission des efforts en fonction

des tailles et des formes de fragments.

1.3 La variabilité des forme et des tailles de grains

À l'issue de la fragmentation, la variabilité des formes et des tailles de fragments peut être très importante. Ces sources de variabilité géométrique des particules sont assez intéressantes du point de vue de la rhéologie des matériaux granulaires. Dans la suite, nous allons montrer quelques exemples concernant la caractérisation des formes et des tailles de grains et leurs effets sur la réponse mécanique d'assemblages de particules.

1.3.1 Observations et expériences

La diversité des formes et des tailles de grains dans la nature et l'industrie est due à de nombreux mécanismes tels que l'érosion, les impacts, et la fragmentation. Sur la Fig. 1.12 on voit deux exemples de matériaux granulaires ayant une forte variabilité de forme et de taille suite à la dégradation et à la fracturation progressive d'une formation rocheuse. Dans le premier cas, les constituants les plus faibles de la roche mère se séparent et se dégradent plus rapidement de l'agglomérat. Les particules les plus petites peuvent avoir une taille de l'ordre des dizaines de micromètres lorsque la roche a une taille de l'ordre du mètre. Toutes les tailles intermédiaires sont présentes et restent en interaction dans cette formation géologique. Sur la deuxième image, nous observons des grains angulaires et aplatis qui résultent du gonflement et retrait d'un roche sédimentaire constitué de couches fines intercalées entre des interfaces plus faibles. Dans ce cas, la taille des grains est bornée par l'épaisseur des couches.

La géométrie des fragments peut être classée, au premier ordre, suivant trois paramètres : 1) l'angularité, 2) la sphéricité, et 3) le rapport d'aspect. L'angularité α peut être mesurée à partir du nombre approximatif de faces d'un grain ou l'angle moyen entre les faces. La sphéricité Ψ est le rapport qui permet de comparer comment la géométrie d'un objet se rapproche de celle d'une sphère. La sphéricité, selon Wadell [150], peut être calculée comme $\Psi = \{\pi^{1/3}(6V_p)^{2/3}\}/A_p$, où V_p est le volume de la particule et A_p est l'aire surfacique. Ψ peut varier alors entre 0 et 1, avec $\Psi \simeq 0$ pour une forme très irrégulière et $\Psi = 1$ pour la sphère. La Fig. 1.13 montre un diagramme dans lequel on observe des grains classés par rapport à ces deux variables. Le rapport d'aspect d'un grain en 3D peut être caractérisé, par exemple, à partir des 3 dimensions de la boîte la plus petite qui peut le contenir.

Typiquement, des grains très angulaires sont le résultat de la fragmentation, des impacts ou de l'abrasion. Des grains qui ont été transportés par l'eau ou le vent présentent des formes plutôt arrondies à cause de l'attrition des bords. Indépendamment de l'origine du grain, le rapport d'aspect peut être très variable. Une quatrième variable que l'on pourrait ajouter est le degré de non-convexité des grains, c'est à dire une mesure des cavités à la surface du grain. La non-convexité est pourtant difficile à caractériser car elle dépend de

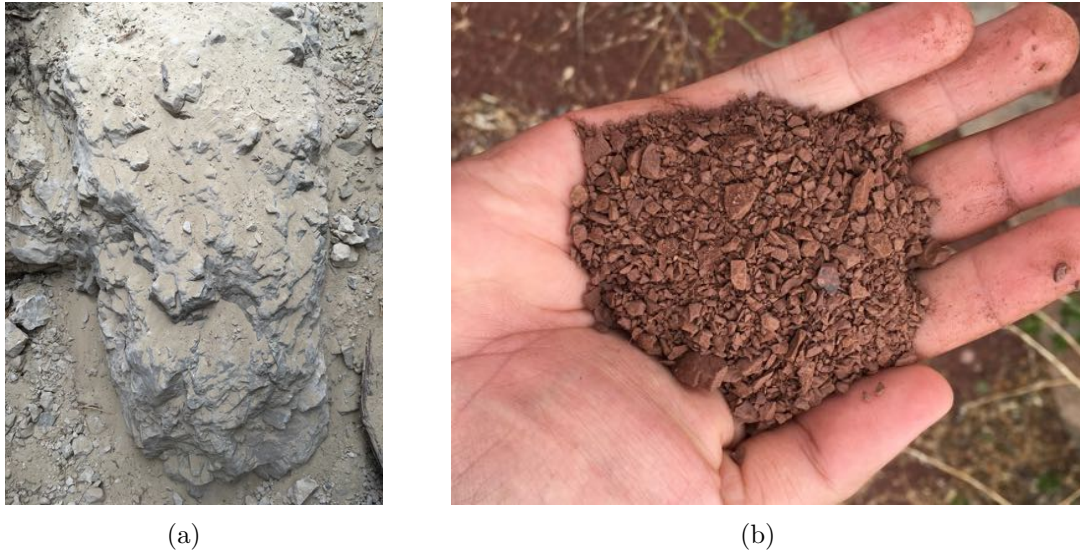


FIGURE 1.12 – Exemples de variabilité des tailles et des formes de grains dans la nature. La Fig. (a) montre la dégradation des composants les plus faibles d’une roche sédimentaire (dissolution de la calcite). On peut trouver donc des interactions entre roches dont la taille excède les dizaines de centimètres et des particules très fines (limons et argiles). La Fig. (b) montre des grains de forme plus angulaire dont la formation est liée à la décomposition de roches sédimentaires en couches fines due au gonflement et au retrait du matériau.

l’échelle à laquelle on caractérise la surface des grains.

D’une manière générale, la forme des grains modifie substantiellement la résistance au cisaillement des matériaux granulaires, le module d’élasticité équivalent, la densité, et les propriétés de l’assemblage de grains [154, 91, 71].

En ce qui concerne la distribution de tailles des grains (ou la granulométrie), sa caractérisation est typiquement réalisée à travers un tamisage du matériau granulaire. Comme on l’a mentionné précédemment, la méthode usuelle pour représenter une granulométrie se fait au travers du pourcentage de matériau en poids qui est retenu sur un tamis dont l’ouverture de la grille est connue ; voir un exemple sur la Fig. 1.14(a). À partir de la granulométrie, on peut définir quelques paramètres basés sur sa courbature ou le rapport entre des poids retenus à certaines tailles de grains. Dans le cas des matériaux dont la taille des grains est plus fine, le tamisage n’est plus adapté à cause de la possible agglomération de particules induite par les forces de van der Waals, capillaires, etc. Dans ces cas, des techniques utilisant la sédimentation sont préférées afin d’établir une distribution de tailles de particules [16]. Bien que ces approches sont largement utilisées, elles restent assez variables et dépendantes des outils ou des procédés mis en œuvre.

Le remplissage de l’espace en fonction de la distribution des tailles de grains a été un sujet de grand intérêt dans plusieurs domaines de l’ingénierie et l’industrie. Les mélanges des grains de tailles variables ont été largement étudiés dans le domaine de la fabrication

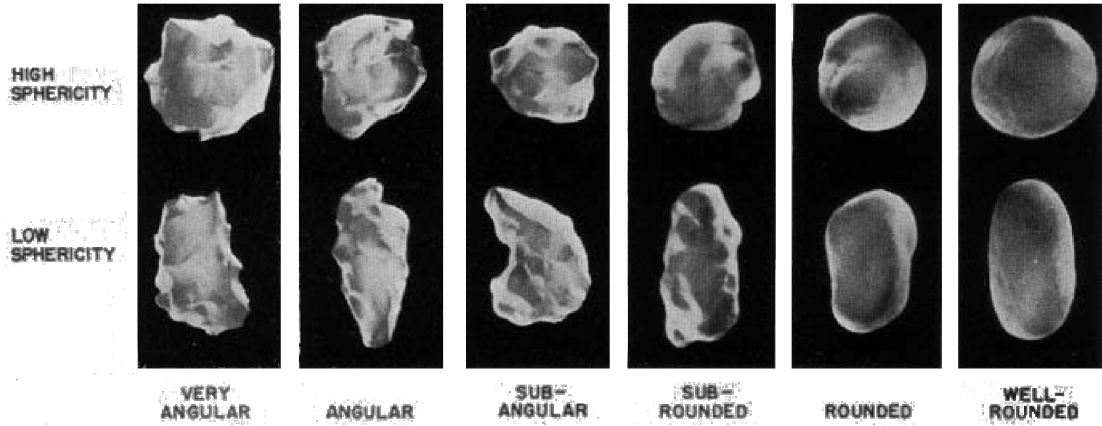


FIGURE 1.13 – Classification des grains en fonction de leur degré d’angularité ou de sphéricité [117].

du béton par exemple [26, 47]. La performance de ce matériau est, en grande partie, une fonction de l’assemblage et de l’interaction des granulats, du sable, et de la poudre de ciment. À ce sujet, une des premières études a été menée par Fuller et Thompson [61] en cherchant la distribution de tailles de grains qui génère l’ensemble le plus dense. Ces auteurs ont trouvé que l’échantillon le plus dense peut être obtenu à partir d’une distribution de tailles de particules qui obéit à une loi de puissance de la forme $P(d) = (d/d_{\max})^\beta$, où $P(d)$ est la proportion de grains de taille d , le diamètre maximale dans l’échantillon est $d_{\max}$ et l’exposant $\beta \simeq 0.5$. Cette distribution est montrée d’une manière schématique sur la Fig. 1.14(b). Plusieurs approches analytiques ou approximatives ont été introduites par la suite pour prédire la densité d’échantillons granulaires composés d’une ou de plusieurs tailles de particules tant en 2D qu’en 3D [142, 21, 97, 111, 157, 158, 20].

1.3.2 Effet de la forme et des tailles des grains

Nous présentons ici quelques exemples de résultats de simulations numériques sur l’effet de la forme et de la distribution de tailles de grains sur la texture et la résistance mécanique.

L’angularité

Plusieurs études ont montré que l’angularité des particules a une influence significative sur le comportement des matériaux granulaires. Mais ce n’est que très récemment que des études numériques systématiques ont été menées en 2D avec des polygones réguliers [8], voir Fig. 1.15. En 3D cette analyse s’est effectuée de manière similaire avec des polyèdres irréguliers [13]; voir Fig. 1.16. L’angularité d’une particule peut être définie comme la moyenne des angles extérieurs entre deux faces qui se touchent. En 2D, cette définition est équivalente à $\alpha = 2\pi/n_s$, avec n_s le nombre de cotés. Ces études ont montré que la résistance au cisaillement augmente avec l’angularité mais sature lorsque les particules

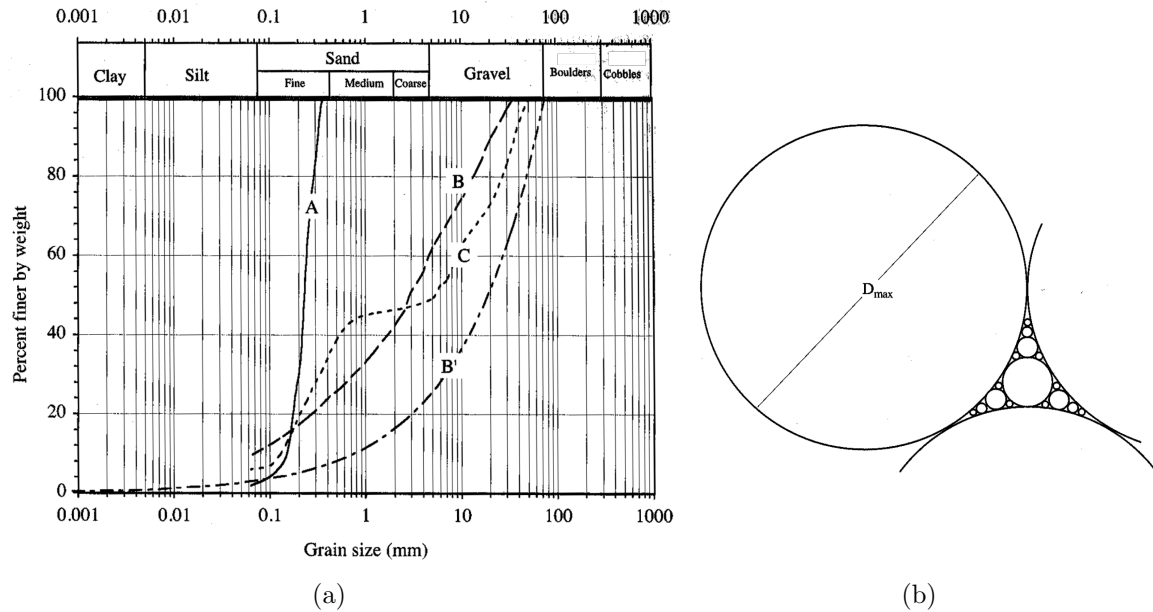


FIGURE 1.14 – (a) La courbe granulométrique typique pour 3 types de sables différents (courbes A, B et C). La courbe dénotée comme B' montre une distribution de tailles de grains pour un assemblage de type Fuller pour lequel un schéma est présenté (b) [16].

deviennent très anguleuses. Au contraire, la compacité diminue mais sature aussi à des niveaux plus bas au fur et à mesure que l'angularité augmente. Les origines de la variation de la résistance au cisaillement avec l'angularité se trouvent à l'échelle de la microstructure. En particulier, le plateau de résistance s'explique par une diminution de l'anisotropie géométrique (augmentation du nombre de contacts) compensée par une forte mobilisation du frottement par les contacts faces-faces. En ce sens, les contacts faces-faces contribuent à bloquer les rotations et le glissement domine la déformation [59]. Nous n'entrons pas plus dans les détails de la microstructure granulaire ici car elle sera discutée plus précisément au chapitre suivant.

L'allongement et l'aplatissement

L'effet de l'allongement des particules a été très étudié, en particulier pour les propriétés de remplissage et de mise en ordre ; voir Fig. 1.17, [49, 50, 3, 84, 129]. Un résultat important est que la compacité augmente avec l'allongement, mais au-delà d'un certain rapport d'aspect, elle diminue jusqu'à des valeurs pouvant être bien inférieures à l'empilement le plus dense de disques ou de sphères. Un comportement similaire a été récemment observé avec des particules de plus en plus aplaties [24]. Au contraire, des études systématiques ont récemment établi que la résistance au cisaillement augmente avec l'allongement ou l'aplatissement des grains [10, 24]. À l'échelle microscopique, les particules les plus allongées ont tendance à s'aligner perpendiculairement par rapport à la direction principale majeure des

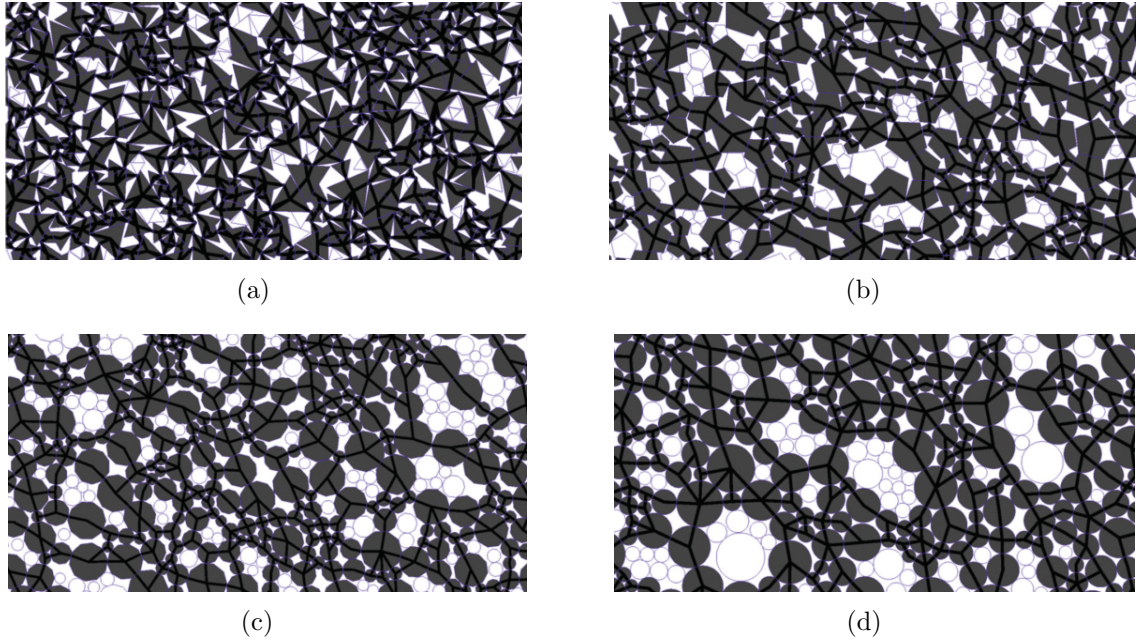


FIGURE 1.15 – Étude numérique de l'effet de l'angularité de particules en 2D en utilisant des (a) triangles, (b) pentagones, (c) dodécagones, et (d) disques. Les lignes noires présentent les chaînes de forces, et les particules en blanc ne participent pas à la transmission des efforts[8].

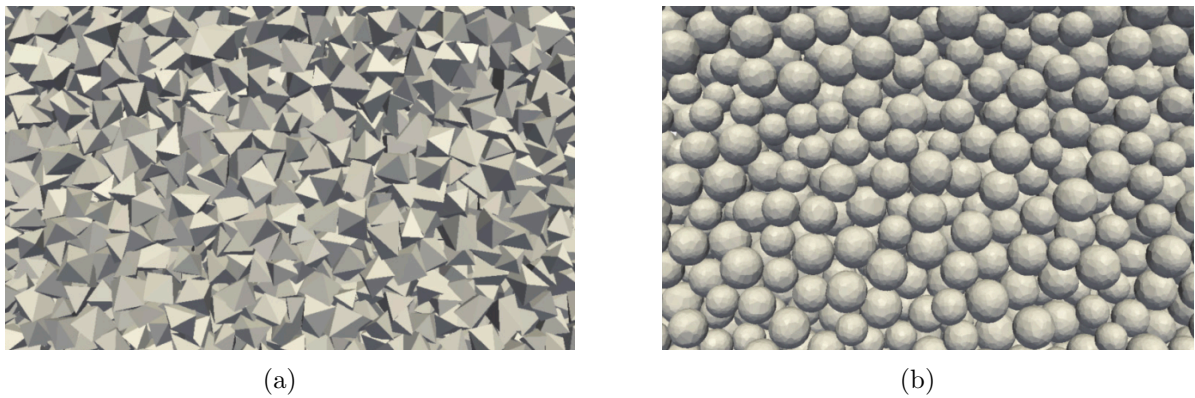


FIGURE 1.16 – Exemples d'échantillons composés de grains polyédriques où le nombre de faces varie entre (a) 8 faces, et (b) 596 faces [13].

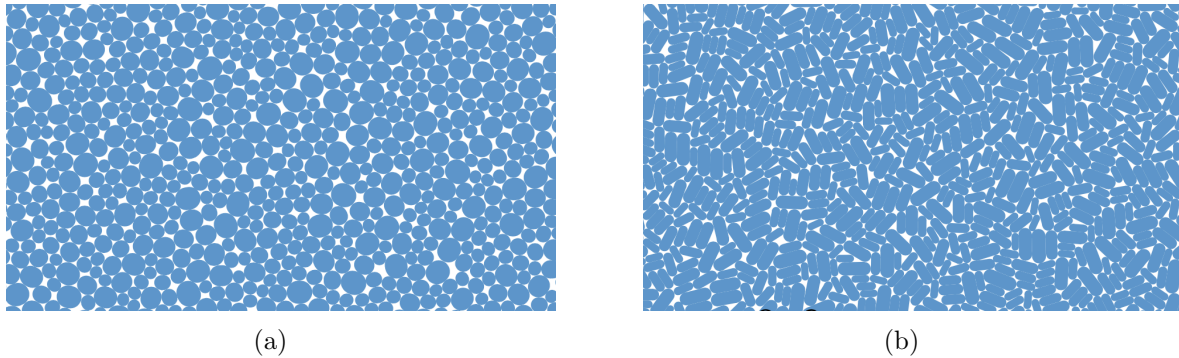


FIGURE 1.17 – Exemples d'échantillons en 2D composés de grains de plus en plus allongés en partant de (a) disques, jusqu'à (b) des grains avec un rapport d'aspect où la longueur équivaut à deux fois la largeur [11].

contraintes créant des colonnes rigides fortement mobilisées en frottement n'existant pas ou peu aux faibles valeurs d'élongation.

La non-convexité

De manière générale, un grain non convexe est un grain dont au moins un segment joignant deux de ses points quelconques est exclue de la portion d'espace qu'il délimite. En d'autres termes, la surface comporte des *creux* ou des cavités. Un assemblage de grains non-convexes est généralement moins fluide que celui de grains convexes. Ils peuvent même former, suivant les cas, un angle de repos naturel de presque 90° . Les grains naturels présentent souvent un certain *degré* de non-convexité leur conférant de meilleures qualités de résistance. L'effet de la non-convexité des particules sur le comportement reste encore à ce jour peu étudié, d'une part à cause de la grande quantité de formes non-convexes représentables, mais aussi en raison des restrictions numériques puisqu'un grain non convexe est construit numériquement comme un cluster de grains convexes. Numériquement, la manière la plus simple consiste à construire des clusters de plusieurs disques ou sphères formant ainsi des agglomérats tétraédriques [130, 131, 12, 95] ; voir Fig. 1.18. Une observation générale est que la résistance augmente au fur et à mesure que le degré de non-convexité augmente, alors que la compacité varie de manière non-monotone avec la forme.

La distribution des tailles de grains

La simulation d'échantillons ayant une distribution des tailles de grains variable rencontre principalement deux défis : 1) la dispersion de tailles de grains est bornée par le nombre de particules qui peuvent être simulées sans perdre la représentativité statistique de chaque classe de grain et 2) de tels systèmes sont très exigeants en termes de détection et de résolution des interactions, ce qui explique aussi pourquoi le nombre d'études numériques sur le sujet est encore rare spécifiquement en 3D.

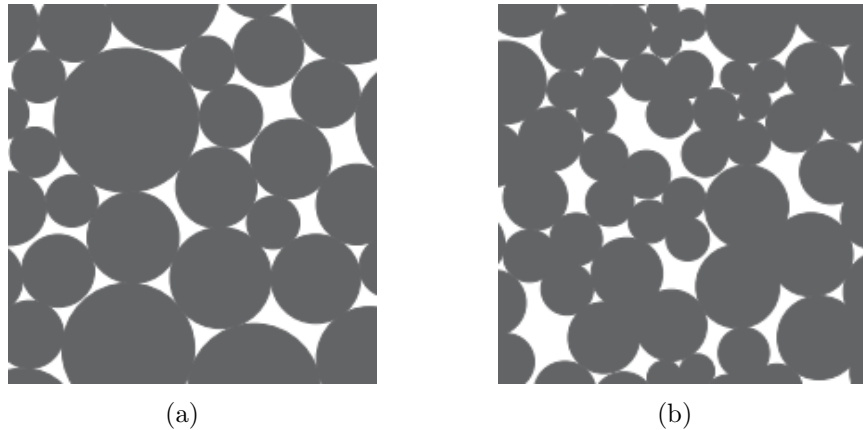


FIGURE 1.18 – Étude numérique qui analyse des échantillons composés de grains non-convexes. Ces grains ont été construits à partir d'agrégats de 3 sous-particules de plus en plus séparées [130].

Cependant, à travers des simulations discrètes bi-dimensionnelles, Voivret et al. [148] ont très récemment montré que la résistance au cisaillement est indépendante de l'étalement granulométrique, typiquement caractérisé par le paramètre $S = (d_{\max} - d_{\min}) / (d_{\max} + d_{\min})$, où $d_{\min}$ et $d_{\max}$ sont les diamètres minimale et maximale respectivement, pour des empilements de disques avec une distribution uniforme par volume ; voir Fig. 1.19. Ces résultats ont été généralisés au cas de polygones irréguliers [105], ainsi qu'à d'autres formes de distributions granulométriques [58, 9] ; voir Fig. 1.20. De plus, ces mêmes auteurs s'accordent à montrer que la compacité augmente avec l'étalement, mais mettent en évidence que des systèmes de plus en plus denses présentent un frottement macroscopique identique dans l'état d'écoulement stationnaire.

Conclusion

La matière en grains, avec sa complexité en formes, tailles et propriétés physiques et mécaniques des particules, a été utilisée depuis l'aube de l'humanité sans que les mécanismes fondamentaux qui interviennent dans son comportement soient bien compris. Cette matière intervient, dans le cadre de cette étude, dans la fabrication du combustible nucléaire où deux phénomènes très distinctifs d'un matériau granulaire se rencontrent : la fragmentation et les réarrangements des particules. Les comprimés de dioxyde d'uranium sont fabriqués par un procédé de compaction mécanique et, en raison de l'évolution de la texture et de la fragmentation des particules à diverses échelles, leur tenue mécanique évolue. Les mécanismes qui contrôlent ce processus à l'échelle des particules sont à ce jour très mal connus.

Afin de mieux comprendre la fragmentation des matériaux granulaires, nous avons présenté plusieurs observations et expériences dans différents domaines de recherche. Ceci nous

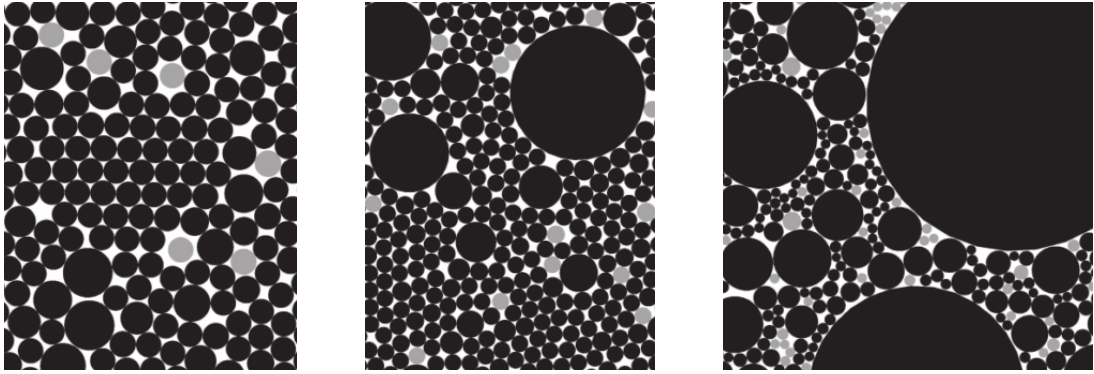


FIGURE 1.19 – Exemples d'échantillons composés de grains circulaires dont la dispersion de tailles de particules varie entre une distribution monodisperse et des distributions de plus en plus étalées qui obéissent en même temps une loi de puissance. Les particules en gris ne participent pas au réseau de contacts [58].

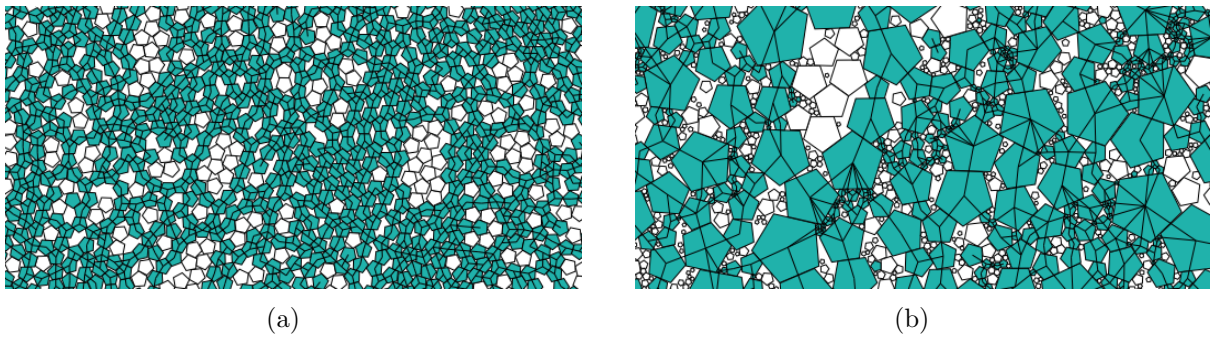


FIGURE 1.20 – Exemples de simulations numériques où la dispersion en tailles et en formes des grains ont été étudiées simultanément [105].

a permis d'établir un bilan des approches et des méthodes mises au point et montrer que de nombreux paramètres, souvent mal contrôlés, interviennent dans les processus mettant en jeu la fragmentation des grains. Les modélisations analytique et numérique ont eu une portée significative dans l'étude de la fragmentation. En particulier, la simulation par éléments discrets 2D et 3D ont permis d'explorer le comportement de grains individuels ainsi que d'assemblages de grains. Néanmoins, les liens entre les méthodes de fragmentation de grains, la texture de l'assemblage, et le comportement macroscopique d'un échantillon représentatif 3D restent peu explorés.

Les travaux de cette thèse sont centrés sur la modélisation numérique discrète de la compaction des matériaux granulaires à particules sécables. L'utilisation d'une approche décrite dans le prochain chapitre nous permettra de remédier à certaines insuffisances des méthodes utilisées précédemment pour la prise en compte de la fragmentation. Nous nous intéressons aussi bien à l'échelle des particules qu'à l'échelle macroscopique et nous

appliquerons une analyse statistique des particules et de la texture granulaire dans le but de mieux comprendre le comportement macroscopique qui en résulte.

“And from my pillow, looking forth by light
Of moon or favouring stars, I could behold
The antechapel where the statue stood
Of Newton with his prism and silent face,
The marble index of a mind for ever
Voyaging through strange seas of Thought, alone.”

W. Wordsworth

Chapitre 2

Modélisation discrète et analyse microstructurale

DANS ce chapitre, nous allons brièvement présenter la méthode de Dynamique des Contacts que nous avons utilisée pour les simulations numériques de cette thèse. Cette méthode fait partie de la famille des *Méthode aux Eléments Discrets* (DEM pour “Discrete Element Method” en anglais) dont le principe est de résoudre les équations du mouvement de chaque particule, décrite comme un objet rigide, tout en prenant en compte les conditions aux limites et les interactions de contact entre particules. Dans une seconde partie, nous introduirons quelques concepts généraux sur la physique et la mécanique des milieux granulaires, ainsi que les outils d’analyse, tant au niveau comportement macroscopique qu’au niveau des particules.

Sommaire

2.1	Modélisation numérique par éléments discrets	33
2.1.1	La dynamique moléculaire	33
2.1.2	Dynamique des Contacts	34
2.1.3	Remarques sur le choix de la méthode numérique	40
2.1.4	Remarques sur la simulation de grains polyédriques	40
2.2	Microstructure d’un matériau granulaire	42
2.2.1	La texture	42
2.2.2	Les chaînes de forces	45
	Conclusion	49

2.1 Modélisation numérique par éléments discrets

Les méthodes numériques en éléments discrets répondent au besoin d'étudier le comportement d'ensembles de particules à partir de leurs mouvements et de leurs interactions. Cundall et Strack, en 1979, ont proposé la DEM qui peut être décrite comme une adaptation de la *Dynamique Moléculaire* (MD) aux matériaux formés de particules solides [42]. Dans cette approche les équations de la dynamique sont intégrées tout en considérant des interactions de contact exprimées sous la forme d'une relation force-déplacement. En s'appuyant par exemple sur l'approximation de Hertz, la déformation au contact, qui correspond physiquement à une déflexion élastique, est considérée numériquement comme une faible interpénétration. Ainsi, l'avantage de cette méthode est de tenir compte du comportement à l'échelle locale. Cela introduit malheureusement une échelle de description qui n'est pas forcément nécessaire et surtout très coûteuse en temps de calcul.

Quelques années plus tard, Moreau et Jean [76, 77, 75] ont proposé une méthode alternative, nommée la *Dynamique des Contacts* (CD), afin de traiter les contacts entre corps parfaitement rigides sans régulariser la condition d'impénétrabilité des corps. Cette méthode, fondée sur un schéma temporel implicite, est particulièrement bien adaptée à l'étude des matériaux granulaires composés de particules de formes variées.

2.1.1 La dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire (DM) est une approche dite *régulière* ou "smooth". Dans les approches régulières, les interactions sont décrites de manière explicite. En d'autres termes, il existe une loi qui relie la force de contact à une variable de déformation de contact définie à partir des positions des particules. Le mouvement des particules est alors deux fois différentiable et, par conséquent, les équations de la dynamique s'écrivent sous la forme d'équations différentielles ordinaires qui peuvent être intégrées par des méthodes classiques.

Dans cette méthode, les particules sont autorisées à s'interpénétrer d'une distance δ qui représente la déflexion au contact. La force de contact normale f_n entre deux particules en contact est alors définie comme la somme des deux contributions suivantes : 1) Une force élastique linéaire $f_n^e = k_n \delta$, où k_n représente la raideur du contact. Cette force est nulle si le contact est ouvert ; 2) Une force de dissipation visqueuse $f_n^v = \alpha_n \dot{\delta}$, où α_n est un coefficient d'amortissement visqueux. Cette force rend compte du caractère inélastique du contact. Ce coefficient d'amortissement visqueux peut être relié au coefficient de restitution normale e par la relation $\alpha_n = 2\beta\sqrt{mk_n}$, avec $\beta = -\ln e / \{\pi^2 + \ln^2(e)\}^{0.5}$.

La force tangentielle f_t , quant à elle, est reliée au déplacement tangentiel par une loi élastique linéaire et un coefficient d'amortissement dans la limite imposée par la loi de frottement de Coulomb $f_t = \mu f_n$ où μ est le coefficient de frottement.

En raison du caractère harmonique des interactions, pour assurer la stabilité numérique, le pas de temps δt doit être inférieur au temps caractéristique de collision $\delta \ll \sqrt{m/(2k_n)}$. De même, la limite des grains rigides impose $k_n \gg Pd^{D-2}$, où P est la pression extérieure appliquée au système et d est le diamètre moyen d'une particule, et D la dimension.

2.1.2 Dynamique des Contacts

La méthode de Dynamique des Contacts (CD) a été développée dans le cadre de la mécanique *non régulière*. Les particules sont considérées comme parfaitement rigides et les interactions sont régies par des lois de contacts non régulières. Dans ce cadre, les vitesses des particules et les forces de contact sont représentées comme des sauts entre deux états et les équations qui décrivent les mouvements ne sont plus dérivables. Ainsi, entre le début et la fin d'un pas de temps, les vitesses linéaires et angulaires des particules peuvent subir un saut $\Delta \mathbf{V}$. On considère donc la version intégrée de l'équation de la dynamique :

$$\int_t^{t+\Delta t} \mathbf{F} dt = \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{M} \frac{d\mathbf{V}}{dt} dt. \quad (2.1)$$

Cette équation représente la conservation de la quantité de mouvement dans laquelle on peut remplacer la variation de la vitesse $d\mathbf{V}$ par une variation finie $\Delta \mathbf{V}$ de la vitesse sur l'intervalle $]t, t + \Delta t]$. Autrement dit, $\Delta \mathbf{V} = \mathbf{V}^+ - \mathbf{V}^-$ où $\mathbf{V}^-$ et $\mathbf{V}^+$ sont respectivement les vitesses au début et à la fin du pas de temps. L'équation 2.1 peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$\mathbf{R} = \mathbf{M} \Delta \mathbf{V}, \quad (2.2)$$

où $\mathbf{R}$ correspond à l'ensemble des impulsions linéaires et angulaires moyennes au cours du pas de temps.

Considérons maintenant le repère local entre deux particules i et j en collision frontale ; voir Fig. 2.1. Ce repère est défini par le vecteur normal unitaire $\mathbf{n}$ au point de contact α orienté du grain j vers le grain i . Le vecteur tangentiel $\mathbf{t}$ associé, qu'on considère connu pour cette explication appartient au plan orthonormal correspondant. On peut projeter les vitesses des particules $\mathbf{V}$ sur le repère de contact comme suit :

$$\mathbf{u} = \mathbf{H} \mathbf{V}, \quad (2.3)$$

où $\mathbf{u}$ est le vecteur qui contient les vitesses relatives normales u_n et tangentielles u_t , et $\mathbf{H}$ est une matrice de projection qui encode la géométrie des particules et de leurs contacts [29].

En 3D, le vecteur normal $\mathbf{n}$ a une orientation qui peut être caractérisée par l'angle $\Omega(\theta, \phi)$ où θ est l'angle entre la projection de $\mathbf{n}$ sur le plan xy et ϕ est l'angle azimutal correspondant. De la même façon, l'orientation du vecteur $\mathbf{t}$ peut être repérée par les angles

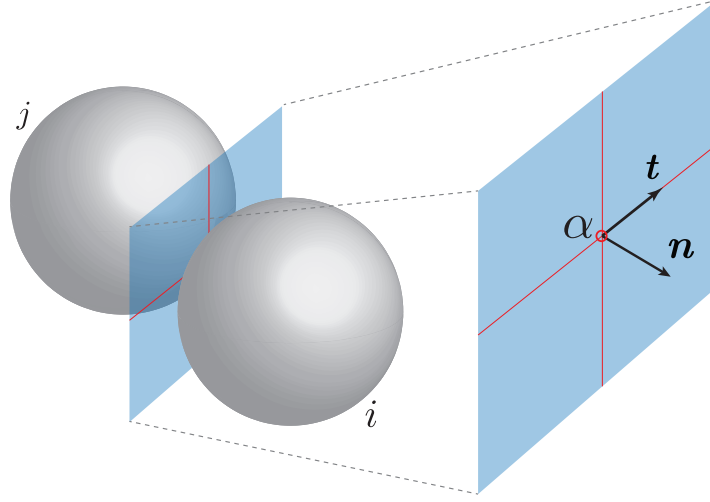


FIGURE 2.1 – Deux grains en collision imminente et le repère local défini au point de contact potentiel.

$\Omega^*(\theta^*, \phi^*)$. Les composants des vecteurs unitaires normal et tangential peuvent s'exprimer alors comme suit :

$$\mathbf{n} = \begin{Bmatrix} \cos \phi \cos \theta \\ \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{t} = \begin{Bmatrix} \cos \phi^* \cos \theta^* \\ \cos \phi^* \sin \theta^* \\ \sin \phi^* \end{Bmatrix}. \quad (2.4)$$

En 2D, les composants azimutales ϕ et ϕ^* n'existent pas et $\Omega(\theta)$ et $\Omega^*(\theta^*)$ sont reliés simplement par une rotation de 90° . En 3D, ce n'est plus le cas et le vecteur $\mathbf{t}$ doit être choisi initialement de manière arbitraire mais en gardant l'orthogonalité avec le vecteur $\mathbf{n}$.

Si la vitesse relative normale u_n est nulle, une force peut exister au point de contact. Par contre, si elle a une valeur positive, alors les grains ne se toucheront plus à la fin du pas de temps. Ces relations entre la vitesse normale au contact et la réaction locale (en termes d'une impulsion) r_n peuvent être résumées par les conditions suivantes :

$$\begin{cases} u_n = 0 & \Rightarrow & r_n \geq 0 \\ u_n > 0 & \Rightarrow & r_n = 0 \end{cases}. \quad (2.5)$$

Ces inégalités ont été largement étudiées par Fishera et Signorini dans le cadre de l'équilibre de corps sous des conditions limites variables [137, 60]. Aujourd'hui, elles sont connues sous le nom de *relations de complémentarité de Signorini* dont le graphe associé est présenté sur la Fig. 2.2. Il est important de mentionner que u_n ne correspond pas nécessairement à la valeur de la vitesse relative au début ou à la fin du pas de temps. On parle plutôt de la *vitesse normale formelle*, et elle correspond à une moyenne pondérée des

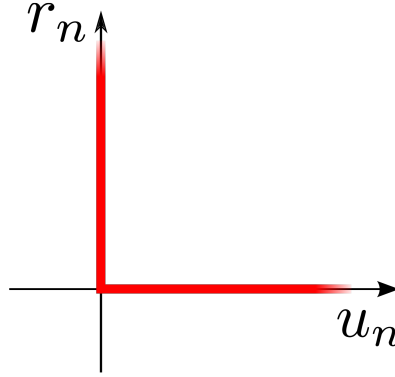


FIGURE 2.2 – Relation non régulière entre la vitesse normale au contact u_n et l'impulsion r_n au contact.

vitesse relatives u_n^- et u_n^+ de la forme :

$$u_n = \frac{\rho_n u_n^- + u_n^+}{1 + \rho_n}, \quad (2.6)$$

où ρ_n est le coefficient de restitution normal au contact [100]. Pour une collision binaire entre deux particules, ce coefficient est simplement le rapport entre les vitesses relatives des particules avant et après la collision, $\rho_n = -u_n^+/u_n^-$. Lorsque $\rho_n = 1$, la collision est parfaitement élastique et la vitesse relative est restituée complètement mais dans la direction opposée. Par contre, si $\rho_n = 0$, la collision est parfaitement inélastique, les deux grains resteront en contact, et l'énergie cinétique dans le centre de masse des deux particules est dissipée.

On peut projeter les impulsions $\mathbf{r}$ du repère du contact au repère des centres de masse des particules comme suit :

$$\mathbf{R} = \mathbf{H}^T \mathbf{r}, \quad (2.7)$$

où $\mathbf{H}^T$ est la matrice transposée de $\mathbf{H}$. En utilisant les équations 2.3 et 2.7, l'équation de la dynamique projetée sur le repère du contact s'écrit comme suit :

$$\mathbf{H}\mathbf{H}^T \mathbf{r} = \mathbf{M}(\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-), \quad (2.8)$$

ce qui conduit à l'expression de la vitesse à la fin du pas de calcul :

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^- + \mathbf{W} \mathbf{r}, \quad (2.9)$$

où $\mathbf{W} = \mathbf{H}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{H}^T$. Cette équation décrit la dynamique réduite aux repères de contact. Enfin, les réactions de contact sont données par :

$$\mathbf{r} = \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-), \quad (2.10)$$

où les composantes de la vitesse $\mathbf{u}^+$ peuvent être exprimées à partir des vitesses au début du pas de temps et de la vitesse formelle à l'aide des coefficients de restitution ; voir Éq. 2.6.

Il est important de rappeler que nous nous sommes concentrés jusqu'ici sur le cas simple d'une collision frontale entre deux grains. Autrement dit, les composantes tangentielles de la vitesse relative, u_t et de la force au contact r_t ont été négligées. De même, nous avons supposé que les grains sont sphériques et donc les moments sont nuls. Ainsi, si les grains interagissent suivant une direction oblique, ou s'ils portent une vitesse angulaire non-nulle, il est nécessaire de prendre en compte les composantes tangentielles des vitesses et des forces.

Loi de contact frottant

La loi de frottement de Coulomb est supposée régir les interactions tangentielles entre les particules dans un matériau granulaire [115]. Cette loi implique que l'ensemble des forces tangentielles qui peuvent être supportées aux points de contact ne dépendent pas de l'aire de contact ni de la vitesse de glissement, et sont seulement proportionnelles à la force normale au travers du coefficient de frottement μ . Cette loi peut s'écrire sous la forme de relations non régulières entre la vitesse tangentielle et l'impulsion tangentielle au contact comme :

$$\begin{cases} u_t = 0 & \Rightarrow -\mu r_n \leq r_t \leq \mu r_n \\ u_t \neq 0 & \Rightarrow r_t = -\mu r_n \frac{u_t}{|u_t|} \end{cases} . \quad (2.11)$$

Le graphe correspondant à ces inégalités est présenté sur la Fig. 2.3. De manière analogue aux relations de Signorini, u_t est une *vitesse formelle tangentielle* définie par :

$$u_t = \frac{\rho_t u_t^- + u_t^+}{1 + |\rho_t|}, \quad (2.12)$$

où ρ_t est le coefficient de restitution dans la direction tangente au contact. Le coefficient de restitution ρ_t peut prendre des valeurs dans l'intervalle $[-1, 1]$. Lorsque $\rho_t = 0$, l'énergie est fortement dissipée. Si $\rho_t = 1$, la vitesse tangentielle est conservée comme s'il s'agissait de surfaces très lisses en contact. Et si $\rho_t = -1$, la vitesse tangentielle avant le choc est complètement restituée dans la direction contraire. Ce dernier cas est rare mais il se produit lors la collision de deux matériaux élastiques très rugueux [18, 136].

Une fois les forces de contact calculées, les vitesses linéaires et angulaires des particules peuvent être déterminées à partir de l'équation de la dynamique. Ces vitesses sont ensuite utilisées pour mettre à jour les positions des particules. Dans le cas d'une collision binaire, la solution est unique et peut être calculée de manière explicite. Dans le cas d'un système multicontacts, une procédure itérative est utilisée pour déterminer simultanément les forces et les vitesses.

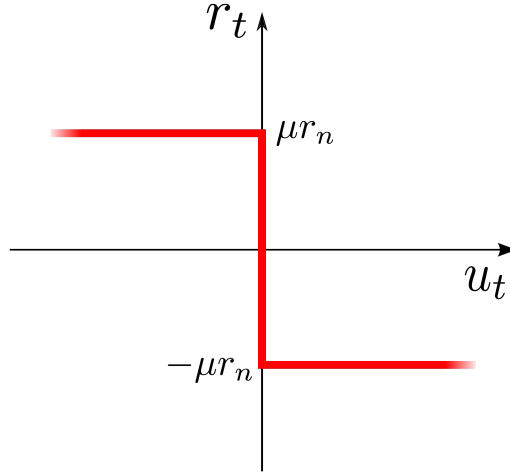


FIGURE 2.3 – Relation non-régulière entre la vitesse tangentielle au contact u_t et l'impulsion tangentielle associée r_t .

Formulation générale pour un ensemble de grains en contact

Considérons maintenant le système représenté sur la Fig. 2.4(a) où plusieurs grains sont en contact aux endroits marqués par les cercles rouges. Si l'on veut résoudre l'interaction entre les grains i et j , on doit considérer l'ensemble des impulsions qui résultent des interactions voisines β ; voir Fig. 2.4(b). L'équation de la dynamique réduite (Éq. 2.9) peut s'écrire alors sous la forme :

$$\mathbf{u}_\alpha^+ = \mathbf{u}_\alpha^- + \mathbf{W}_\alpha \mathbf{r}_\alpha + \sum_{\forall \beta} \mathbf{W}_{\alpha\beta} \mathbf{r}_\beta, \quad (2.13)$$

où $\mathbf{W}_{\alpha\beta} = \mathbf{H}_\alpha \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{-1} \mathbf{H}_\beta^T$ est la matrice qui couple les impulsions voisines $\mathbf{r}_\beta$ avec la dynamique au contact α . En réorganisant les termes de l'Équation 2.13, la réaction entre les particules i et j peut s'exprimer par :

$$\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{W}_\alpha^{-1} \left\{ \mathbf{u}_\alpha^+ - \mathbf{u}_\alpha^- - \sum_{\forall \beta} \mathbf{W}_{\alpha\beta} \mathbf{r}_\beta \right\}. \quad (2.14)$$

La nature implicite du système d'équations exige l'implémentation d'une procédure itérative, telle que la méthode de *Gauss-Seidel*, afin de trouver les forces et les vitesses relatives aux contacts. De manière générale, l'unicité de la solution n'est pas garantie pour les particules parfaitement rigides. Cependant, en initialisant chaque étape de calcul avec les forces calculées dans l'étape précédente, l'ensemble des solutions admissibles se rétrécit aux seules fluctuations autour de la solution exacte. L'algorithme qui résume cette procédure est présenté ci-dessous.

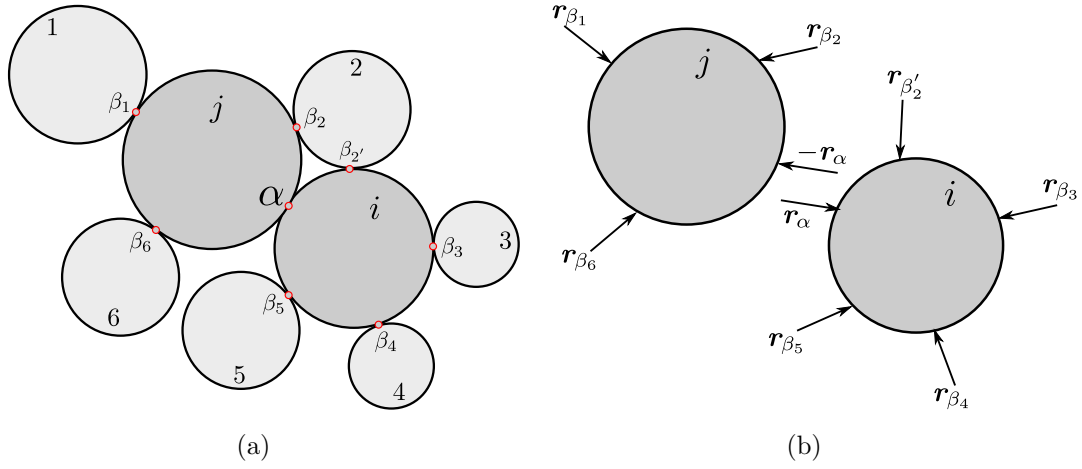


FIGURE 2.4 – (a) Système multicontacts et (b) grains i et j isolés montrant les forces exercées sur chaque particule.

Algorithme 1 Intégration temporelle dans le cadre de la dynamique de contacts.

Résultat : Positions et vitesses des grains et forces de contact à la fin d'un pas de temps.

- 1 Créer une liste de contacts effectifs ou potentiels en fonction des positions des grains au début du pas de temps.
 - 2 **tant que** la variation des forces dépasse une certaine tolérance **faire**
 - 3 **pour** chaque contact dans la liste de contacts **faire**
 - 4 Calculer u_α^- avec l'équation 2.3.
 - 5 **si** on connaît les réactions r_β des contacts voisins **alors**
 - 6 Calculer $\sum W_{\alpha\beta} r_\beta$ avec les nouvelles valeurs des réactions.
 - 7 **sinon**
 - 8 Calculer $\sum W_{\alpha\beta} r_\beta$ avec les réactions du début du pas de temps.
 - 9 **fin**
 - 10 Calculer les nouvelles réactions r_α avec l'équation 2.14 en respectant les inégalités de Signorini et de la loi de frottement.
 - 11 **fin**
 - 12 Calculer la variation des forces normales par rapport à l'itération précédente.
 - 13 **fin**
 - 14 Calculer les forces et les vitesses dans le repère global avec l'équation 2.7.
 - 15 Mettre à jour les positions des particules à partir des vitesses calculées.
-

Dans la boucle de résolution des contacts, le critère de convergence est normalement lié à la façon dont les réactions aux contacts varient par rapport aux forces calculées dans l'itération précédente. Il faut remarquer que ce critère, ainsi que sa tolérance, doivent être adaptés en fonction du problème étudié, du nombre d'interactions et des conditions limites telles que le taux de cisaillement ou la pression appliquée.

2.1.3 Remarques sur le choix de la méthode numérique

La dynamique de contacts est une méthode robuste et inconditionnellement stable. Cette méthode a été appliquée à l'étude des milieux granulaires en régimes statiques ou quasi-statiques [108, 139, 125, 143, 126, 119, 131, 135], des écoulements dynamiques [25, 138, 134], des interactions grain-fluide [144], et le couplage FEM - éléments discrets [102]. La CD ne nécessite pas de paramètres de régularisation aux contacts et donc des pas de temps relativement larges peuvent être utilisés en comparaison à la MD. Bien que la dynamique de contacts soit originellement proposée dans le cadre de l'interaction des corps rigides et du contact frottant, elle a été généralisée aux cas des contacts cohésifs, des ponts capillaires, cimentation, etc [1, 52, 29]. Cependant, il faut toujours garder à l'esprit qu'en raison de la nature parfaitement rigide des particules et de la méthode d'implantation des lois de contact, la CD ne peut pas être utilisée pour l'étude de la rigidité des assemblages de grains et la propagation d'ondes. Mais de ce fait, la CD est un outil idéal pour l'étude des déformations plastiques des matériaux granulaires.

Il faut enfin remarquer que dans la méthode CD, la condition exacte de contact au sens géométrique, c'est à dire l'interstice nul $\delta = 0$ et vitesse normale au contact nulle $u_n = 0$, ne peut pas être toujours respectée en particulier à cause de la phase de détection de contacts. Néanmoins, la formulation des lois de contact est telle que les recouvrements entre particules restent petits et les contraintes cinématiques sont respectées pendant l'évolution d'un système granulaire. Les recouvrements ne représentent donc qu'une imperfection mathématique et numérique. Ils sont utilisés pour contrôler la qualité des calculs et s'ils augmentent au cours de l'évolution du système, il est nécessaire de modifier les paramètres de convergence.

Les études numériques présentées dans ce mémoire ont été réalisées exclusivement en utilisant la méthode CD implantée sur la plate-forme de simulation LMGC90 [51]. Étant donné l'état dense des systèmes que nous allons étudier, les coefficients de restitution normal et tangentiel ont été toujours fixés à zéro.

2.1.4 Remarques sur la simulation de grains polyédriques

Un avantage majeur de la méthode CD par rapport à la méthode MD est de ne pas impliquer une loi de force explicite. Ceci est d'autant plus important que les contacts entre particules de formes quelconques sont différents des contacts entre sphères utilisés souvent comme un modèle simplifié. En particulier, avec des particules polyédriques au moins 6 types différents de contacts sont possibles (sommet-sommet, sommet-arête, sommet-face, arête-arête, arête-face, et face-face ; voir Fig. 2.5). Dans le cas des contacts sommet-sommet, sommet-arête, sommet-face et arête-arête non colinéaires, le contact est ponctuel et est donc représenté par un seul point de contact. Dans le cas de contacts arête-arête colinéaires et arête-face, l'interaction doit être représentée par deux points de contact. Dans le cas des contacts face-face, trois points de contacts sont nécessaires afin de représenter l'interaction entre les corps. La force de la méthode CD est qu'il suffira de fixer les points et d'appliquer l'algorithme présenté plus haut tandis qu'en MD une loi de force spécifique

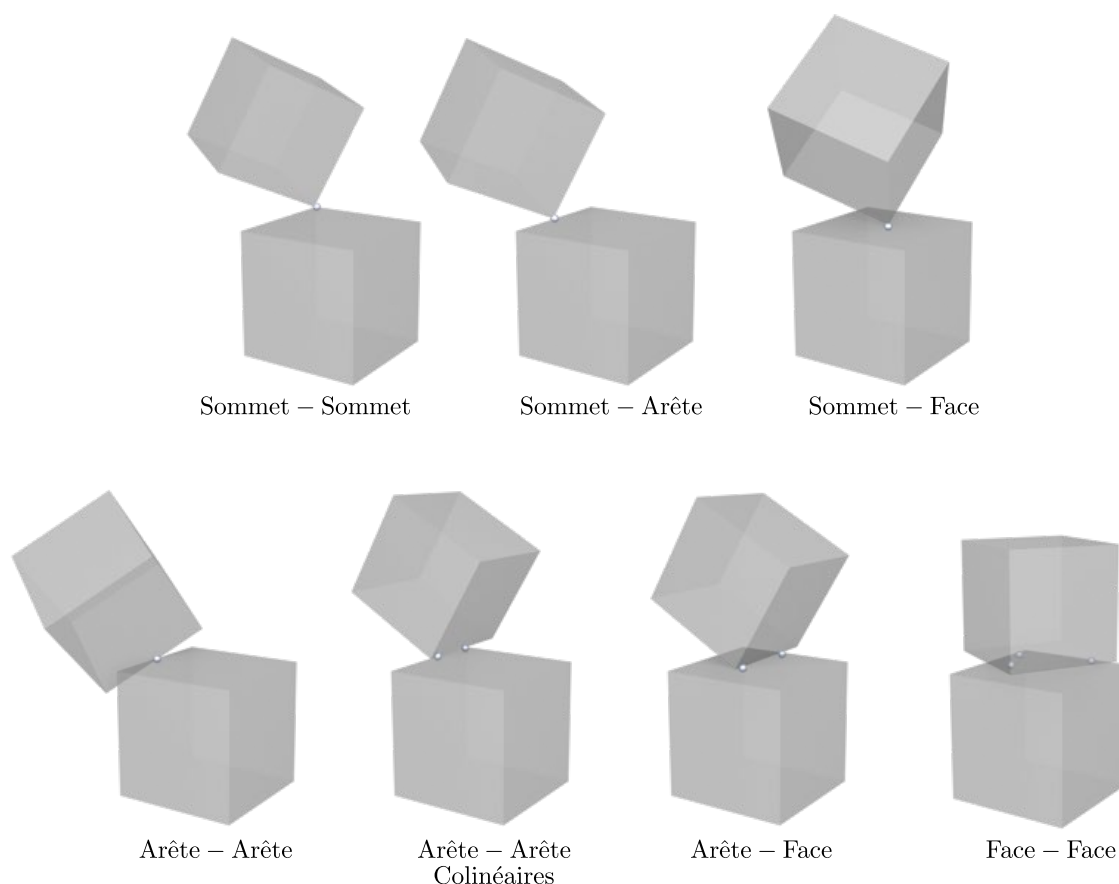


FIGURE 2.5 – Types de contact qui peuvent exister entre deux grains de forme polyédrique. Les cercles indiquent les points de contact nécessaires afin de représenter correctement la contrainte cinématique.

est nécessaire. Le choix des points est arbitraire puisque les particules sont rigides. Chaque point de contact porte alors une force de réaction mais seule la résultante de ces forces est physiquement observable et sera donc considérée comme étant la force de contact appliquée au barycentre des points considérés.

Dans tous les cas, une méthode de détection des contacts adaptée est nécessaire pour bien identifier le type de contact. Les approches les plus utilisées sont la méthode du “common-plane” proposée par Cundall [41] et la méthode de “shadow-overlap” proposée par Moreau [134] et optimisée par Saussine [133]. La première méthode est basée sur la minimisation des distances entre les faces des polyèdres en contact potentiel et la définition d’un plan séparateur intermédiaire, c’est-à-dire le repère local. La deuxième méthode cherche à trouver l’intersection des faces en contact potentiel, ou simplement la direction qui minimise la séparation entre corps.

2.2 Microstructure d'un matériau granulaire

Pour un milieu granulaire, la microstructure signifie l'organisation des particules, de leurs contacts, et des forces dans l'espace. Cette microstructure évolue avec les déformations et le caractère plus ou moins dynamique du milieu. La microstructure peut être évaluée au travers de différents descripteurs soit 1) géométriques et reliés essentiellement à l'organisation des grains, des contacts, ou encore la connectivité des particules, soit 2) mécaniques et reliés essentiellement aux forces normales, tangentielles et à la mobilisation du frottement. À l'ordre le plus bas, ces descripteurs sont des nombres qui rendent compte des grandeurs scalaires moyennes. À des ordres supérieurs, ces descripteurs peuvent être pondérés suivant les directions dans l'espace. Nous parlerons alors de distributions et d'anisotropies nécessitant l'introduction de différents tenseurs de forces et de textures.

Dans cette partie, et sans rentrer trop dans les détails, nous allons présenter les propriétés majeures de la microstructure granulaire telles que les hétérogénéités (via la distribution des forces) et les anisotropies des contacts et des forces.

2.2.1 La texture

La connectivité

Le nombre de contacts moyen ou *nombre de coordination* Z est le premier et le plus simple des descripteurs rendant compte de la connectivité moyenne d'un milieu granulaire. Cette mesure prend en compte tous les contacts actifs N_c et toutes les particules qui participent à la transmission d'efforts N_p . Les contacts actifs sont ceux dont la force normale est non-nulle. Les particules ayant zéro ou juste un contact sont considérées comme flottantes, c'est-à-dire qu'elles ne transmettent pas d'efforts, et elles ne sont pas prises en compte pour le calcul de N_p . La coordination moyenne est simplement calculée comme $Z = 2N_c/N_p$.

Dans le cas d'un empilement de disques monodisperses non frottants soumis à une compression isotrope, le nombre de coordination est 4. Pour un empilement de sphères monodisperses le nombre de coordination est 6. [23, 73, 159, 128]. Dans le cas de particules non sphériques, Z est de 12 en 3D et de 6 en 2D [12, 13]. En présence du frottement, ce nombre en général diminue mais il est facile de montrer qu'il doit être compris entre 3 et 4 pour des systèmes composés de disques, entre 4 et 6 pour des grains non circulaires en 2D ou des sphères en 3D, et entre 4 et 12 pour des grains non sphériques en 3D.

Pour aller plus loin, la connectivité des particules peut être analysée en termes de proportions P_k de particules ayant exactement un nombre k de contacts. Une telle mesure permet de mieux rendre compte de l'effet que pourrait avoir la forme ou encore l'étalement des tailles de particules sur la connectivité. Par exemple, la Fig. 2.6 montre deux exemples d'échantillons denses composés de pentagones réguliers et irréguliers de tailles variables où chaque grain est coloré en échelle de gris en fonction du nombre de contacts associé. On remarque que le nombre de contacts par particule varie considérablement aux grands étalements de tailles avec certains grains ayant plus de 20 voisins ; voir Fig. 2.6(b). Sur la

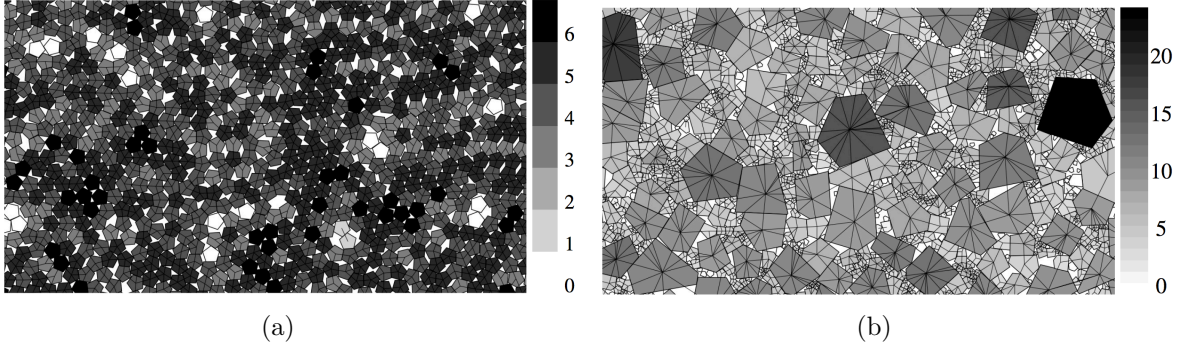


FIGURE 2.6 – Exemples d'échantillons composés de grains pentagonaux dont la dispersion de tailles est importante. Chaque grain est coloré en échelle de gris en fonction du nombre de contacts [103].

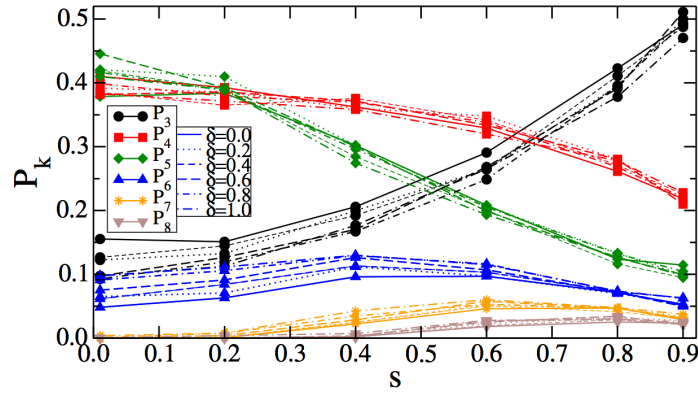


FIGURE 2.7 – Distribution de probabilité P_k du nombre de contacts k en fonction de la dispersion de tailles de grains S et d'une irrégularité de formes δ d'échantillons composés de pentagones [103].

Figure 2.7, la distribution de probabilités des nombres de contacts est montrée pour les mêmes pentagones en fonction de la dispersion des tailles de grains S et l'irrégularité des formes δ . En général, on observe que la probabilité de trouver des particules avec 3 contacts (P_3) augmente de manière graduelle avec la dispersion des tailles tandis que la probabilité d'avoir 4 ou 5 contacts diminue.

Anisotropie des contacts

La description présentée plus haut peut être encore enrichie en considérant les directions $\mathbf{n}$ des contacts. Nous considérons alors la distribution statistique normalisée des contacts $P(\mathbf{n})$ qui décrit la fraction des contacts orientés dans un secteur angulaire donné autour du vecteur unitaire $\mathbf{n}$. Des études numériques [127, 81] et des expériences [109] montrent que cette distribution n'est pas uniforme. En 2D, le vecteur $\mathbf{n}$ est paramétré par un seul

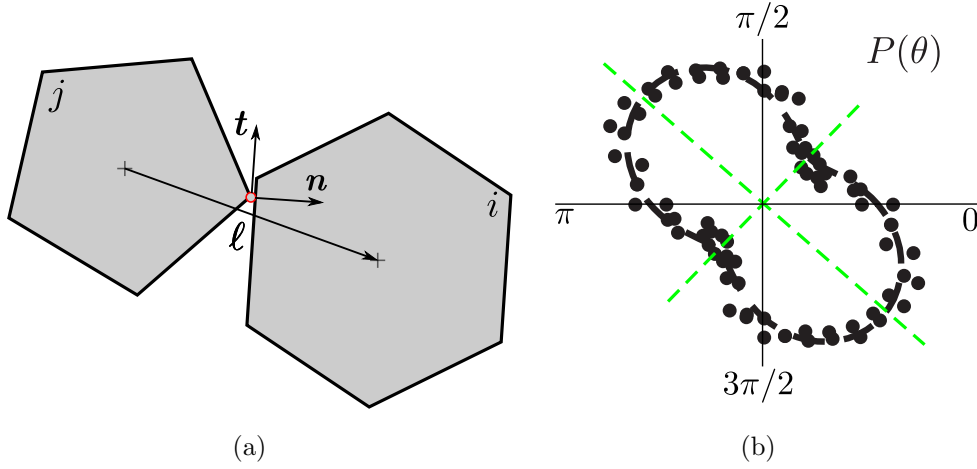


FIGURE 2.8 – (a) Exemple du repère de contact créé au contact entre deux particules non-sphériques et (b) Distribution angulaire de probabilité de contacts pour un échantillon sous cisaillement [8].

angle θ tel que $\mathbf{n} = (\cos \theta; \sin \theta)$, avec $\theta \in]0, \pi[$. La Fig. 2.8 montre $P(\theta)$ dans le cas d'un cisaillement plan 2D à l'état stationnaire. Nous observons que la distribution est anisotrope avec une orientation préférentielle autour de $\simeq 135^\circ$.

La fonction $P(\theta)$ peut alors être approchée par une série de Fourier tronquée au deuxième ordre :

$$P(\theta) \simeq \frac{1}{\pi} \{1 + a_c \cos 2(\theta - \theta_c)\}, \quad (2.15)$$

où θ_c est l'orientation préférentielle des contacts, et a_c est l'anisotropie structurale du réseau des contacts. Elle est nulle pour un milieu isotrope et sa valeur maximale est 1. Une méthode plus systématique pour accéder à l'anisotropie du système consiste à calculer le tenseur de texture (ou encore tenseur de fabrique) $\mathbf{F}$ défini par :

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi n_i(\theta) n_j(\theta) P(\theta) d\theta = \frac{1}{N_c} \sum_{c \in V} n_i^c n_j^c. \quad (2.16)$$

où i et j désignent les composantes dans le repère de référence. L'anisotropie du réseau de contact est alors donnée par $a_c = 2(F_1 - F_2)$, où F_1 et F_2 sont ses valeurs propres majeure et mineure, respectivement.

En plus de son orientation, la *géométrie* d'un contact est aussi définie via le vecteur branche ℓ (vecteur joignant les centres de deux particules en contact) ; voir Fig.2.8(a). Dans le repère du contact, le vecteur branche s'écrit comme $\ell = \ell_n \mathbf{n} + \ell_t \mathbf{t}$, où $\mathbf{t}$ est le vecteur tangent unitaire. Dans le cas de particules circulaires, $\ell_t = 0$. Ainsi, l'analyse de la texture granulaire peut être complétée et enrichie grâce à l'étude des distributions angulaires des longueurs moyennes normales et tangentielles $\langle \ell_n \rangle(\theta)$ et $\langle \ell_t \rangle(\theta)$, respectivement. Des exemples de ces distributions sont présentés sur la Figure 2.9 pour un cisaillement plan de polygones.

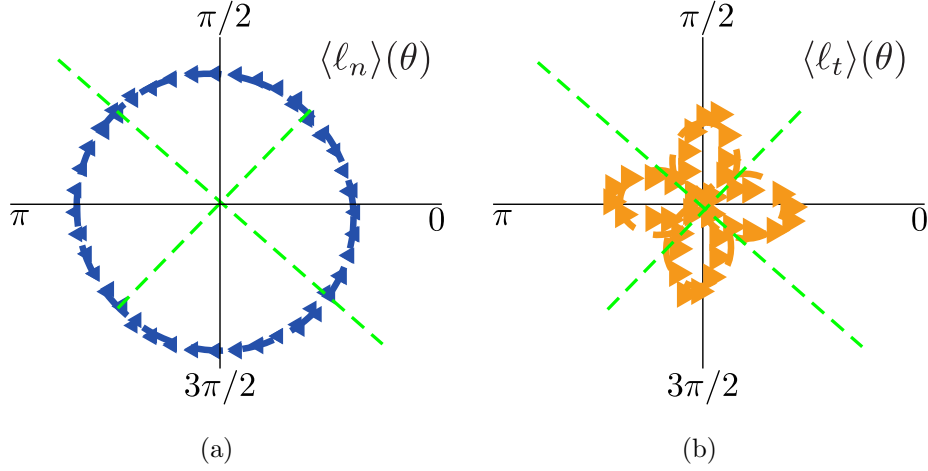


FIGURE 2.9 – Distribution angulaire des longueurs de branches projetées sur les directions (a) normale et (b) tangentielle des contacts [8].

Comme pour $P(\theta)$, ces deux distributions peuvent être approchées par un développement de Fourier à l'ordre 2 comme suit :

$$\begin{cases} \langle \ell_n \rangle(\theta) \simeq \langle \ell_n \rangle \{1 + a_{\ell_n} \cos 2(\theta - \theta_{\ell_n})\} \\ \langle \ell_t \rangle(\theta) \simeq \langle \ell_t \rangle \{1 + a_{\ell_t} \cos 2(\theta - \theta_{\ell_t})\} \end{cases}, \quad (2.17)$$

où $\langle \ell_n \rangle$ est la longueur normale moyenne des branches dans tout l'échantillon, a_{ℓ_n} et a_{ℓ_t} sont les anisotropies des branches dans les directions normale et tangentielle respectivement, et θ_{ℓ_n} et θ_{ℓ_t} sont les orientations préférentielles de chaque distribution. Comme précédemment, ces anisotropies peuvent être extraites des tenseurs de branches définis par :

$$\begin{cases} \chi_{ij}^{\ell_n} = \frac{1}{\langle \ell_n \rangle} \int_0^\pi \langle \ell_n \rangle(\theta) n_i(\theta) n_j(\theta) P(\theta) d\theta = \frac{1}{\langle \ell_n \rangle} \sum_{c \in V} \ell_n^c n_i^c n_j^c \\ \chi_{ij}^{\ell_t} = \frac{1}{\langle \ell_t \rangle} \int_0^\pi \langle \ell_t \rangle(\theta) t_i(\theta) t_j(\theta) P(\theta) d\theta = \frac{1}{\langle \ell_t \rangle} \sum_{c \in V} \ell_t^c t_i^c t_j^c \end{cases}, \quad (2.18)$$

où $a_{\ell_n} = 2(\chi_1^{\ell_n} - \chi_2^{\ell_n})/(\chi_1^{\ell_n} + \chi_2^{\ell_n}) - a_c$, et $a_{\ell_t} = 2(\chi_1^{\ell_t} - \chi_2^{\ell_t})/(\chi_1^{\ell_t} + \chi_2^{\ell_t}) - a_c - a_{\ell_n}$, et $\chi_1^{\ell_n}$, où $\chi_2^{\ell_n}$ sont les valeurs propres majeure et mineure du tenseur χ^{ℓ_n} , et $\chi_1^{\ell_t}$ et $\chi_2^{\ell_t}$ sont les valeurs propres majeure et mineure du tenseur $\chi^{\ell_t} = \chi^{\ell_n} + \chi^{\ell_t}$.

Il est à noter que les valeurs de ces anisotropies varient en fonction de la composition des assemblages granulaires (formes des particules, distributions des tailles, etc).

2.2.2 Les chaînes de forces

La distribution très hétérogène des forces de contact est une autre propriété remarquable des milieux granulaires [6, 40, 90, 15, 121]. Par exemple, la Figure 2.10 montre les chaînes

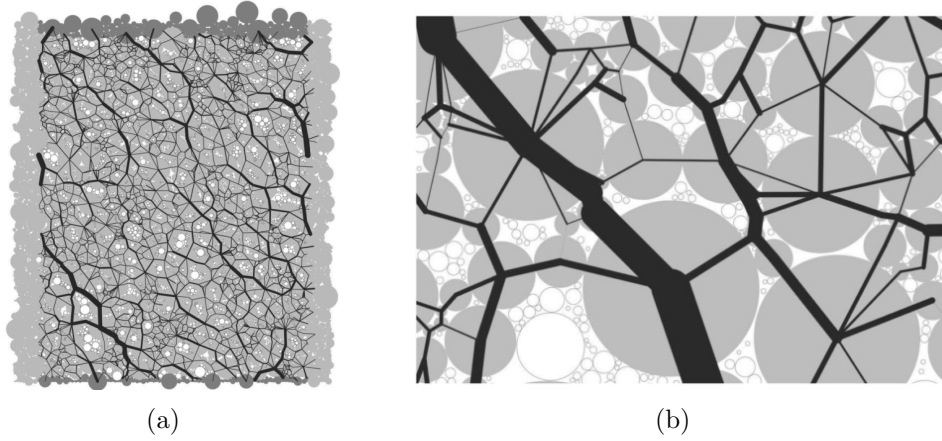


FIGURE 2.10 – Exemple d'un échantillon composé de disques où les forces sont dessinées comme des barres entre particules. L'épaisseur des barres est proportionnelle à l'intensité de la force normale au contact [148].

de forces, représentées par un segment joignant les centres des particules en contact et d'épaisseur égale à l'intensité de la force, dans un essai de cisaillement simple sur un système très polydisperse de disques. Nous observons que les forces s'orientent préférentiellement à $\simeq 135^\circ$. Les forces les plus fortes semblent être portées préférentiellement par les plus grosses particules.

Un résultat de base est que le nombre de forces supérieures à la force normale moyenne $\langle f_n \rangle$ décroît exponentiellement, alors que le nombre de forces inférieures à la force moyenne varie en loi de puissance. La distribution des efforts et l'analyse des anisotropies permet aussi de définir ce que l'on appelle *le réseau fort de contacts* et *le réseau faible de contacts*. Le réseau fort est responsable de la transmission des contraintes déviatoriques.

Plusieurs modèles théoriques ont tenté d'expliquer la distribution observée des forces et de leur comportement en réseaux faible et fort. Par exemple, en considérant la redistribution des forces entre deux couches successives de grains, Liu et al. ont introduit un modèle, appelé “q-model”, qui prédit une distribution purement exponentielle des forces [90]. Plus récemment, en prenant en compte les contraintes stériques des particules (environnement locaux) et l'aspect aléatoire de la répartition des contacts sur une particule, Radjai [120] a introduit un modèle théorique ne dépendant que d'un seul paramètre reproduisant la décroissance exponentielle des forces fortes et une densité de probabilité non nulle pour les forces très petites.

La composition granulaire affecte substantiellement les réseaux forts et faibles. Par exemple, les distributions deviennent de plus en plus larges au fur et à mesure que la forme des particules *s'éloigne* d'une forme sphérique [11] ou encore lorsque l'étalement granulométrique augmente [149] et en même temps le nombre de forces faibles augmente; voir Fig. 2.11.

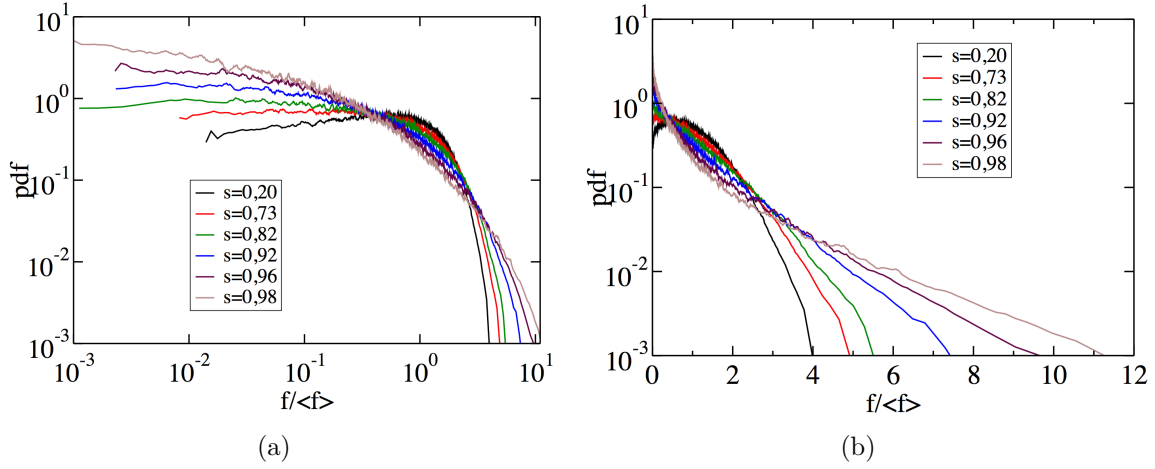


FIGURE 2.11 – Distribution de probabilité de forces normales normalisées par la force normale moyenne en (a) échelle lin-log, et (b) log-log [148].

Anisotropie des forces normales et mobilisation du frottement

De manière identique à la distribution angulaire de longueur moyenne des branches, il est intéressant de quantifier la microstructure en termes d'orientations moyennes des forces normales $\langle f_n \rangle(\theta)$, et tangentiels $\langle f_t \rangle(\theta)$. Ces distributions sont présentées sur la Fig. 2.12 dans le cas d'un cisaillement plan 2D.

Comme précédemment, ces distributions angulaires peuvent être décrites par des séries de Fourier tronquées :

$$\begin{cases} \langle f_n \rangle(\theta) \simeq \langle f_n \rangle \{1 + a_{f_n} \cos 2(\theta - \theta_{f_n})\} \\ \langle f_t \rangle(\theta) \simeq \langle f_n \rangle \{a_{f_t} \sin 2(\theta - \theta_{f_t})\} \end{cases}, \quad (2.19)$$

où a_{f_n} et a_{f_t} sont les anisotropies des forces normales et tangentiels respectivement, et θ_{f_n} et θ_{f_t} sont les orientations privilégiées des distributions angulaires. Il est toutefois plus commode d'extraire les paramètres d'anisotropies et d'orientations via les tenseurs de forces définis comme suit :

$$\begin{cases} \chi_{ij}^{f_n} = \frac{1}{\langle f_n \rangle} \int_0^\pi \langle f_n \rangle(\theta) n_i(\theta) n_j(\theta) P(\theta) d\theta = \frac{1}{\langle f_n \rangle} \sum_{c \in V} f_n^c n_i^c n_j^c \\ \chi_{ij}^{f_t} = \frac{1}{\langle f_n \rangle} \int_0^\pi \langle f_t \rangle(\theta) n_i(\theta) t_j(\theta) P(\theta) d\theta = \frac{1}{\langle f_n \rangle} \sum_{c \in V} f_t^c n_i^c t_j^c \end{cases}. \quad (2.20)$$

On peut alors montrer que $a_{f_n} = 2(\chi_1^{f_n} - \chi_2^{f_n})/(\chi_1^{f_n} + \chi_2^{f_n}) - a_c$ et $a_{f_t} = 2(\chi_1^f - \chi_2^f)/(\chi_1^f + \chi_2^f) - a_c - a_{f_n}$, où $\chi_1^{f_n}$ et $\chi_2^{f_n}$ sont les valeurs propres majeure et mineure du tenseur χ^{f_n} , et χ_1^f et χ_2^f sont les valeurs propres majeure et mineure du tenseur $\chi^f = \chi^{f_n} + \chi^{f_t}$.

Le paramètre a_n va rendre compte du degré d'anisotropie des forces normales, alors que le paramètre a_t va rendre compte du niveau de mobilisation du frottement [130].

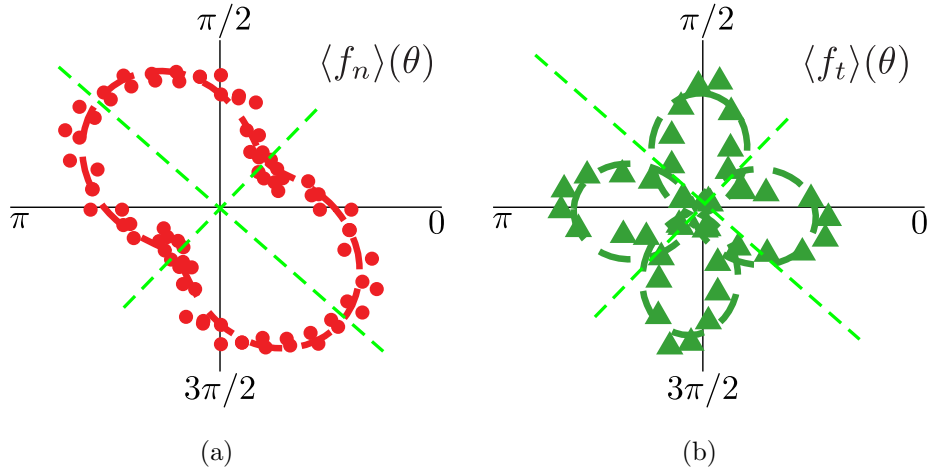


FIGURE 2.12 – Distributions angulaires des forces (a) normales et (b) tangentielles aux contacts pour un échantillon 2D soumis au cisaillement simple [8].

Les paramètres d'anisotropie a_c , a_{ℓ_n} , a_{ℓ_t} , a_{f_n} , et a_{f_t} ainsi définis ne sont pas seulement des descripteurs de la microstructure granulaire et de la transmission des efforts, mais plus fondamentalement ces descripteurs sont reliés au frottement interne du matériau au travers de la relation suivante (en cisaillement plan) [127, 123] :

$$\sin \varphi \simeq \frac{1}{2}(a_c + a_{f_n} + a_{f_t} + a_{\ell_n} + a_{\ell_t}), \quad (2.21)$$

avec $\sin \varphi = q/p$ en 2D avec $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$ et $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$, où σ_1 et σ_2 sont les valeurs propres du tenseur $\boldsymbol{\sigma}$. Il est à noter que pour une configuration triaxiale en 3D, le facteur $1/2$ est remplacé par un facteur $2/5$. Cette décomposition du frottement macroscopique via les paramètres d'anisotropie résulte de la définition micromécanique du tenseur de contraintes défini comme [94, 106] :

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{c \in V} f_i^c \ell_j^c = n_c \langle f_i \ell_j \rangle, \quad (2.22)$$

où V est le volume total et $n_c = N_c/V$ la densité de contact. En écrivant l'expression de droite sous forme intégrale, on obtient :

$$\sigma_{\alpha\beta} = n_c \int_{\Omega} f_{\alpha} \ell_{\beta} P_{\ell f} d\mathbf{f} d\boldsymbol{\ell}, \quad (2.23)$$

où $P_{\ell f}$ est la probabilité des produits $\mathbf{f}\boldsymbol{\ell}$ et Ω le domaine d'intégration. En supposant que

les vecteurs $\mathbf{n}$, $\mathbf{f}$ et ℓ sont indépendants, l'expression 2.23 devient :

$$\sigma_{ij} = n_c \int_0^\pi \{ \langle \ell_n \rangle(\theta) n_i(\theta) + \langle \ell_t \rangle(\theta) t_j(\theta) \} \{ \langle f_n \rangle(\theta) n_i(\theta) + \langle f_t \rangle(\theta) t_j(\theta) \} P(\theta) d\theta. \quad (2.24)$$

Faisant apparaître ainsi les distributions angulaires introduites précédemment.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'abord présenté le cadre des simulations numériques par éléments discrets en mettant l'accent sur la dynamique de contacts (CD). Un avantage majeur de la méthode CD est de permettre de simuler les particules polyédriques sans introduire des lois de force artificielles pour les contacts face-face et face-arête. Par ailleurs, la méthode CD rend compte d'une manière rigoureuse du caractère rigide des contacts et permet ainsi de prendre directement en compte les déformations plastiques des milieux granulaires.

Dans une seconde partie, nous avons présenté plusieurs outils d'analyse de la microstructure. Il faut noter que les concepts et résultats présentés dans ce chapitre ne couvrent que ceux qui sont les plus directement liés aux travaux de cette thèse. En effet, la fragmentation des particules résulte d'un comportement collectif lequel va dépendre de l'hétérogénéité du milieu en termes de forces. En ce sens, la fragmentation d'une particule dépend de la manière dont elle est connectée et sollicitée au sein d'un système granulaire. Ainsi, la modélisation numérique discrète va nous permettre d'avoir accès aux différents mécanismes locaux en jeu et de faire varier systématiquement les propriétés physiques du matériau.

“ Geometry does not teach us to draw lines, but requires them to be drawn; for it requires that the learner should first be taught to describe these accurately; then it shows how by these operations problems may be solved. The solution of these problems is required from mechanics; [...] it is the glory of geometry that from those few principles, it is able to produce so many things. ”

I. Newton

Chapitre 3

Fragmentation d'un grain individuel

Dans ce chapitre, nous proposons un modèle numérique de fragmentation 3D où des particules polyédriques sont discrétisées en *cellules* polyédriques via une tessellation de Voronoï. Ce modèle aussi connu sous le nom de “Bonded Cell Method” (BCM) est une extension au cas 3D d'un modèle précédent développé en 2D [104]. Les cellules sont liées entre elles par des interactions cohésives normales et tangentielles. Cette méthode est implantée dans le cadre de la méthode CD et appliquée pour étudier la rupture d'une particule soumise à une compression diamétrale. Nous nous intéressons à l'effet du maillage (taille et forme) ainsi qu'à l'effet des contraintes internes sur la résistance macroscopique.

Sommaire

3.1	Modèle numérique 3D : Modèle de cellules collées	53
3.1.1	Géométrie des grains et des fragments	53
3.1.2	Loi d'interaction entre cellules	55
3.2	Compression de grains individuels	56
3.2.1	Effet des paramètres géométriques du maillage	59
3.2.2	Effet des paramètres mécaniques	60
	Conclusion	67

3.1 Modèle numérique 3D : Modèle de cellules collées

3.1.1 Géométrie des grains et des fragments

Le modèle tridimensionnel que nous proposons consiste en la division de chaque particule en cellules de Voronoï polyédriques collées entre elles via une cohésion normale et tangentielle. Une tessellation effectuée avec la méthode de Voronoï est une partition d'un espace donné $\mathbf{X}$ dans $\mathbb{R}^N$ via un groupe de points, aussi connus sous le nom de générateurs $\{P_j\}$. La propriété principale de cette sous-division est qu'un point x , pris de manière aléatoire, appartient à une cellule de Voronoï V_i si la distance entre le point et le générateur P_i de la cellule correspondante ($d(x, P_i)$) est minimale [110]. Il est possible alors d'écrire la définition d'une cellule de Voronoï V_i de façon compacte comme suit :

$$V_i = \{x \in \mathbf{X} \mid d(x, P_i) < d(x, P_j) \forall j \neq i\}. \quad (3.1)$$

Les Figs. 3.1(a) et 3.1(b) montrent deux exemples de tessellation de Voronoï pour un espace 2D carré ou 3D cubique, où on voit la position des générateurs (en noir) et des cellules (en différentes couleurs).

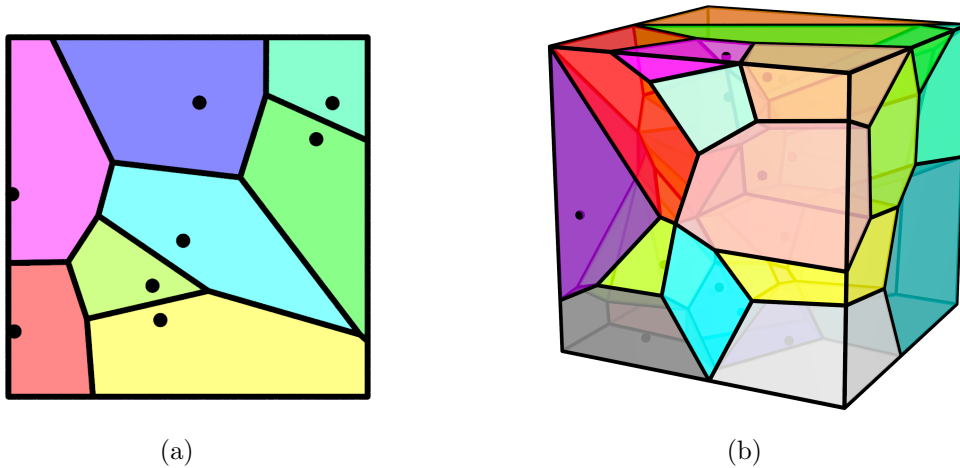


FIGURE 3.1 – Exemples des tessellations de Voronoï pour un espace (a) bidimensionnel carré composé de 8 générateurs, et (b) tridimensionnel cubique composé de 24 générateurs. Les points noirs montrent les générateurs et chaque cellule est représentée par une couleur différente.

En 3D, la tessellation de Voronoï produit toujours des polyèdres convexes qui partagent des faces communes si la région $\mathbf{X}$ est également convexe. Une tessellation barycentrique a une propriété supplémentaire : les générateurs correspondent aussi aux barycentres des cellules. Normalement, les points $\{P_j\}$ sont distribués de manière aléatoire dans l'espace et les coordonnées des barycentres $\{c_j\}$ ne coïncident pas nécessairement avec celles des générateurs. Une technique itérative connue sous le nom de méthode de *Lloyd* nous permet de contrôler cette dislocation des barycentres. L'algorithme de la méthode de Lloyd peut être résumé comme suit :

Algorithme 2 Calcul d'une tessellation de Voronoï barycentrique.

Résultat : Définition des cellules de Voronoï

- 1 Définition de l'espace $\mathbf{X}$
 - 2 Sélection aléatoire des générateurs $\{P_j\}$
 - 3 Définition des cellules $\{V_j\}$ correspondantes
 - 4 Calcul des coordonnées des barycentres des cellules $\{c_j\}$
 - 5 **tant que** *un critère de convergence basé sur $d(\{P_j\}, \{c_j\})$ n'est pas satisfait* **faire**
 - 6 remplacement des points $\{P_j\}$ par les positions des barycentres $\{c_j\}$
 - 7 calcul des nouvelles cellules $\{V_j\}$
 - 8 calcul des nouveaux barycentres $\{c_j\}$
 - 9 **fin**
-

Le critère de convergence utilisé est :

$$\frac{\sum_{j=1}^{n_{cl}} d(P_j, c_j)}{\sum_{j=1}^{n_{cl}} r_j} \leq \lambda, \quad (3.2)$$

avec n_{cl} le nombre de cellules, et r_j un rayon équivalent pour chaque cellule j . Ce rapport entre la somme des distances entre générateurs et barycentres, normalisé par la somme des rayons équivalents, doit être inférieur ou égal à une tolérance λ . Le paramètre λ s'interprète alors comme une mesure de l'irrégularité de la forme des cellules polyédriques. Des petites valeurs de λ produisent des polyèdres de taille et forme similaire, tandis que son augmentation génère une dislocation croissante entre les barycentres et les générateurs, ainsi qu'une variation des tailles et des formes des cellules. La Fig. 3.2 montre deux exemples en 2D de l'effet de λ sur la géométrie des cellules, l'une pour une valeur très petite de λ devant 1 et l'autre pour $\lambda = 0.8$. Il est à noter que dans le cadre de ce travail, nous avons utilisé le code NEPER [118] pour la discrétisation de nos particules en cellules de Voronoï.

Dans nos simulations, nous avons choisi d'utiliser des particules de forme d'icosaèdre tronquée. Ces polyèdres convexes semi-réguliers sont composés de 60 sommets, 20 faces hexagonales et 12 faces pentagonales. Ils appartiennent au groupe des solides d'Archimède et représente un bon compromis entre un nombre relativement faible de faces tout en

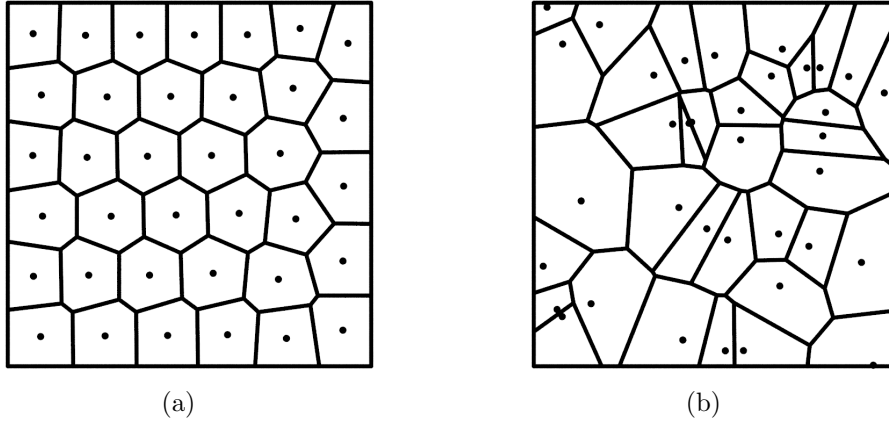


FIGURE 3.2 – Exemples des tessellations 2D d'une région carrée pour une valeur de désordre géométrique (a) $\lambda = 1 \times 10^{-4}$ et (b) $\lambda = 0.8$.

conservant une forte symétrie et une bonne sphéricité (la sphéricité d'un icosaèdre tronqué est de l'ordre $\Psi = 0.97$). Pour cette raison, des comparaisons éventuelles avec des essais expérimentaux menés sur des sphères est possible. Par ailleurs, la construction numérique de ces particules est facile et l'espace utilisé en mémoire pour stocker leur géométrie est relativement faible.

La Fig. 3.3 montre plusieurs exemples d'icosaèdres tronqués où on voit des exemples de discrétisation avec différents nombres de cellules et une valeur du paramètre de désordre $\lambda = 0.25$. On y voit également des polyèdres composés de $n_{cl} = 250$ cellules mais avec différentes valeurs de λ . Il est important de signaler que dans le cas d'un assemblage de grains sécables sous chargement, la taille initiale des grains et la taille de leur cellules vont déterminer les limites supérieure et inférieure de la distribution granulométrique.

3.1.2 Loi d'interaction entre cellules

Avec une discrétisation en cellules de Voronoï, les faces des cellules voisines sont confondues et elles sont représentées toujours par trois points de contact. Pour assurer la cohésion d'un grain, il faut introduire des forces d'adhésion entre cellules via des interactions cohésives normales et tangentielles sur leurs faces communes. Les contacts entre cellules peuvent alors s'ouvrir si les forces normales ou tangentielles atteignent respectivement le seuil f_n^c ou f_t^c . Nous allons supposer que le seuil en traction pour chaque point de contact est donné par $f_n^c = C_n S/3$ où C_n est la résistance en traction du matériau et S est la surface de contact. De la même manière, le seuil en force est donné par $f_t^c = C_t S/3$ où C_t est la résistance en cisaillement dans la direction tangentielle. Nous supposons aussi que C_n et C_t sont des paramètres indépendants. Lorsqu'une force inter-cellulaire atteint l'un des deux seuils, un plan de rupture est créé entre les deux cellules et leur interaction est régie par la loi de contact frottante avec un coefficient de frottement μ_{cl} .

Dans le cadre de la méthode CD, les contacts cohésifs entre cellules sont traités en

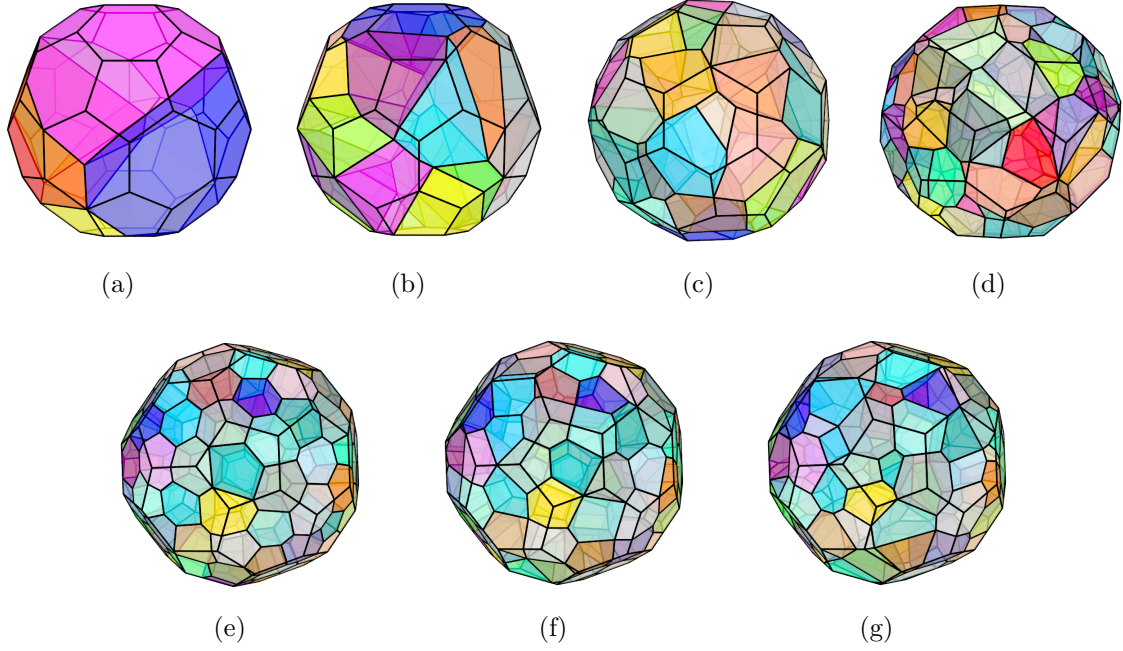


FIGURE 3.3 – Exemples de grains composés de (a) 5, (b) 25, (c) 60, (d) 250 cellules avec $\lambda = 0.25$. En bas, grains composés de 250 cellules et $\lambda = 0.005$ (e), $\lambda = 0.05$ (f) et $\lambda = 0.5$ (g).

ajoutant à chaque point de contact la force seuil aux conditions de Signorini et de frottement de Coulomb :

$$\begin{cases} u_n > 0 & \Rightarrow f_n = 0 \\ u_n = 0 & \Rightarrow f_n + C_n S/3 > 0 \end{cases}, \quad (3.3)$$

et

$$\begin{cases} u_t > 0 & \Rightarrow f_t = -C_t S/3 \\ u_t = 0 & \Rightarrow -C_t S/3 \leq f_t \leq C_t S/3 \\ u_t < 0 & \Rightarrow f_t = C_t S/3 \end{cases}. \quad (3.4)$$

La Fig. 3.4 montre ces relations de complémentarité sous forme de graphes.

La construction des grains à partir du maillage de Voronoï 3D et les lois d'interaction entre cellules ont été implantées sur la plate-forme logicielle LMGC90.

3.2 Compression de grains individuels

Avant de considérer la compaction des assemblages de grains, nous allons étudier dans cette section la fragmentation d'un grain de rayon moyen R placé entre deux parois rigides comme dans un essai brésilien. Les deux parois sont placées de part et d'autre du polyèdre sur les faces hexagonales. Sur la plaque supérieure une charge contrôlée f_a est appliquée de

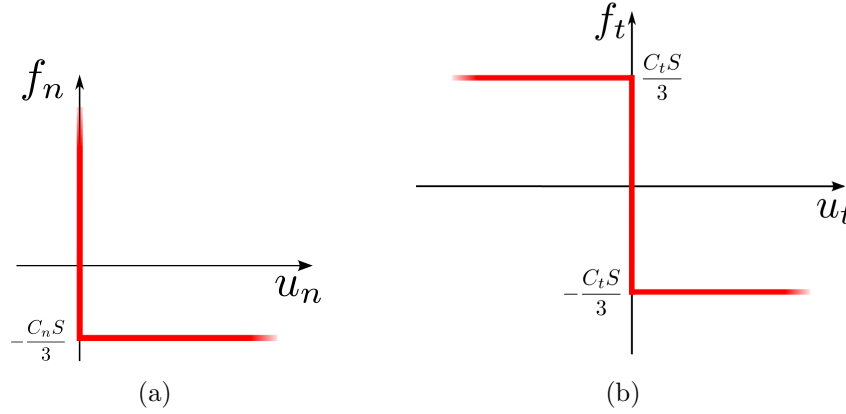


FIGURE 3.4 – Loi de contact cohésif dans la directions (a) normale et (b) tangentielle dans le repère de contact.

telle sorte que les forces de contact entre les cellules augmentent graduellement. Néanmoins, les particules étant parfaitement rigides, aucune déformation n'a lieu tant que les forces inter-cellulaires n'atteignent l'un des deux seuils en contraintes. Lorsqu'une charge critique f_c est atteinte, des contacts inter-cellulaires commencent à céder et le grain se fragmente en plusieurs morceaux.

La Fig. 3.5 montre quelques instantanés d'une particule lors de sa fragmentation. On voit que le mode et l'évolution des ruptures est en bon accord avec des expériences physiques où, typiquement, des fissures verticales se développent graduellement ; voir par exemple Ref. [156]. La fragmentation qui suit est un processus fortement dynamique qui demande un contrôle fin du déplacement des parois, mais étant donné que l'on s'intéresse à la résistance f_c des grains, nous arrêtons le chargement dès que la particule commence à s'effondrer.

La contrainte compressive moyenne dans la direction du chargement pour la plus grande section du grain d'aire $\simeq \pi R^2$ est approximativement donnée par $f_a/\pi R^2$. Cependant, la contrainte maximale en traction est inconnue et elle peut être plus grande que la contrainte en compression. De plus, une distribution hétérogène des forces de contact entre cellules est toujours observée lors du chargement même si un grand nombre de cellules est utilisé, comme cela est illustré sur la Fig. 3.6. Les forces compressives sont alignées préférentiellement dans la direction du chargement alors que les forces de traction sont orientées plutôt dans le plan transversal au chargement.

À l'aide du tenseur des contraintes de l'assemblage de cellules, nous pouvons montrer que la contrainte verticale moyenne σ_z^c est donnée par

$$\sigma_z^c = \frac{1}{V} \sum_{\alpha \in V} f_z^\alpha \ell_z^\alpha, \quad (3.5)$$

où V est le volume du grain, α est l'identifiant de chaque contact entre cellules, f_z est la composante verticale de la force de contact, et ℓ_z est la composante verticale des vecteurs

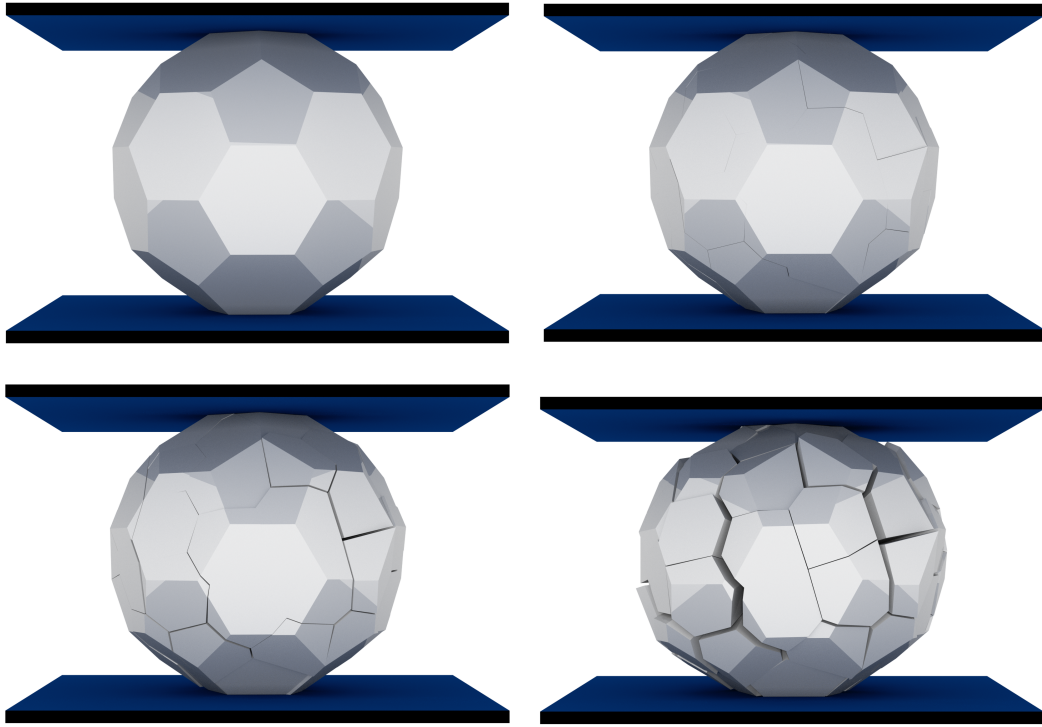


FIGURE 3.5 – Instantanés d'un grain composé de 75 cellules lors de sa fragmentation. La formation de fissures plutôt orientées dans la direction du chargement est visible ainsi que leur propagation et l'augmentation de leur épaisseur.

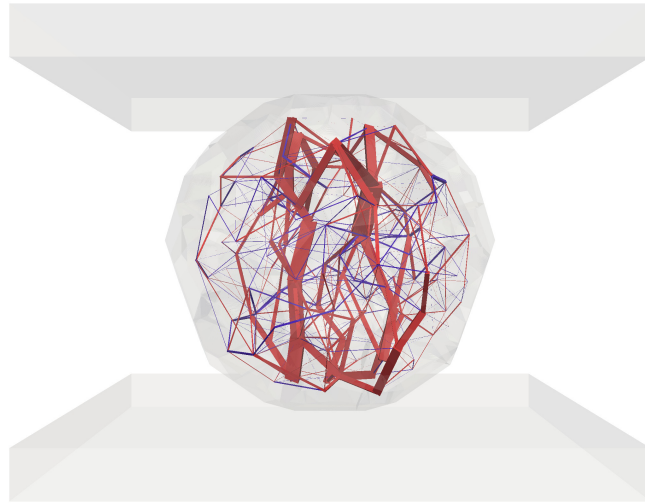


FIGURE 3.6 – Distribution des forces entre cellules pour un grain composé de 150 cellules. L'épaisseur des traits est proportionnelle à la force normale aux contacts. Les traits rouges correspondent à des forces compressives tandis que les traits bleues sont des forces en traction.

branche entre les cellules. Il est à noter également que, afin d'éviter des gradients dus aux poids propres des cellules, la force de gravité est fixée à 0 dans nos simulations.

3.2.1 Effet des paramètres géométriques du maillage

Nombre de cellules

Pour étudier l'influence des paramètres numériques sur la fragmentation des grains, dans cette partie nous allons analyser l'effet du nombre de cellules n_{cl} sur la résistance mécanique d'un grain. La résistance entre cellules est fixée à $C_n = C_t = 1$ MPa, le désordre géométrique est $\lambda = 0.25$, et le coefficient de frottement est $\mu_{cl} = 0.4$. Les valeurs de ces paramètres correspondent à une résistance à la traction typique de minerais fragiles [98] et à un coefficient de frottement d'un matériau granulaire faiblement anguleux. De même, la valeur de λ assure une bonne répartition des formes et tailles des cellules et, comme on verra plus bas, elle évite aussi la formation des colonnes avec une forte concentration des forces de contact.

La Fig. 3.7 montre la résistance verticale σ_z^c normalisée par la résistance interne C_n en fonction de n_{cl} . Chaque point sur la figure est une moyenne sur 10 essais de compression effectués sur des grains qui diffèrent seulement par la configuration spatiale des cellules. Les barres d'erreur représentent les valeurs maximales et minimales pour chaque groupe de simulations.

On remarque d'abord une grande variabilité de résultats, particulièrement pour les grains composés d'un petit nombre de cellules. Cette grande variabilité pour des grains à petit nombre de cellules reflète l'hétérogénéité des forces entre cellules. En effet, il peut arriver que le grain se fragmente complètement à cause de la rupture d'un unique contact entre cellules. Les valeurs moyennes pour les grains à petit nombre de cellules peuvent donc conduire à des cas de rupture exceptionnelle.

Néanmoins, on peut noter que la résistance moyenne augmente avec n_{cl} et devient indépendante de ce paramètre pour des grains composés d'au moins $\simeq 40$ cellules. La valeur de la résistance en compression se stabilise autour $1.25C_n$. Si l'on imagine un grain en traction dont les contacts entre cellules sont alignés, on devrait retrouver C_n comme la résistance à la traction du grain, ce qui montre que la résistance à la compression n'est pas simplement contrôlée par la résistance à la traction entre cellules. Nous allons voir plus bas comment d'autres paramètres tels que la géométrie des cellules et leur configuration influencent la valeur de la résistance à la compression.

Désordre géométrique λ

Pour identifier l'effet de λ sur la résistance à la compression, nous considérons des grains composés de 150 cellules et d'un degré de désordre géométrique variant dans l'intervalle $[0, 1]$. La Figure 3.8 montre la résistance verticale normalisée σ_z^c/C_n en fonction de λ . Pour les valeurs de λ comprises entre 0 et 0.05, la résistance diminue très rapidement. Après une

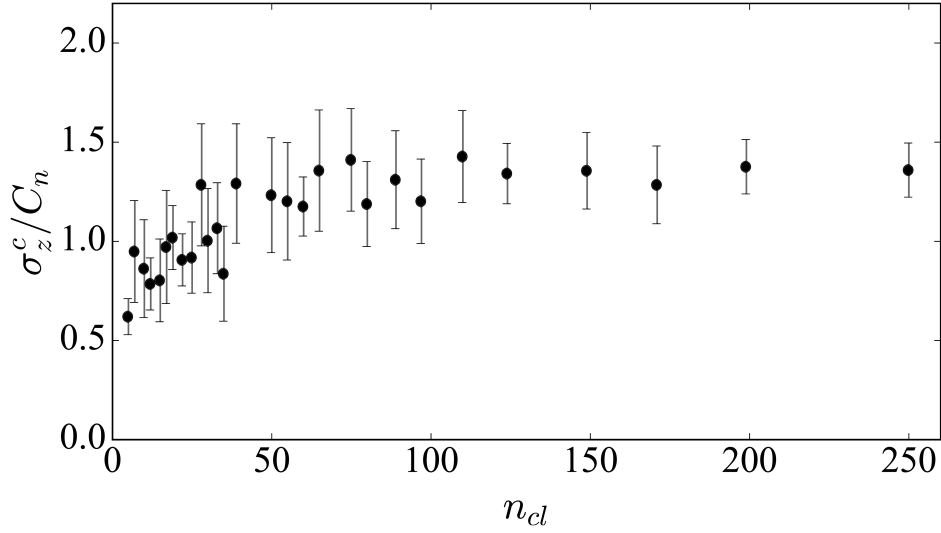


FIGURE 3.7 – Évolution de la tenue mécanique en fonction du nombre de fragments potentiels. Chaque point représente une moyenne sur au moins 10 configurations différentes des cellules et les barres d'erreur représentent les valeurs maximales et minimales obtenues.

variation non linéaire, la résistance tend vers une valeur pratiquement constante de $1.25C_n$ pour des valeurs de $\lambda \geq 0.2$.

La forte variation de la résistance à la compression observée entre $0 \lesssim \lambda \lesssim 0.1$ s'explique par le fait que pour les faibles valeurs de λ la configuration des cellules au sein des grains est très ordonnée. Ces configurations présentent une faible variabilité d'orientation des contacts, ce qui leur permet de supporter une charge importante au travers des arrangements de cellules en forme de colonnes. En conséquence, les forces de traction dans la direction latérale sont beaucoup plus faibles. Mais, lorsque λ augmente, la charge est transmise d'une manière plus homogène et les forces de traction qui en résulte dans la direction latérale sont plus importantes ; voir Fig. 3.9.

3.2.2 Effet des paramètres mécaniques

Nous allons à présent nous concentrer sur la variabilité de la résistance à la compression des grains en fonction des paramètres mécaniques C_n , C_t et μ_{cl} entre cellules. Nous étudierons également l'effet que des pré-fissures peuvent avoir sur la résistance mécanique. Dans ce qui suit, nos grains sont discrétisés en 150 cellules avec $\lambda = 0.25$, ce qui devrait suffire pour assurer une bonne représentativité des résultats.

Contraintes inter-cellulaires

Étant donné que les contraintes et les forces à l'intérieur de la particule se mettent à l'échelle avec la force appliquée, on s'attend naturellement à ce que la résistance ma-

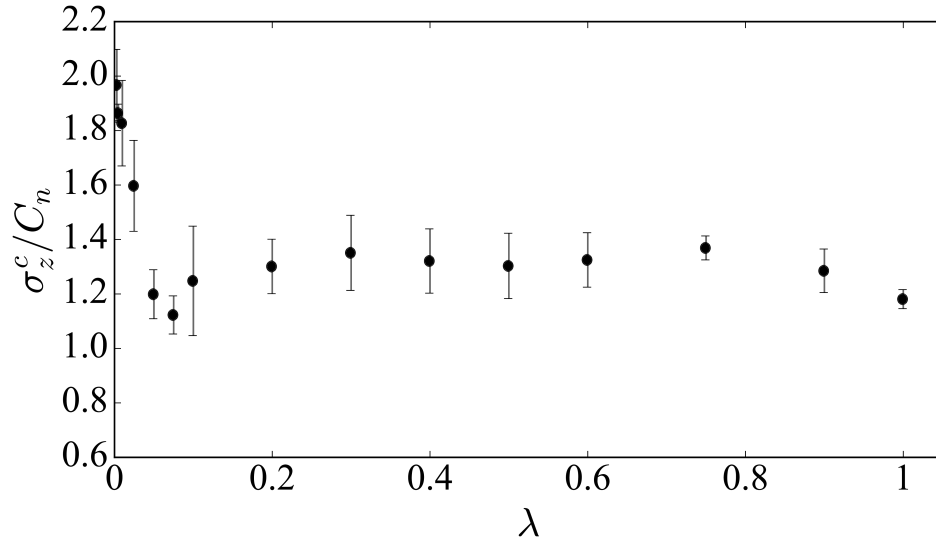


FIGURE 3.8 – Évolution de la résistance des grains en fonction du degré de désordre géométrique λ . Chaque point représente la valeur moyenne pour au moins 10 simulations et les barres d'erreur montrent les valeurs maximales et minimales.

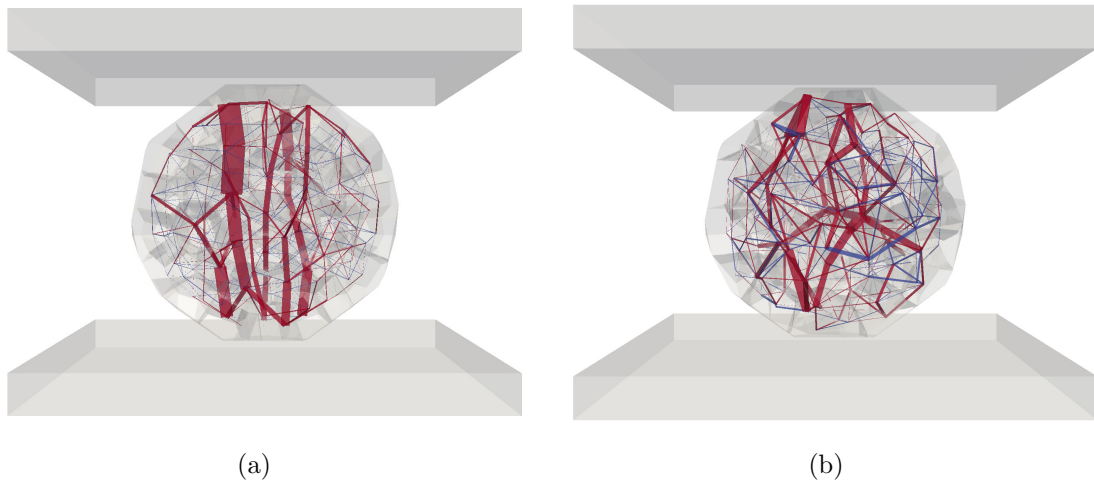


FIGURE 3.9 – Instantanés de deux grains composés de 150 cellules dont l'irrégularité des cellules varie entre (a) $\lambda \simeq 0$ et (b) $\lambda = 1$. Les barres rouges montrent des forces en compression et les barres bleues les forces en traction. Leur épaisseur est proportionnelle à la force normale au contact.

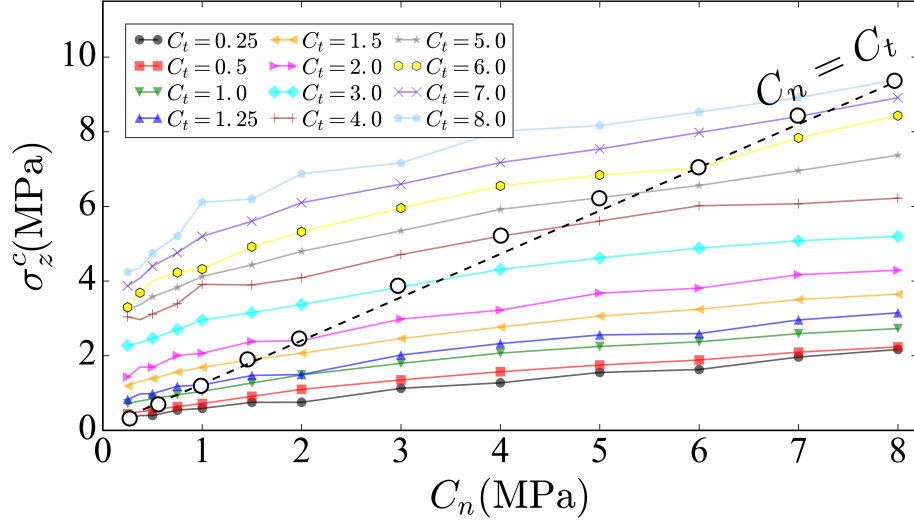


FIGURE 3.10 – Évolution de la résistance des grains en fonction de la résistance normale entre cellules C_n pour différentes valeurs de la résistance tangentielle C_t . Les cercles montrent les valeurs de la résistance pour $C_n = C_t$ dont la pente est $\simeq 1.25$.

croscopique de la particule soit une fonction linéaire de la résistance à la traction C_n des contacts intercellulaires. Néanmoins, nous nous attendons également à ce que la contrainte de cisaillement C_t joue un rôle crucial puisqu'il suffit que le contact glisse pour que les contraintes internes (normales et tangentielles) s'annulent à ce contact. Ainsi, pour explorer les rôles respectifs de C_t et C_n , nous avons réalisé un grand nombre de simulations en faisant varier ces deux paramètres de 0.25 à 8 MPa.

La Fig. 3.10 montre l'évolution de la résistance des grains en fonction de C_n pour différentes valeurs de C_t . Chaque point sur la figure représente une moyenne sur au moins 10 simulations indépendantes. On observe une relation non linéaire entre la résistance d'un grain et les deux paramètres de résistance entre cellules. Pour des faibles valeurs de C_n , σ_z^c est plutôt faible mais il peut augmenter d'un facteur 20 aux plus grandes valeurs de C_t . Par contre, pour des valeurs les plus élevées de C_n , σ_z^c varie juste d'un facteur 4 pour la même augmentation de C_t . Cela suggère que, bien que C_n et C_t soient découplées dans le modèle numérique, l'effet de C_t dépend de C_n . La même figure montre que la résistance des grains augmente de manière linéaire lorsque $C_n = C_t$ avec un coefficient de proportionnalité de $\simeq 1.25$.

Le comportement non linéaire observé sur la Fig. 3.10 peut être attribué au changement du mode de rupture des contacts qui dépend du rapport C_t/C_n . Pour des petites valeurs de C_t par rapport à C_n , la rupture par glissement entre cellules nécessite moins d'énergie, ce qui favorise la rupture par glissement. Pour les grandes valeurs de C_t , le mode de rupture par traction domine la rupture par perte des contacts cohésifs en traction.

Pour montrer la pertinence de cette analyse, nous avons tracé sur la Fig. 3.11 la résistance normalisée σ_z^c/C_n des grains en fonction du rapport C_t/C_n . Avec cette normalisation

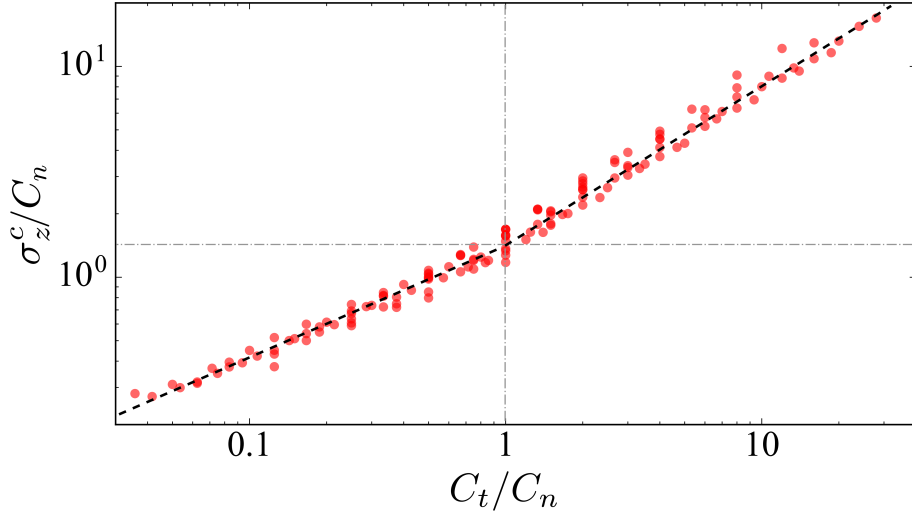


FIGURE 3.11 – Évolution de la résistance des grains normalisée par la résistance à la traction entre cellules en fonction du rapport entre la résistance au cisaillement et la résistance en traction. Les lignes en pointillées montrent des ajustements par une loi de puissance.

toutes les données se mettent sur une courbe unique. On peut y distinguer deux régimes pour $C_t < C_n$ et $C_t > C_n$. Dans les deux régimes σ_z^c/C_n peut être décrit comme loi de puissance en fonction de C_t/C_n mais avec des exposants α et β différents :

$$\frac{\sigma_z^c}{C_n} = 1.25 \times \begin{cases} \left(\frac{C_t}{C_n}\right)^\alpha & C_t \leq C_n \\ \left(\frac{C_t}{C_n}\right)^\beta & C_t > C_n \end{cases} \quad (3.6)$$

où $\alpha \simeq 0.5$ et $\beta \simeq 0.8$.

L'équation 3.6 montre que pour $C_t \leq C_n$, la résistance à la compression peut être réécrite comme $\sigma_z^c = 1.25\sqrt{C_n C_t}$. Cette écriture implique que pour $C_n = C_t$, la résistance à la compression augmente linéairement avec C_n , comme observé également sur la Fig. 3.10. Pour $C_t > C_n$, la relation est de la forme $\sigma_z^c \simeq 1.25 C_n^{0.2} C_t^{0.8}$. Cette relation implique que la résistance d'un grain augmente plus rapidement avec C_t qu'avec C_n . Comme l'exposant β est proche de 1, σ_z^c change de manière quasi-linéaire avec C_t . Ce résultat semble mettre en défaut l'intuition initiale selon laquelle, dans le régime $C_t > C_n$, la rupture des contacts cohésifs en mode traction est privilégiée et donc que c'est C_n qui contrôle la résistance des grains. En d'autres termes, nous observons ici que les forces en traction sont moins activées puisque l'équilibre des forces sur une cellule est de plus en plus assurée par les forces cisailantes. Cet effet est très similaire à celui induit par le frottement dans les milieux granulaires. En particulier, de très nombreuses simulations numériques indiquent que la mobilisation des forces de frottement et l'anisotropie induite par le frottement jouent un rôle bien plus important dans la résistance au cisaillement pour les empilements de grains polyédriques que pour des empilements de sphères [14].

Une campagne de simulations additionnelle a mis en évidence que la résistance d'un grain résulte non nulle pour des valeurs d'adhésion $C_t = 0$ et $C_n > 0$. Bien que la résistance σ_z^c est relativement faible dans tels cas, une étude additionnelle sera nécessaire afin d'évaluer la robustesse de l'Éq. 3.6. Très probablement, on devra ajouter un terme dans l'équation qui décrit le régime $C_t \leq C_n$ afin d'implanter ces derniers résultats.

Frottement inter-cellulaire après décohésion

Avant d'arriver à la charge critique f_c , un nombre important de ruptures de liens cohésifs (fissuration) a lieu à l'intérieur des grains. Ces contacts peuvent éventuellement transmettre une part de la charge et affecter la résistance du grain. Nous avons mené différentes simulations en faisant varier le coefficient de frottement μ_{cl} entre 0 et 1 afin d'explorer son effet. Pour ces simulations, les paramètres C_n et C_t ont été fixés à 1 MPa.

La Fig. 3.12 montre la résistance des grains en fonction de μ_{cl} . Chaque point représente 5 simulations indépendantes et les barres d'erreur montrent les valeurs maximales et minimales. Nous observons un très léger effet du frottement sur la valeur de résistance des grains de sorte que la résistance reste globalement constante avec $\sigma_z^c/C_n \simeq 1.2$. L'effet de μ_{cl} est donc négligeable en comparaison aux liens cohésifs entre cellules. Ces liens cohésifs supportent effectivement des forces de plusieurs ordres de grandeur plus importantes que les contacts frottants.

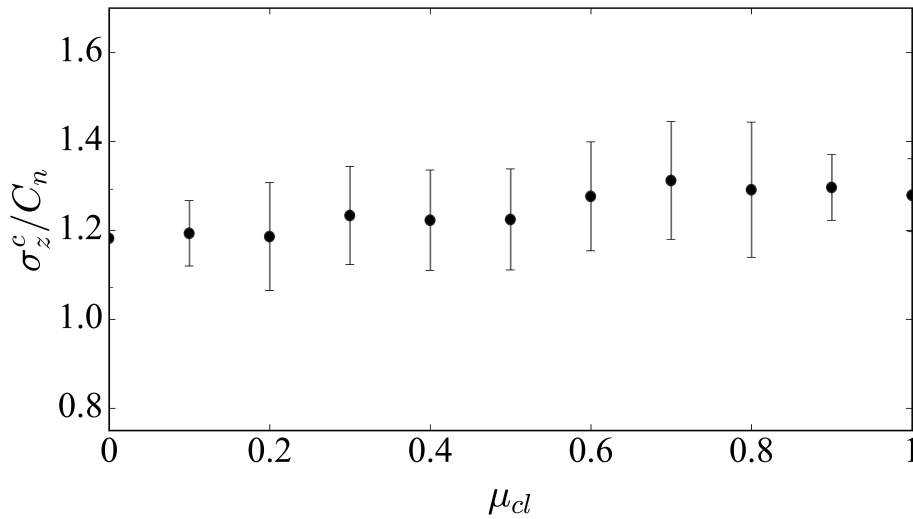


FIGURE 3.12 – Évolution de la résistance des grains normalisée par la résistance à la traction entre cellules en fonction du coefficient de frottement μ_{cl} entre cellules. Les barres d'erreur montrent les valeurs maximales et minimales respectives.

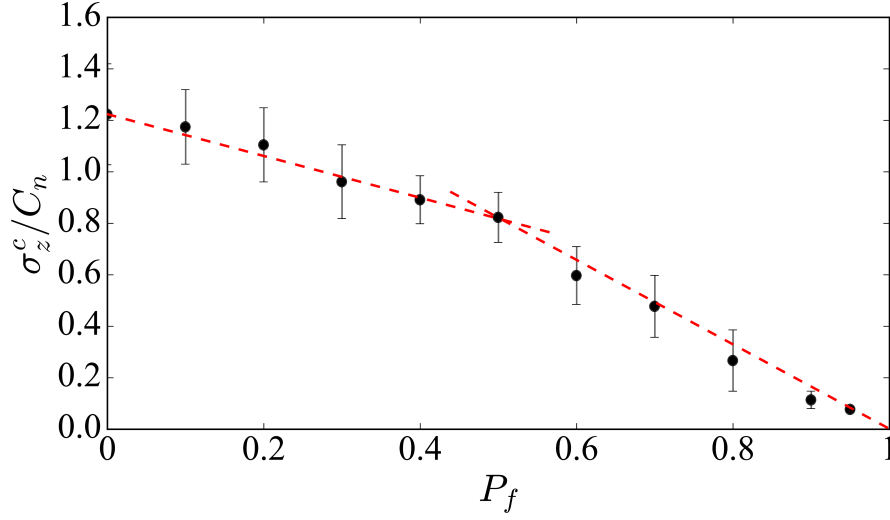


FIGURE 3.13 – Évolution de la résistance des grains normalisée par la résistance à la traction entre cellules en fonction de la proportion P_f de contacts inter-cellulaires supprimés au début de la simulation.

Pré-fissuration des liens cohésifs

Nous avons exploré également l'effet d'inclusion de *pré-fissures* sur la résistance d'une particule. Pour ce faire, nous avons réalisé des simulations numériques en supprimant initialement une certaine fraction de contacts cohésifs. La Fig. 3.13 montre l'évolution de la résistance des grains en fonction de la proportion P_f des contacts pré-fissurés. Comme attendu, on observe une décroissance graduelle de la résistance des grains lorsque P_f augmente. Le taux de diminution de la résistance semble être divisé en deux régimes distincts : l'un entre $0 < P_f < 0.5$ et l'autre pour des valeurs de P_f supérieures. Cette transition autour de 50% de pré-fissures suggère que la percolation du réseau de fissures est centrale dans l'analyse de la résistance des grains fissurés.

La Fig. 3.13 indique en même temps qu'un grand nombre de contacts cohésifs entre cellules sont redondants dans la mesure où le grain garde une résistance relativement importante même en supprimant la cohésion sur 50% des contacts.

Pour aller plus loin dans cette analyse, nous présentons sur la Fig. 3.14(a) le nombre η_b de fragments détachés de la particule originelle en fonction de la proportion de fissures (avant la compression). Étant donné qu'un fragment peut être composé d'une ou plusieurs cellules, nous présentons aussi sur la Fig 3.14(b) le nombre moyen de cellules par fragment normalisé par le nombre total de cellules dans l'agrégat aussi en fonction de P_f . Nous pouvons remarquer que η_b est négligeable tant que $P_f < 0.5$. Au delà, η_b augmente rapidement. Les fragments sont alors composés de plusieurs cellules. C'est au même instant que l'évolution de la résistance en fonction du taux de fissuration subit un changement de comportement comme on l'a vu sur la Fig. 3.13. Ainsi, à partir de $\simeq 50\%$ de fissuration la résistance obtenue n'est plus celle du grain originel mais celle d'un sous-ensemble connexe

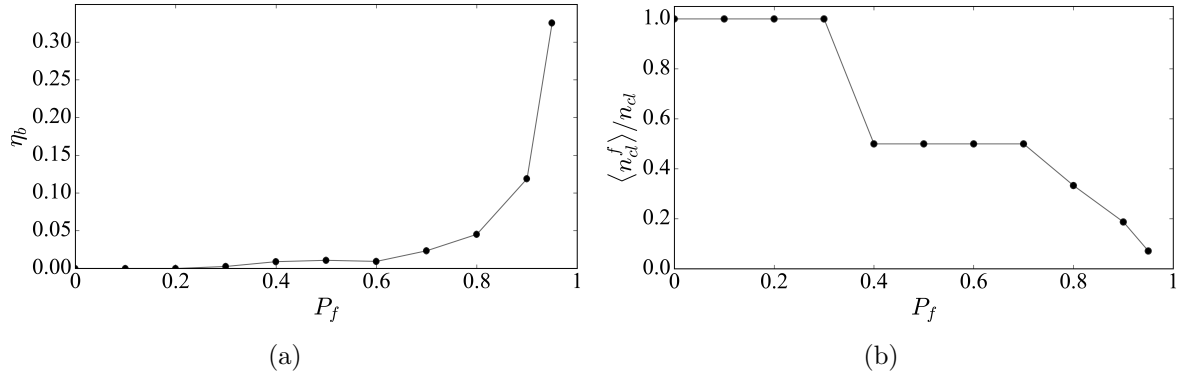


FIGURE 3.14 – (a) Évolution du nombre de fragments détachés du grain, normalisé par le nombre total de cellules en fonction de la proportion de contacts fissurés; (b) le nombre moyen de cellules par fragment détaché normalisé par le nombre total de cellules de la particule intacte.

de cellules.

Variabilité de la résistance des grains

Les analyses présentées ci-dessus portent sur des valeurs moyennes obtenues à partir de plusieurs configurations indépendantes. Or, des fluctuations de résistance sont observées et les particules peuvent survivre sous la charge appliquée alors même que la contrainte de compression est supérieure à la résistance entre cellules. Ces fluctuations sont aussi observées dans des expériences menées sur des roches et des agglomérats de particules fines [85, 67]. De telles fluctuations reflètent la présence et la répartition des défauts (géométrique ou mécanique) au sein des particules. Leur présence va induire des concentrations de contraintes lesquelles peuvent varier en fonction du rapport entre la taille moyenne des défauts et la taille des grains [98, 104].

Dans nos simulations, la taille des particules est constante et le nombre n_{cl} des cellules varie dans une gamme limitée de valeurs, de sorte que les plus grands agrégats contiennent seulement 250 cellules. Ce nombre est petit pour permettre une analyse de l'effet de taille. Pour cette raison, dans ce qui suit nous nous concentrons sur la variabilité de la résistance seulement pour les particules composées de 150 cellules. Sur ces particules, nous pouvons effectuer une analyse approximative de la probabilité de survie P_s ; voir Sec. 1.2.1.

La Fig. 3.15 présente la probabilité P_s en fonction de la charge appliquée σ_h normalisée par C_n . Ces résultats correspondent au cas où $C_n = C_t$. Cette représentation en échelle log-log est en accord avec la distribution de Weibull :

$$P_s(\sigma_h) = e^{-(\sigma_h/\sigma_0)^m}, \quad (3.7)$$

où $\sigma_0 = kC_n$ est un paramètre d'échelle, et m est le module de Weibull. À partir des simulations, on trouve $m \simeq 2$. Cette valeur est inférieure à celles trouvées dans des expériences

où m varie entre 3 et 10 [67, 98, 85]. Cette faible valeur de m indique que la contrainte de rupture présente une variabilité importante autour de sa valeur moyenne et une prédiction de la charge limite d'un grain devra inclure une marge d'erreur conséquente.

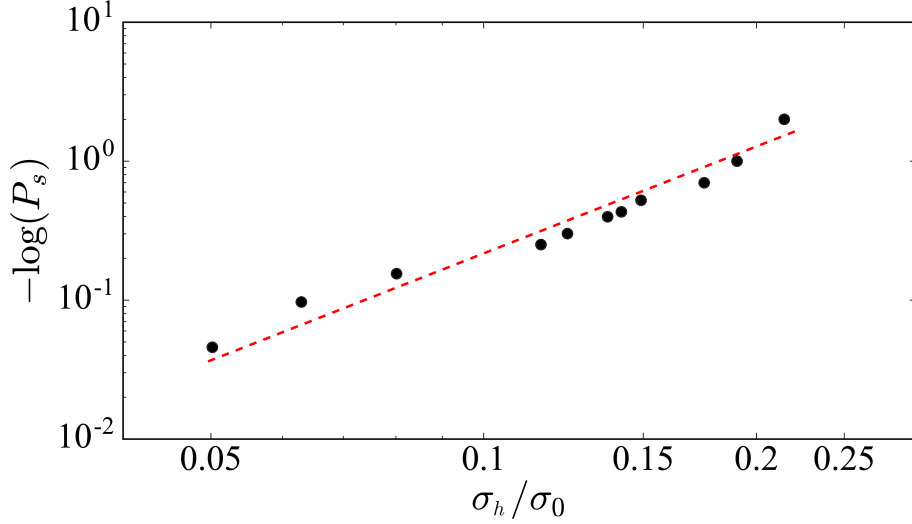


FIGURE 3.15 – Probabilité de survie des grains composés de 150 cellules en fonction de la contrainte moyenne appliquée.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'abord présenté le modèle de fragmentation 3D développé dans le cadre de la méthode de Dynamique des Contacts. Ce modèle est fondé sur la discrétisation des grains en cellules polyédriques via une tessellation de Voronoï. Les cellules interagissent au travers d'une cohésion normale C_n et une adhérence tangentielle C_t . Ce modèle est une extension au cas 3D du modèle de *cellules liées* (BCM pour Bonded Cell Method).

Ensuite, une étude systématique et détaillée sur l'effet des paramètres du modèle a permis de mettre en évidence plusieurs effets :

1. La résistance des particules à la rupture augmente avec le nombre de cellules et se stabilise à environ 1.25 fois la contrainte normale en traction.
2. Au fur et à mesure que le désordre géométrique (quantifié par un degré d'irrégularité sur la forme des cellules de Voronoï) augmente, la résistance à la rupture diminue et se stabilise à valeur bien définie.
3. La résistance à la rupture, normalisée par la contrainte normale en traction, augmente en fonction du rapport C_t/C_n , définissant deux régimes séparés par $C_t/C_n = 1$.
4. Dans les deux régimes, la résistance à la rupture augmente en loi de puissance.

5. Les fluctuations de la résistance des particules sont compatibles avec la statistique de Weibull.

Ces études préliminaires nous ont permis d'optimiser le choix des paramètres numériques et mécaniques afin d'étudier la compaction des assemblages de grains sécables soumis à la compression uniaxiale. C'est ce que nous allons présenter dans le chapitre suivant.

“ It is like being lost in a jungle and trying to use all the knowledge that you can gather to come up with some new tricks, and with some luck you might find a way out. ”

M. Mirzakhani

Chapitre 4

Compaction uniaxiale d’assemblages de grains sécables

Dans ce chapitre, nous appliquons la méthode de cellules collées à l’étude d’assemblages composés d’un grand nombre de grains (eux-mêmes discrétisés en cellules), soumis à une compression verticale. Nous nous intéressons à la variation de la compacité, à l’évolution de la distribution des tailles de particules et à la transmission des efforts en fonction de résistance interne des particules. L’objectif est d’obtenir une description microscopique du processus de compaction et du rôle de la fragmentation des particules.

Sommaire

4.1	Procédures numériques	71
4.2	Comportement macroscopique	72
4.2.1	Charge, déformation et volume	72
4.2.2	Évolution des tailles des particules	74
4.2.3	Coefficient de pression latérale	78
4.3	Microstructure	80
4.3.1	Production de fragments	80
4.3.2	Connectivité	81
4.3.3	Évolution des formes de fragments	84
4.3.4	Transmission des contraintes	88
	Conclusion	90

4.1 Procédures numériques

Dans cette section, nous allons présenter des simulations et analyses du comportement d'assemblages de grains sécables sous chargement uniaxial confiné. Ces assemblages ont été préparés en déposant entre 1,000 et 2,500 dodécaèdres dans une boîte de forme cubique à l'aide d'un algorithme de dépôt géométrique par couches successives [148]. La distribution des tailles des particules est quasi-monodisperse. Ces assemblages sont d'abord soumis à une compression isotrope en appliquant des contraintes constantes sur les 6 parois de la boîte. Pendant cette phase, le coefficient de frottement et la gravité sont fixés à 0 pour assurer l'homogénéité macroscopique de l'échantillon. La compression isotrope est arrêtée lorsque le volume de la boîte et les forces de contact tendent vers une valeur constante avec des variations inférieures à 1% par rapport à leurs valeurs moyennes. Dans cet état, on considère que le système a atteint l'équilibre.

Une fois stabilisé, les parois latérales et inférieures sont bloquées. Chaque particule est alors divisée en $n_{cl} \in [10, 30]$ cellules avec $\lambda = 0.25$. Cette valeur de λ assure un comportement en rupture pratiquement indépendant de la distribution des cellules, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent. Dans tous les essais, nous avons choisi $C_n = C_t$ et le coefficient de frottement pour les contacts non cohésifs (rompus) entre cellules est fixé à $\mu_{cl} = 0.4$. Nous avons réalisé trois simulations de compaction avec trois valeurs de $C_n = C_t$: 0.1, 1 et 10 MPa. Nous allons utiliser la contrainte $\sigma_r = 1$ MPa comme contrainte de référence, et donc la résistance interne des grains dans les trois essais sont respectivement les multiples $0.1\sigma_r$, σ_r et $10\sigma_r$.

Le coefficient de frottement entre les particules est aussi fixé à 0.4 alors que celui avec les parois est nul afin de minimiser l'effet des parois sur le comportement de l'assemblage. La compression uniaxiale est effectuée via la compression d'un ressort superposé à la paroi supérieure et comprimé à une vitesse constante v_h ; voir Fig 4.1. Il est à noter que l'emploi d'un ressort a pour objectif d'exercer une force qui augmente graduellement, mais aussi d'éviter des cascades de fragmentations des particules en permettant à la force exercée sur la paroi supérieure de diminuer lors de tels événements. La raideur du ressort a été fixée de telle sorte que, à chaque pas de temps, l'augmentation de la contrainte axiale liée à un déplacement $v_h \delta t$ soit inférieure à $0.001\sigma_r$. La déformation verticale cumulée est définie comme $\varepsilon_h = \delta_h/h_0$ où δ_h est le déplacement de la paroi supérieure et h_0 est la hauteur initiale de la boîte.

Il est important de signaler que ces simulations sont très coûteuses en temps de calcul. Par exemple, dans le cas de l'échantillon composé de 1,000 particules et 10 cellules par particule, le nombre d'interactions cohésives s'élève à $\simeq 60,000$ au début de la compaction. Si on prend en compte les contacts frottants entre grains et avec les parois, on trouve au

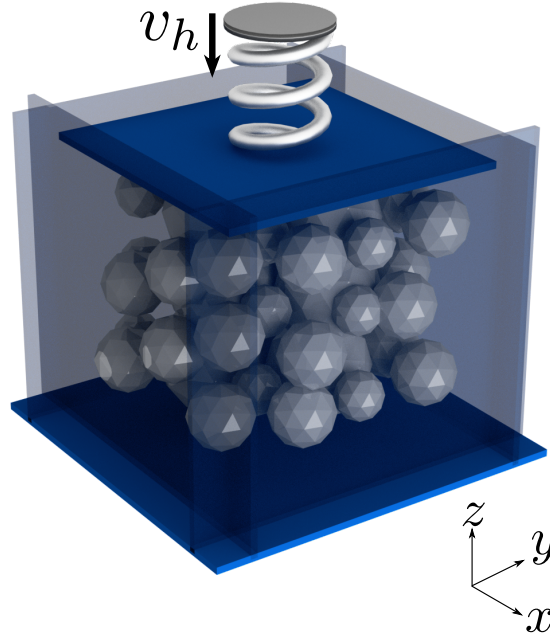


FIGURE 4.1 – Schéma de la configuration géométrique et des conditions limites des essais de compaction uniaxiale.

total 110,000 interactions. D'ailleurs, on a observé qu'en moyenne l'algorithme de résolution des contacts effectue entre 600 et 2,000 itérations sur toute la liste d'interactions pour converger vers une solution qui atteint les critères *typiques* de convergence dans la simulation de corps polyédriques. Dans le cas de l'échantillon composé de 2,500 particules et 30 cellules par particule, le nombre d'interactions cohésives peut s'élever à 300,000.

Sur les Figs. 4.2 (a) et (b), nous présentons l'échantillon de 1000 particules au début et à la fin du chargement. Les Figs. 4.2 (c) et (d) montrent l'échantillon de 2,500 particules. Pour ce dernier cas, la première image correspond au début de la simulation alors que la deuxième montre l'état le plus avancé qui a été possible d'obtenir avec la puissance de calcul et le temps disponibles depuis le lancement des simulations en troisième année de thèse. Dans ce qui suit, nous présentons les résultats uniquement dans le cas de l'échantillon composé de 1,000 particules.

4.2 Comportement macroscopique

4.2.1 Charge, déformation et volume

La Fig. 4.3 montre la déformation verticale en fonction de la contrainte axiale σ_h normalisée par σ_r dans les trois essais avec $C_n = C_t \in [0.1, 1.0, 10.\text{MPa}]$. La vitesse de poussée v_h est la même dans les trois cas.

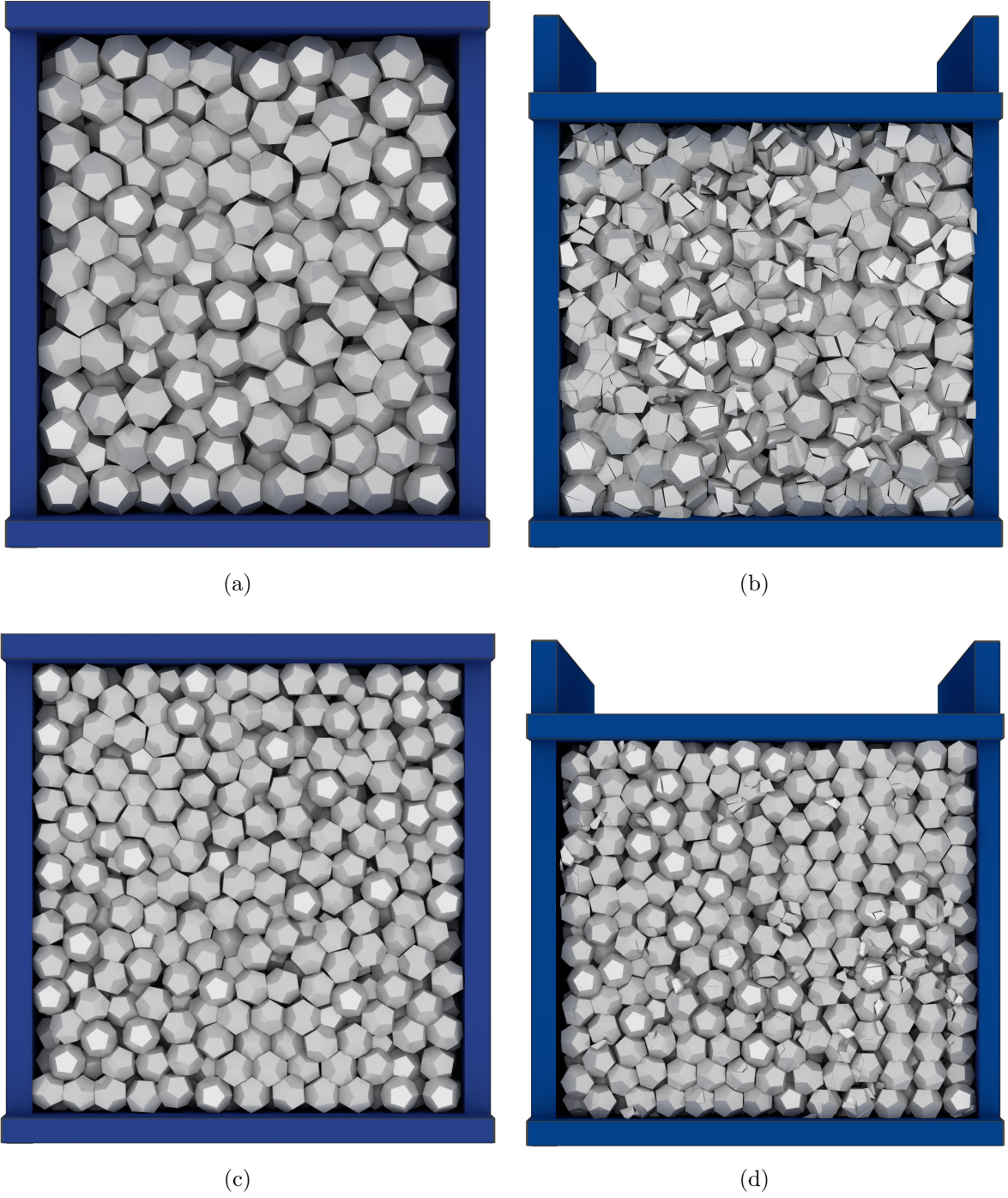


FIGURE 4.2 – Instantanés d'un échantillon composé de 1,000 particules et 10 cellules par particule (a) au début de la compaction et (b) pour une déformation $\varepsilon_h \simeq 15\%$, et d'un échantillon composé de 2,500 particules et 30 cellules par particule (c) au début du chargement et (d) pour une déformation $\varepsilon_h \simeq 9\%$.

L'évolution de la déformation est non linéaire à deux niveaux : 1) au niveau de la tendance globale et 2) au niveau des petites déformations. Au niveau de la tendance globale, on peut distinguer trois régimes successifs. Pour $C_n = C_t = 0.1\sigma_r$ et σ_r , on observe une augmentation rapide de la déformation jusqu'à une valeur de l'ordre de $\varepsilon_h \simeq 0.04$. Puis, une augmentation moins rapide (taux de déformation plus faible) est observée jusqu'à $\varepsilon_h \simeq 0.1$, suivie d'un régime asymptotique avec une évolution encore plus lente malgré une augmentation continue de la contrainte. Pour $C_n = C_t = 10\sigma_r$, on observe une relation quasi-linéaire jusqu'à $\sigma_h \simeq \sigma_r$ suivie d'une évolution plus rapide dans le deuxième régime et puis un régime asymptotique marqué par un taux similaire aux cas précédents.

Au niveau des petites déformations, l'évolution de la contrainte axiale passe par des phases d'augmentation continue suivies de relaxations rapides qui reflètent les événements de glissement ou de ruptures des particules dans l'échantillon. Un exemple est présenté dans l'encart de la Fig. 4.3. Pour une évolution régulière de la déformation, il est nécessaire que le temps de relaxation de ces événements soit petit devant celui du ressort, ce qui est le cas pour les trois valeurs de résistance interne. Pour montrer que ces événements impliquent des ruptures des particules, nous avons présenté sur la Fig. 4.4 l'ensemble de fragments produits pendant le laps de temps indiqué sur l'encart. Les grains en gris foncé sont les particules originelles qui ont donné naissance à des fragments marqués en rouge. On voit que des ruptures se produisent dans tout l'échantillon.

Afin de comparer ces courbes avec celles souvent présentées en mécanique des sols, il est intéressant de représenter les mêmes données sous la forme de l'évolution de l'indice des vides, défini comme $e = V_v/V_s$, où V_v est le volume des vides interstitiels et V_s est le volume des particules. La Fig. 4.5 montre e en fonction de la charge axiale σ_h . Avec cette représentation, nous pouvons distinguer une première étape de réduction de volume, suivie d'un régime de transition, et enfin un régime de diminution rapide de l'indice des vides. L'aspect global de ces courbes (en échelle semi-logarithmique) est assez proche de celles obtenues expérimentalement sur les sols.

En particulier, le régime asymptotique correspond ici à une relation presque logarithmique entre l'indice des vides et la contrainte exercée. Pour les deux premiers régimes, nos courbes reflètent aussi les effets de taille fini et les effets liés à la présence des parois. Le régime asymptotique résulte clairement de la fragmentation continue des particules et de leurs déplacements permettant aux fragments de petites tailles engendrés pendant la compaction de remplir progressivement les pores laissées entre les fragments de plus grandes tailles. Sans ruptures des particules, l'indice des vides ne peut guère descendre sous la barre de 0.5. Pour mieux comprendre ces tendances, nous allons étudier l'évolution des tailles des particules.

4.2.2 Évolution des tailles des particules

La Fig. 4.6 montre l'évolution de la taille moyenne $\langle d \rangle$ des particules normalisée par le diamètre maximum dans l'échantillon en fonction de la contrainte axiale. La taille moyenne est calculée à partir du diamètre équivalent de chaque agrégat ou fragment dont le volume

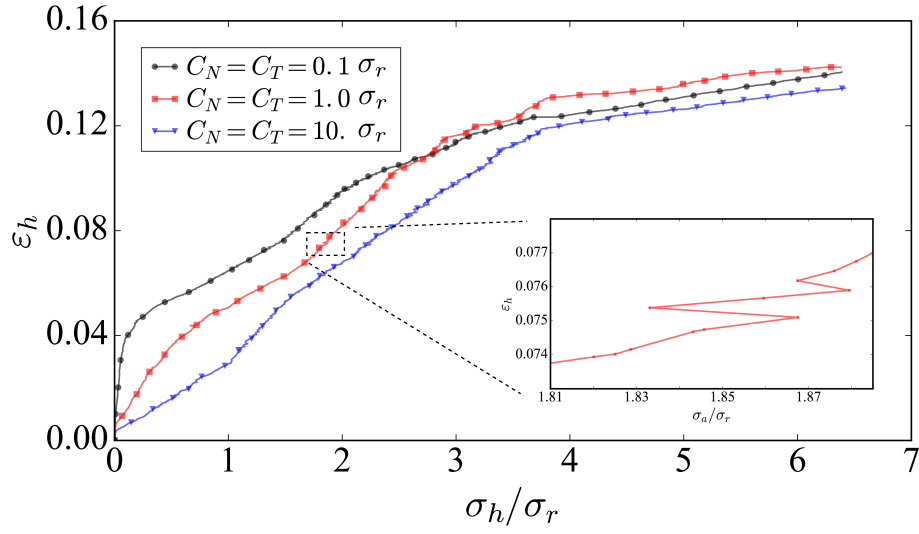


FIGURE 4.3 – Évolution de la déformation axiale en fonction de la charge exercée. L'encart montre un zoom sur un événement de déformation rapide.

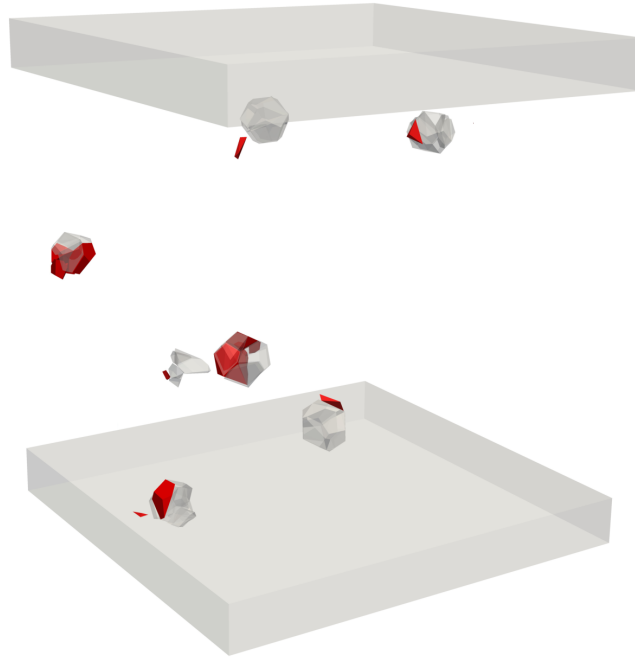


FIGURE 4.4 – Instantané de l'échantillon avec $C_n = C_t = 1.0\sigma_r$, au début d'un événement de fragmentation. Les particules en couleur rouge sont les nouveaux fragments pendant la courte période indiquée sur l'encart. En couleur gris claire sont présentés les agrégats originels qui ont donné naissance à des fragments.

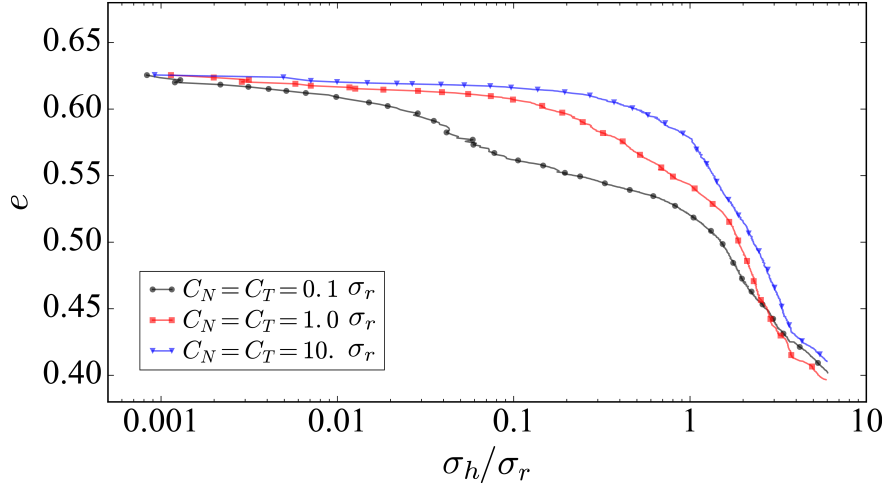


FIGURE 4.5 – Évolution de l'indice de vides en fonction de la contrainte axiale.

est toujours connu. On observe que des événements de rupture se produisent dès le début de la compaction malgré le faible niveau de contraintes. Mais pour une résistance interne plus faible des grains, le taux de réduction initiale des tailles est plus important. Par ailleurs, on s'attendait à voir que pour $C_n = C_t = 10\sigma_r$, les grains ne commencent à se fragmenter que pour des valeurs beaucoup plus élevées de la contrainte axiale et que la taille moyenne des grains reste proche de la taille initiale. Or, on observe que non seulement la fragmentation commence dès le début de la compaction, mais que la taille des particules diminue pratiquement avec le même taux que pour les valeurs plus faibles de la résistance interne. Pour cette raison, la taille moyenne ne se met pas à l'échelle (c'est-à-dire les trois courbes ne se superposent pas) lorsqu'on normalise la contrainte axiale par la résistance interne. On verra plus loin que ce phénomène est lié à la forte concentration des contraintes à l'intérieur des grains, ce qui conduit à l'abrasion des grains par rupture en cisaillement et donc une réduction continue mais lente de la taille moyenne des fragments.

La Fig. 4.7 montre la densité de probabilité des tailles des fragments normalisés par le diamètre maximal pour $C_n = C_t = 0.1\sigma_r$ et $C_n = C_t = 10\sigma_r$ à différents instants de la compaction. On voit que la distribution évolue très rapidement d'une distribution quasi-monodisperse vers une distribution avec un mode centré sur $d/d_{\max} \simeq 0.42$ et une longue queue vers les tailles supérieures. Pour cette partie de la courbe, la densité de probabilité peut être approchée par une loi de puissance $\propto d^{-D}$ avec $D \simeq 7/2$, ce qui est cohérent avec les densités de probabilité des tailles représentées en échelle log-log sur la Fig. 4.8. La partie inférieure de la courbe ($d/d_{\max} < 0.4$) évolue cependant très peu. Elle correspond à des fragments composés d'une ou de quelques cellules.

Il est important de noter que la gamme des tailles des fragments due à la tessellation de Voronoï des grains est comprise entre $\simeq 0.16d_{\max}$ et $0.58 d_{\max}$. On trouve fréquemment des fragments composés de deux ou trois cellules. Ces agrégats présentent eux aussi une taille moyenne proche de $\simeq 0.4d_{\max}$. La forme générale de la distribution évolue très peu au

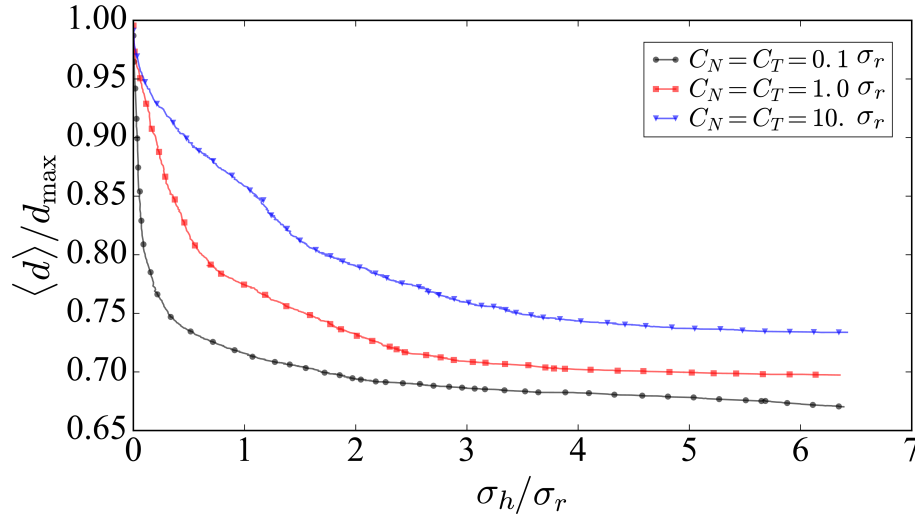


FIGURE 4.6 – Évolution de la taille moyenne des particules en fonction de la contrainte verticale appliquée.

cours de la compaction. Il est également difficile de discerner entre les deux distributions pour $0.1\sigma_r$ et $10\sigma_r$. Ceci indique que les mécanismes locaux de fragmentation des grains sont similaires.

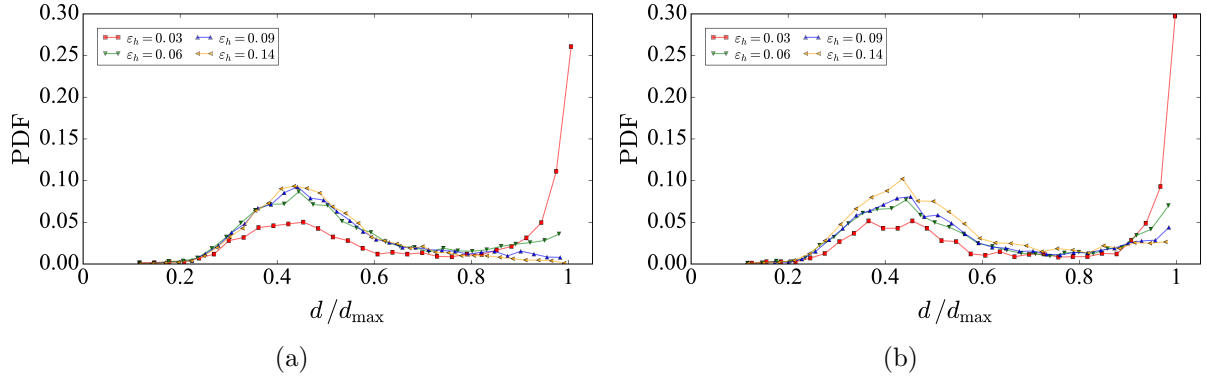


FIGURE 4.7 – La densité de probabilité de la taille de particules normalisée par la taille maximale de particule pour l'échantillon avec (a) $C_n = C_t = 0.1\sigma_r$ et (b) $C_n = C_t = 10.\sigma_r$.

La Fig. 4.9 présente la distribution cumulée $h(d)$ des volumes des particules (distribution granulométrique) à différents instants de la compaction. On observe que, indépendamment de la résistance interne des grains, l'évolution de la courbe est plus rapide pour des fragments de taille supérieure à la taille moyenne $d > 0.5d_{\max}$.

Le degré d'endommagement de l'échantillon peut être aussi quantifié au travers du taux de fragmentation relative B_r ; voir Sec. 1.2.1. La Fig. 4.10 montre l'évolution de cette grandeur en fonction de la déformation axiale dans les trois simulations. Dans tous les cas,

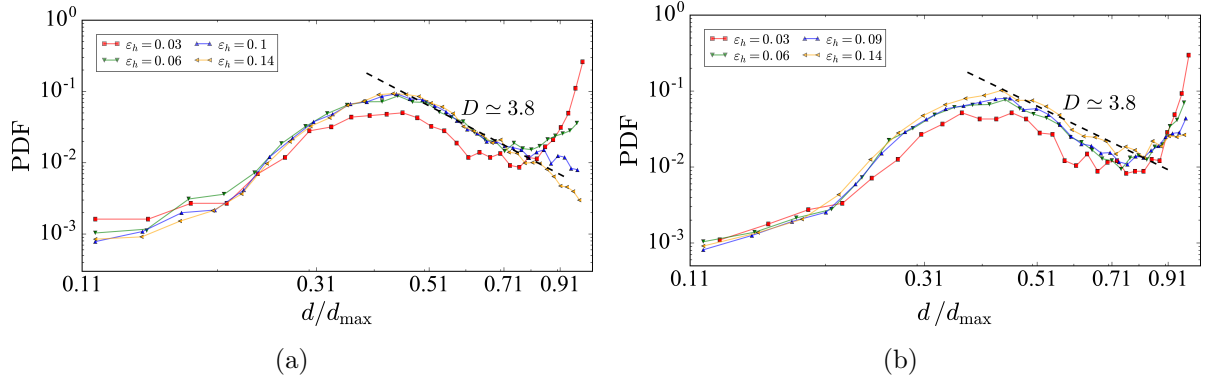
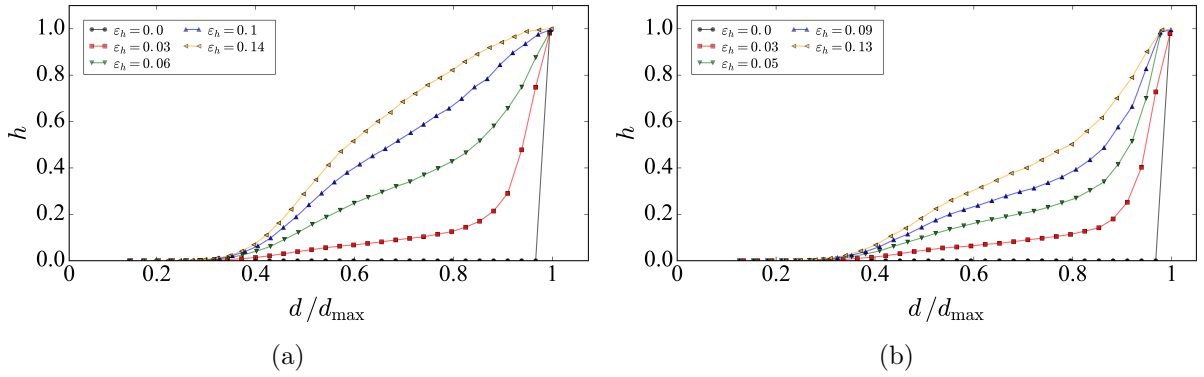


FIGURE 4.8 – Les mêmes données que sur la Fig. 4.7 en échelle log-log.


 FIGURE 4.9 – Distribution granulométrique pour l'échantillon où (a) $C_n = C_t = 0.1\sigma_r$ et (b) $C_n = C_t = 10\sigma_r$, et à différents instants du chargement.

on observe deux étapes bien distinctes. D'abord, B_r évolue rapidement pour $\varepsilon_h < 0.04$. Ensuite, B_r atteint un régime d'évolution lente avec un niveau qui varie suivant la résistance interne des grains. Pour $C_n = C_t = 0.1\sigma_r$, le taux de fragmentation dépasse 0.4 tandis que pour $C_n = C_t = 10\sigma_r$, B_r ne dépasse pas 0.35. Curieusement, au début du chargement les pentes de ces courbes sont très similaires, ce qui suggère qu'un nombre de particules similaire se fragmente toujours à bas niveau de contraintes. Ces ruptures sont liées aux concentrations de contraintes dès le début du chargement.

4.2.3 Coefficient de pression latérale

Lors de la compaction des échantillons, les parois latérales subissent des pressions latérales qui peuvent varier en fonction de la fragmentation des grains. Dans le cadre de la mécanique des sols, on sait depuis Rankine [124] que le coefficient de pression latérale, défini comme $K_0 = \sigma_{xx}/\sigma_{zz}$, où σ_{xx} est la contrainte latérale moyenne et $\sigma_{zz} = \sigma_h$ est la contrainte verticale appliquée, varie en fonction de l'angle de frottement macroscopique φ

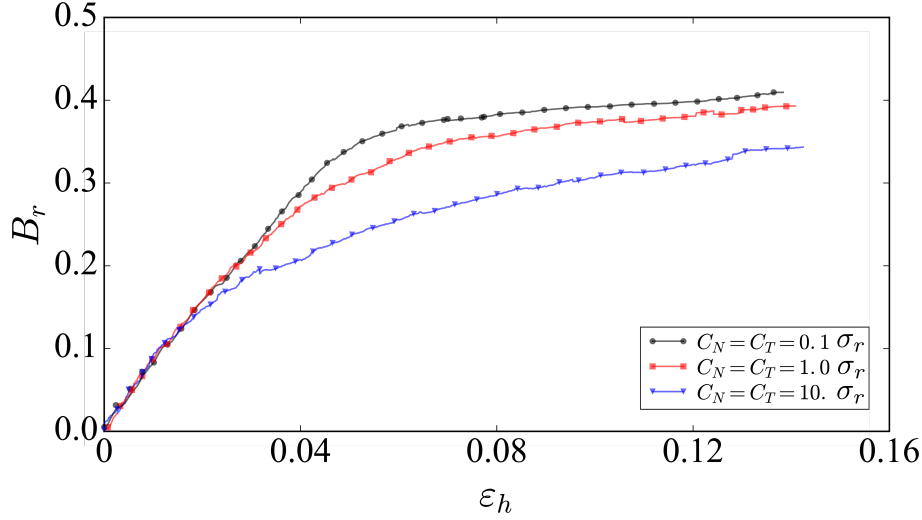


FIGURE 4.10 – Évolution du taux de fragmentation relative pour nos trois simulations.

du matériau. Les valeurs de K_0 sont bornées par les deux limites suivantes :

$$\frac{1 - \sin \varphi}{1 + \sin \varphi} < K_0 < \frac{1 + \sin \varphi}{1 - \sin \varphi}, \quad (4.1)$$

connues sous les noms de coefficients de pression passive (limite gauche) et pression active (limite droite), respectivement.

Sur la Fig. 4.11, on montre l'évolution du coefficient K_0 , en fonction de la pression axiale. On observe que pour la première partie de la courbe, où $\sigma_h \lesssim 2\sigma_r$, K_0 diminue graduellement, et sa valeur varie légèrement en fonction de la résistance interne des grains. À partir d'une pression axiale $\sigma_h \gtrsim 2\sigma_r$ le coefficient de pression latérale se stabilise autour $K_0 \simeq 0.5$ dans tous les échantillons. La fragmentation initiale et les réarrangements des fragments permettent de transmettre de façon plus homogène les contraintes verticales et semblent être le mécanisme à l'origine de la diminution de la contrainte latérale. Bien qu'on ne connaisse pas la valeur macroscopique du coefficient de frottement, la compaction uniaxiale correspond plutôt à l'état de pression passive où la contrainte principale majeure est verticale. Pour un angle de frottement macroscopique typique (e.g., $\varphi \simeq 30^\circ$), la relation de Rankine limite le coefficient de pression latérale à l'intervalle $[1/3, 3]$. Mais en mécanique des sols, on trouve d'autres analyses en considérant plus particulièrement la géométrie uniaxiale, qui ne correspond ni à un état actif ni à un état passif. En particulier, d'après l'analyse de Jaky [99], le coefficient de pression au repos est donné par $K_0 = 1 - \sin \varphi$, qui est de l'ordre de 0.54 pour $\varphi = 30^\circ$. Cette valeur est cohérente avec nos données.

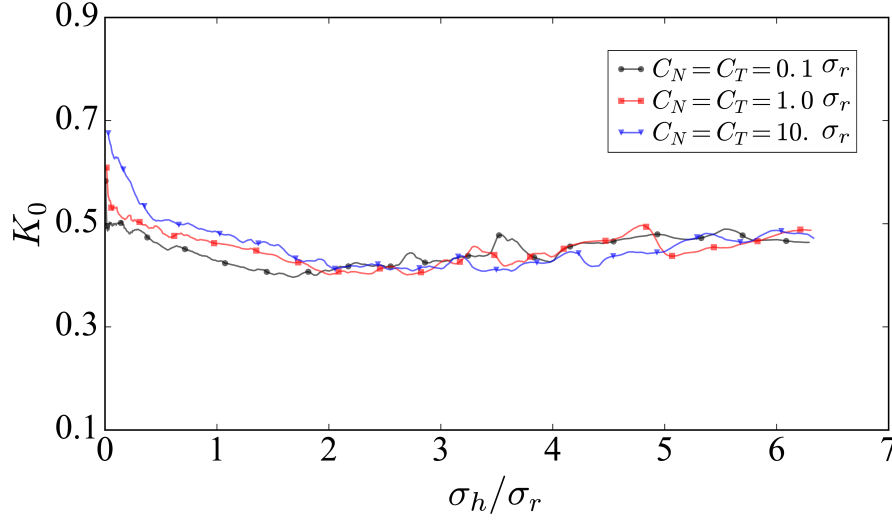


FIGURE 4.11 – Évolution du coefficient de pression latérale K_0 en fonction de la pression axiale.

4.3 Microstructure

4.3.1 Production de fragments

La Fig. 4.12 montre le nombre de particules dans l'échantillon (N_p) par rapport au nombre initial (N_p^0) de grains et le nombre de fragments potentiels ($N_p^{\max}$) qui correspond au nombre total de cellules dans l'assemblage. Le rapport $(N_p - N_p^0)/(N_p^{\max} - N_p^0)$ varie entre 0 et 1, avec 0 à l'état intact et 1 à l'état où tous les agrégats ont été complètement fragmentés. On peut remarquer que le taux de production de fragments et le nombre final de particules dépendent de la résistance interne des grains. L'échantillon constitué des grains dont la résistance interne est la plus faible ($C_n = C_t = 0.1\sigma_r$) présente une production plus importante de fragments. Dans ce cas, on trouve à la fin de la simulation un nombre de fragments presque 5 fois le nombre de particules au début de l'essai. Dans le cas où $C_n = C_t = 10\sigma_r$, la production de fragments est plus faible et le nombre final de fragments ne dépasse pas 3 fois le nombre initial de grains. Cette différence est essentiellement due au début de la compaction (le premier régime) où le nombre de fragments produits est directement contrôlé par la résistance interne. Les taux de production de fragments dans les deux régimes qui suivent est pratiquement similaire dans les trois simulations. Il est remarquable que le système conserve la mémoire du premier régime et la différence de texture entre les trois systèmes à la fin du premier régime n'est pas rattrapée au cours de la déformation uniaxiale. Ceci indique l'importance des premiers instants de la compaction pour la texture finale.

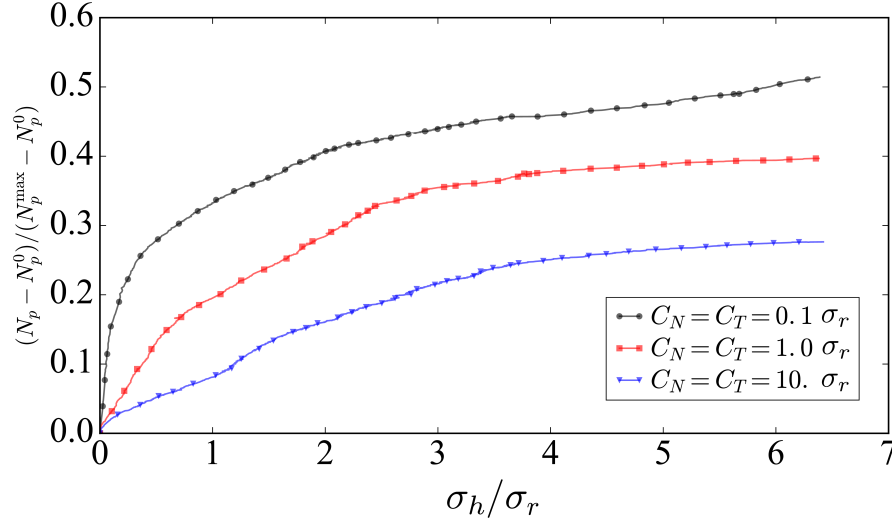


FIGURE 4.12 – Évolution du nombre de particules dans la boîte de simulation en fonction de la pression axiale pour différentes valeurs de résistance interne de grains.

4.3.2 Connectivité

Le nombre de coordination Z nous permet de quantifier à l'ordre le plus bas l'évolution de la connectivité de l'assemblage pendant la compaction. La Fig. 4.13 montre Z en fonction de la pression axiale. Pour une contrainte appliquée faible, on observe que Z augmente plus vite pour les particules les plus fragiles (C_n faible). Cependant, un comportement contre-intuitif a lieu autour d'un nombre de coordination proche de $Z \simeq 7$. On observe que Z augmente moins vite dans le premier régime pour les particules les plus résistantes mais celles-ci deviennent finalement les plus connectées à la fin de la compaction.

L'augmentation rapide de Z pour les particules fragiles est due au fait qu'elles peuvent être pulvérisées, créant ainsi un grand nombre de petits fragments connectés aux plus grosses particules. Au contraire, les particules les plus résistantes auront tendance à produire des fragments fortement non convexes aux grandes valeurs de la pression axiale, ce qui contribue à augmenter la richesse des configurations de contacts. Dans ce cas, on observe que les grains subissent de l'abrasion. Ils ne se cassent pas complètement mais ils se trouvent endommagés par le détachement de cellules de leur surface ; voir quelques exemples sur la Fig. 4.14. Les grains endommagés sont ainsi souvent non convexes et peuvent donc porter un nombre élevé de contacts, dépassant parfois 20 contacts par particule.

Sur la Fig. 4.15, on présente le nombre de coordination moyen pour l'échantillon où $C_n = C_t = \sigma_r$ en fonction de la taille relative des fragments et à différents instants de la compaction. On voit que les particules les plus grosses portent le nombre de contacts le plus élevé (jusqu'à $Z \simeq 30$) et leur évolution pendant la compaction est plutôt rapide. En revanche, les fragments les plus petits présentent un nombre de coordination relativement stable autour de $Z \simeq 3$. On peut aussi distinguer deux régimes sur ces courbes. Le nombre de coordination semble évoluer de manière linéaire en fonction de la taille relative des frag-

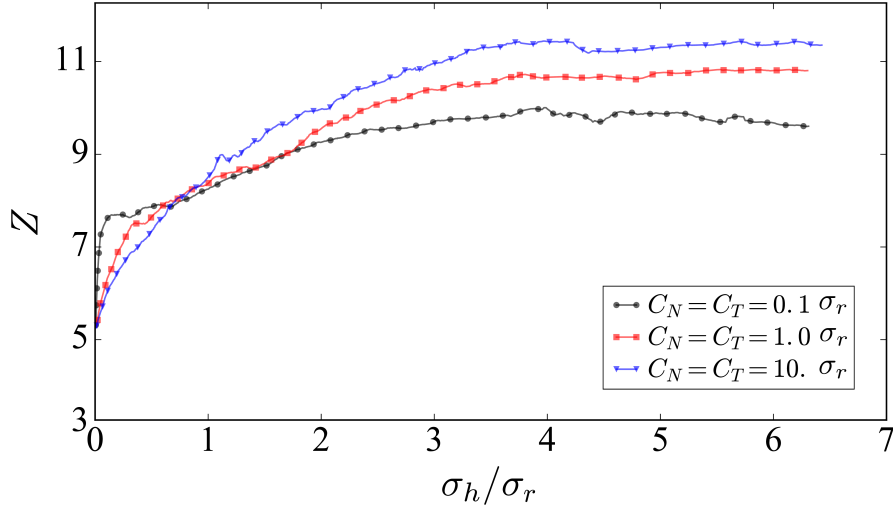


FIGURE 4.13 – Évolution du nombre de coordination en fonction de la charge axiale pour différentes valeurs de la résistance interne de grains.

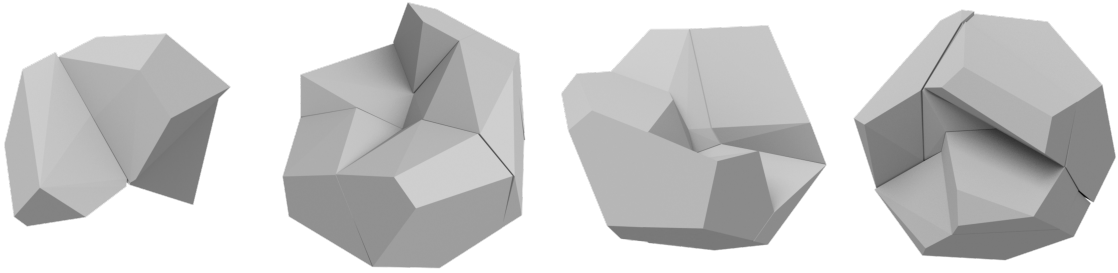


FIGURE 4.14 – Exemples de grains non convexes trouvés dans l'échantillon avec $C_n = C_t = 10\sigma_r$. Quelques fissures sont observables sur les agrégats, mettant en évidence la perte d'interactions cohésives entre cellules.

ments pour $d < 0.5d_{\max}$. Pour les tailles supérieures à $0.6d_{\max}$, le nombre de coordination augmente rapidement et de manière non linéaire.

Outre l'effet de la non-convexité des particules, on peut expliquer cette tendance en termes de réarrangements des fragments. Dans le cas de l'empilement optimal de particules de forme sphérique monodisperse de taille d^* , il est possible d'accommoder une sphère de taille $\simeq 0.22d^*$ dans le pore créé par quatre de ces grandes sphères. La distribution des tailles des cellules, mentionnée précédemment, permet donc d'accommoder les fragments les plus petits, de taille $\simeq 0.16d_{\max}$, entre les particules dont la taille est $\simeq 0.7d_{\max}$ ou supérieure. Il est donc facile de trouver des grosses particules entourées par un nombre important de petits fragments ; voir Fig 4.16.

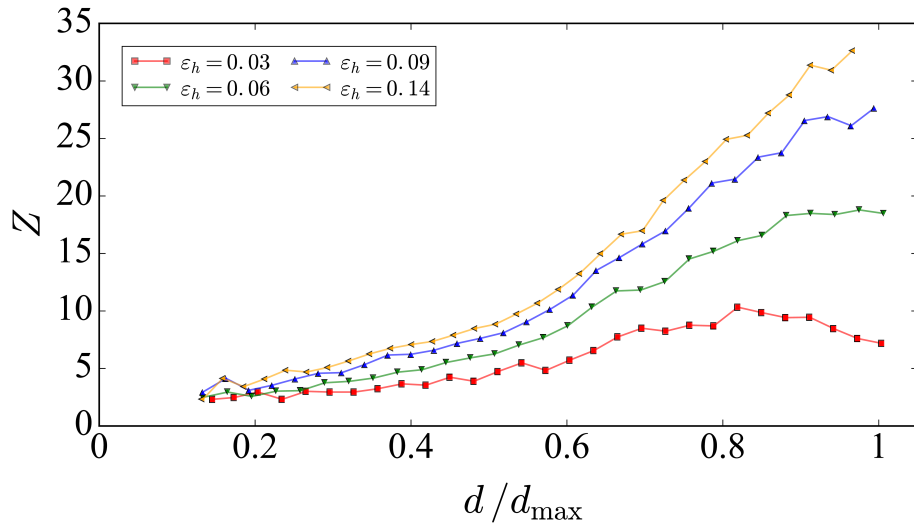


FIGURE 4.15 – Évolution du nombre de coordination par taille de fragments à différents instants de la compaction pour l'échantillon avec $C_n = C_t = \sigma_r$.

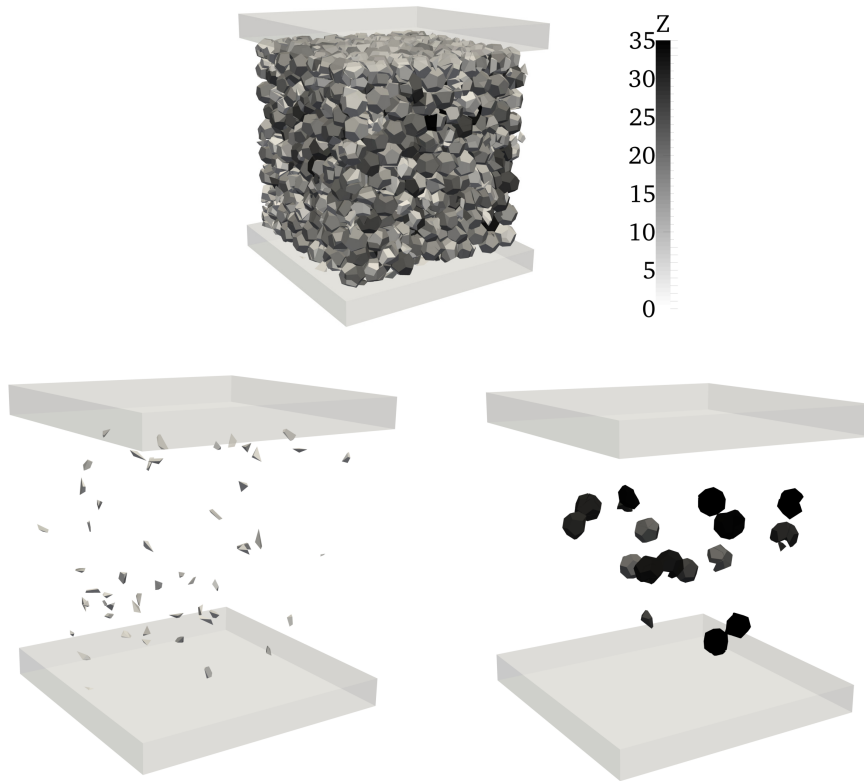


FIGURE 4.16 – Instantané de l'échantillon avec $C_n = C_t = \sigma_r$ où on montre en niveaux de gris le nombre de contacts par particule.

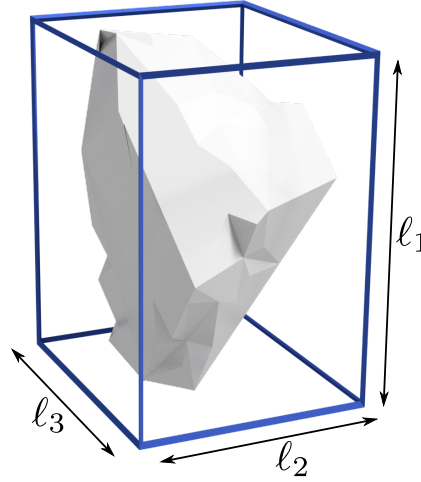


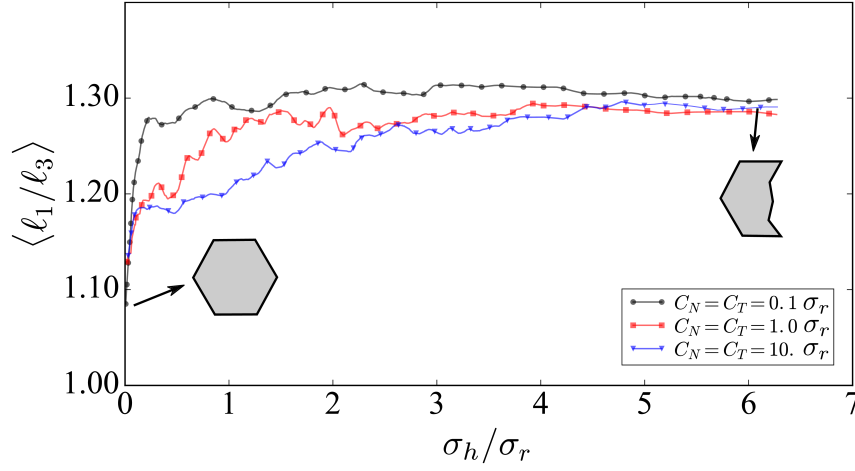
FIGURE 4.17 – Schéma des dimensions de la boîte la plus petite qui peut contenir une particule.

4.3.3 Évolution des formes de fragments

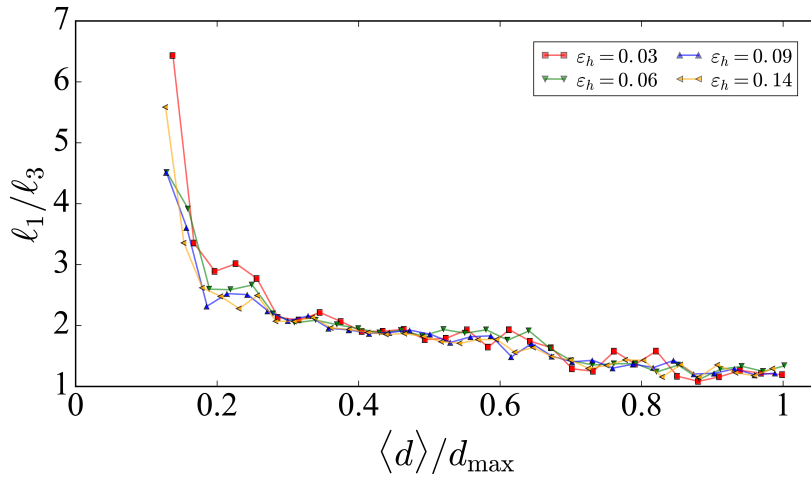
L'évolution des formes des fragments peut être analysée à partir du rapport d'aspect défini via les dimensions du parallélépipède le plus petit qui peut contenir chaque particule ; voir Fig. 4.17. Ces dimensions sont triées de telle sorte que $\ell_1 > \ell_2 > \ell_3$. Le rapport ℓ_1/ℓ_2 représente l'allongement des particules tandis que le rapport ℓ_2/ℓ_3 traduit leur aplatissement.

La Fig. 4.18(a) montre l'évolution de l'allongement moyen en fonction de la charge axiale à différents instants de la compaction. On voit que l'allongement augmente dans tout les cas, mais il tend vers une valeur constante et similaire pour tous les échantillons vers $\ell_1/\ell_3 \simeq 1.3$. Ce caractère stationnaire de l'allongement des particules pendant la compaction suggère que l'allongement vers lequel tendent les fragments présente un caractère *auto-similaire*. Le même comportement a été observé par D.H. Nguyen en simulations 2D où le rapport d'aspect tend vers le nombre d'argent $\sqrt{2}$ [103]. Les études réalisées par Matsushima et collaborateurs sur des échantillons en provenance de la surface de la lune présentent le même rapport d'aspect [80]. Le rapport d'aspect $\sqrt{2}$ correspond en effet à un caractère auto-similaire dans la mesure où lorsqu'une particule ayant ce rapport d'aspect est cassée suivant son axe mineur, on obtient deux fragments avec le même rapport d'aspect. Pour les échantillons lunaires, la fragmentation des particules est provoquée par l'impact des astéroïdes. Des impacts répétés sur le même site conduisent à la fragmentation multiplicative des grains et donc une possible évolution vers une forme auto-similaire.

Afin de classer plus précisément l'évolution de la forme des particules, la Fig. 4.18(b) montre l'allongement en fonction de la taille de fragments à différents instants du chargement. On remarque que les fragments les plus petits présentent un allongement plus important pouvant atteindre des valeurs de $\ell_1/\ell_2 \simeq 5$. La forme des fragments les plus grands reste plutôt arrondie.



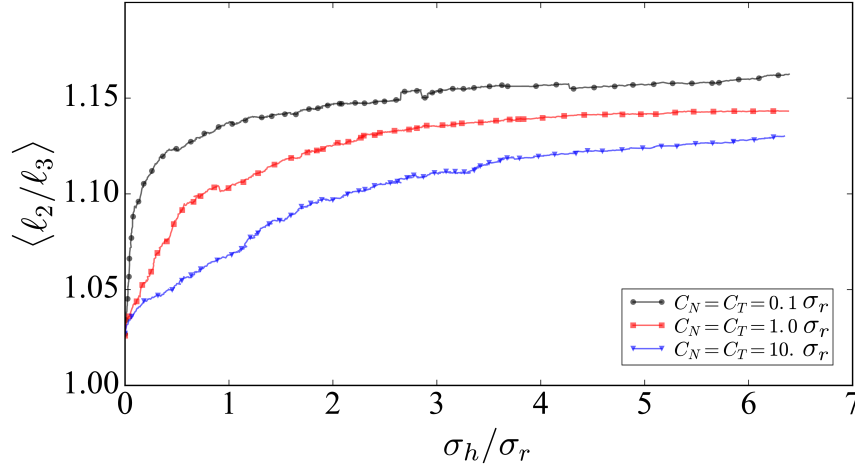
(a)



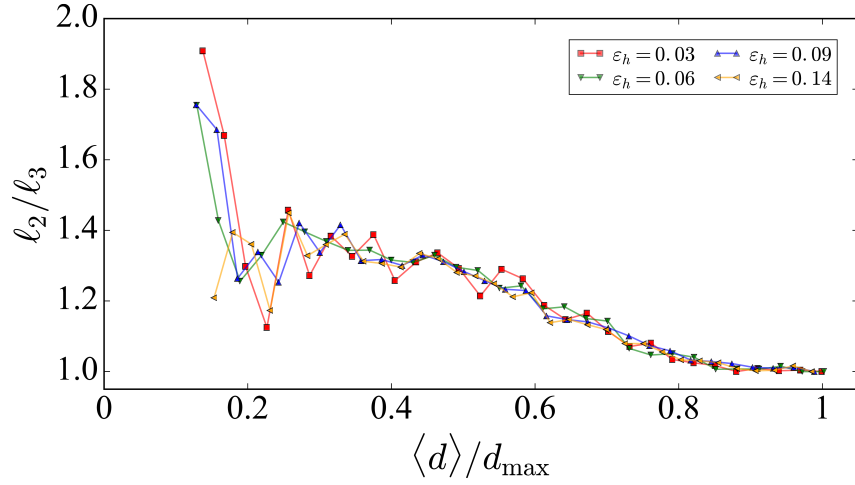
(b)

FIGURE 4.18 – Évolution du rapport d'allongement moyen en fonction de la pression verticale pour les différents échantillons. Les polygones en gris montrent de manière schématique des formes qui respectent le rapport ℓ_1/ℓ_2 signalé.

La Fig. 4.19(a) montre le rapport d'aplatissement moyen $\langle \ell_2 / \ell_3 \rangle$ en fonction de la pression axiale. On observe, comme dans le cas de l'allongement, que le taux d'évolution de l'aplatissement varie en fonction de la résistance interne des grains. La Fig. 4.19(b) montre l'aplatissement en fonction de la taille des particules. Le rapport ℓ_2 / ℓ_3 présente une variation plus faible que l'allongement et ce sont les particules les plus petites qui présentent une variation de forme plus importante. Au cours de la compaction, l'aplatissement des petites particules tend plutôt à diminuer. Des fragments, initialement très anguleux, subissent de nouvelles fragmentations, ce qui crée des fragments de formes relativement plus arrondies. Il faut noter que les paramètres d'allongement et d'aplatissement ne sont pas nécessairement liés aux caractéristiques de surfaces des fragments.



(a)

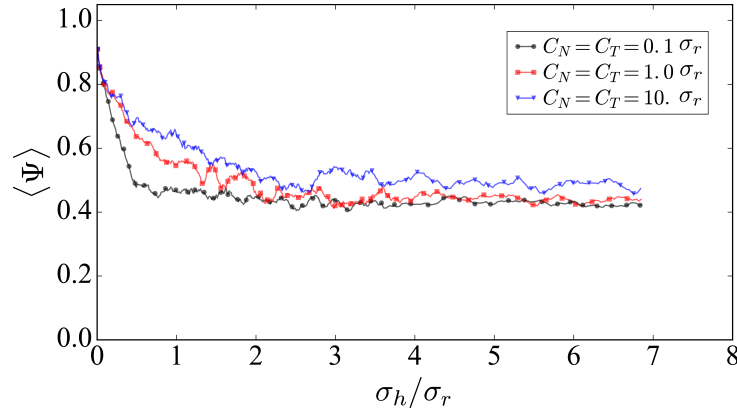


(b)

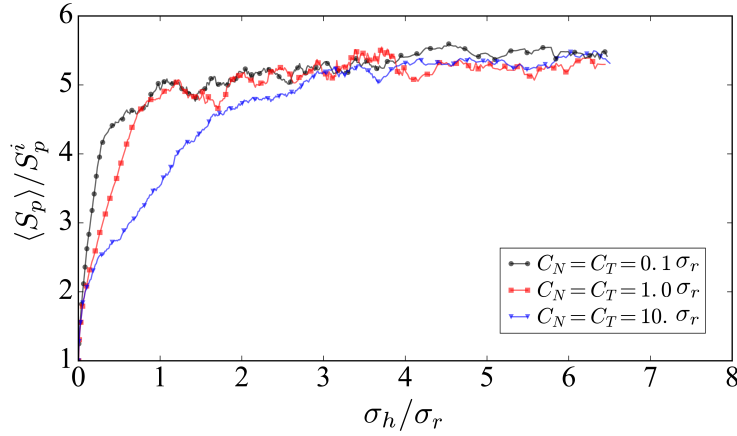
FIGURE 4.19 – (a) Évolution de l’aplatissement moyen en fonction de la charge axiale pour les trois échantillons et (b) aplatissement moyen en fonction de la taille de particule pour différents instants de la compaction pour l’échantillon avec $C_n = C_t = 1\sigma_r$.

Le degré de non-convexité des fragments peut fortement varier même avec des rapports d’aspect similaires. L’état de surface des fragments peut être analysé, au premier ordre, en considérant la sphéricité moyenne $\langle \Psi \rangle$ et la surface spécifique moyenne $\langle S_p \rangle$ des particules ; voir Sec. 1.3. La Fig. 4.20 montre l’évolution de la sphéricité moyenne en fonction de la charge axiale. Initialement, la sphéricité moyenne est $\langle \Psi \rangle \simeq 0.91$, ce qui correspond à la valeur de Ψ pour les dodécaèdres. La sphéricité diminue ensuite rapidement suivant la résistance interne des grains et elle tend vers une valeur constante $\langle \Psi \rangle \simeq 0.5$ avec une légère différence entre les trois échantillons. Cette différence indique que les grains ne présentent pas le même état de surface dans les trois simulations.

En effet, la Fig. 4.20 montre l'évolution de la surface spécifique moyenne normalisée par la surface spécifique initiale S_p^i qui correspond à celle d'un dodécaèdre régulier. La surface spécifique moyenne évolue très rapidement avec des taux dépendant de la résistance interne des grains. Ce paramètre semble se stabiliser autour $5S_p^i$. Étant donné que l'allongement et l'aplatissement moyen restent assez faibles, cette forte diminution de sphéricité indique que l'aire superficielle des particules augmente considérablement par rapport à leur volume. Lorsque des phénomènes de trituration se produisent dans des matériaux réels, une très grande proportion en nombre de particules de petites tailles est créée ; voir Fig. 4.21. La production de ces petits fragments implique une forte augmentation de la surface spécifique dont la valeur est naturellement limitée dans nos simulations par le nombre de fragments potentiels.



(a)



(b)

FIGURE 4.20 – Évolution de la sphéricité moyenne en fonction de la charge axiale pour les trois échantillons simulés (a). Evolution de la surface spécifique en fonction de la charge axiale pour les mêmes simulations (b).

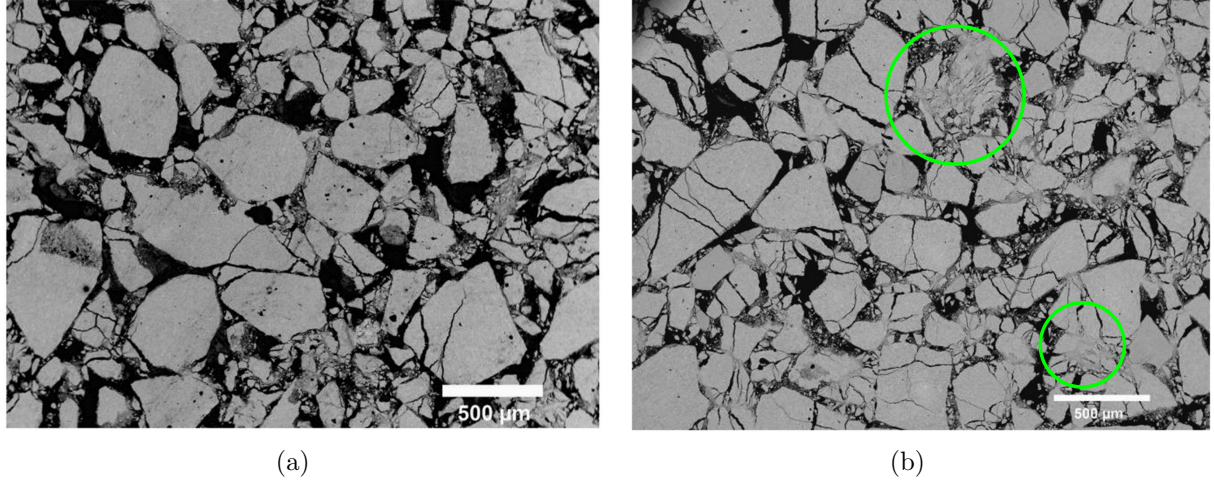


FIGURE 4.21 – Exemple de production de particules très fines lors de la compaction d'une poudre métallique. Dans ce cas en particulier, la pression a augmenté de (a) 5 MPa à (b) 20 MPa [68].

4.3.4 Transmission des contraintes

La transmission des contraintes au sein des échantillons peut être analysée à partir du tenseur de contraintes σ^p de chaque particule. La Fig. 4.22 montre la distribution de probabilité de la contrainte orientée dans la même direction du chargement σ_{zz}^p normalisée par la pression axiale σ_h à différents instants de la compaction. Les distributions sont très larges et on peut trouver des contraintes qui dépassent $30\sigma_h$. La distribution des contraintes peut être approximée par une loi exponentielle décroissante ce qui n'est pas sans rappeler les distributions de forces normales dans un milieu granulaire. Au cours de la compaction, l'intervalle des valeurs σ_{zz}^p que prennent les particules diminue, ainsi que la probabilité de trouver des grandes contraintes. La distribution tend vers une distribution stable pour une déformation verticale $\simeq 14\%$. Ceci s'explique à travers le fort blocage des grains et fragments qui continuent à se diviser sans pour autant modifier la texture.

L'analyse des contraintes doit être aussi menée en considérant le déviateur des contraintes portées par chaque particule et normalisé par leur pression moyenne. La pression moyenne est calculée avec le tenseur de contraintes de chaque grain par $p = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3$ et le déviateur à partir de la contrainte définie par $q = (1/\sqrt{2})\sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}$, où σ_1 , σ_2 , et σ_3 sont les contraintes principales du tenseur σ de chaque particule.

Dans le cas du chargement uniaxial, le tenseur σ présente une symétrie radiale de telle sorte que $\sigma_2 = \sigma_3$. Par conséquent, la pression moyenne et le déviateur des contraintes pour chaque particule peuvent se calculer simplement comme $p = (\sigma_1 + 2\sigma_2)/3$ et $q = (\sigma_1 - \sigma_2)$.

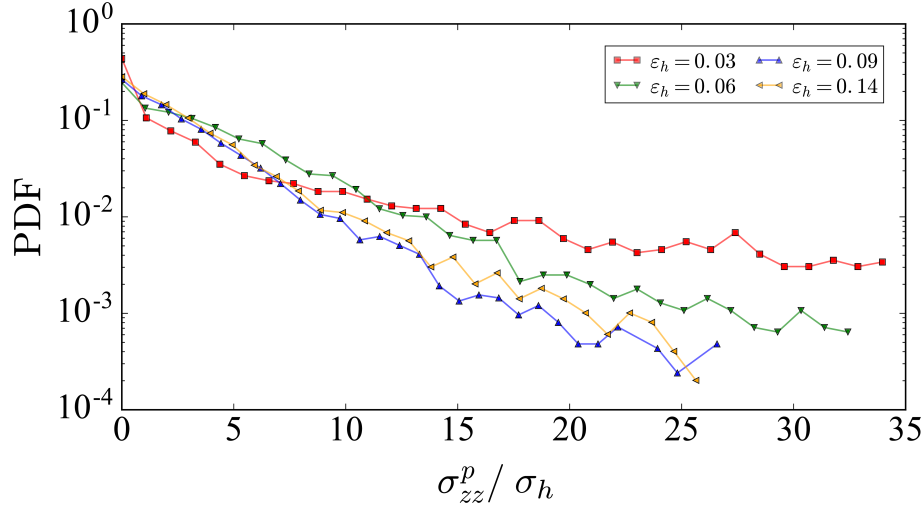


FIGURE 4.22 – Distribution de probabilité des contraintes verticales par particule normalisées par la pression axiale.

Les Figs. 4.23(a) et 4.23(b) montrent le rapport q/p en fonction de la taille des particules et en fonction de Z , respectivement. On voit que q/p diminue avec la taille des particules. Par ailleurs, sauf pour $Z = 2$ où q/p atteint une valeur proche de 1, on n'observe pas de corrélation entre q/p et Z . Mais la valeur de q/p diminue légèrement au cours de la compaction en raison de la densification progressive de l'échantillon. Ainsi, les particules les plus grosses sont *protégées* par un lit de particules plus petites qui les entourent en homogénéisant leur contrainte interne. C'est la raison pour laquelle il persiste des grosses particules qui ne se fracturent pas. Ceci est cohérent avec nos simulations et avec des observations expérimentales réalisées sur la poudre d' UO_2 dans le cadre de la thèse de L. Hégron [68].

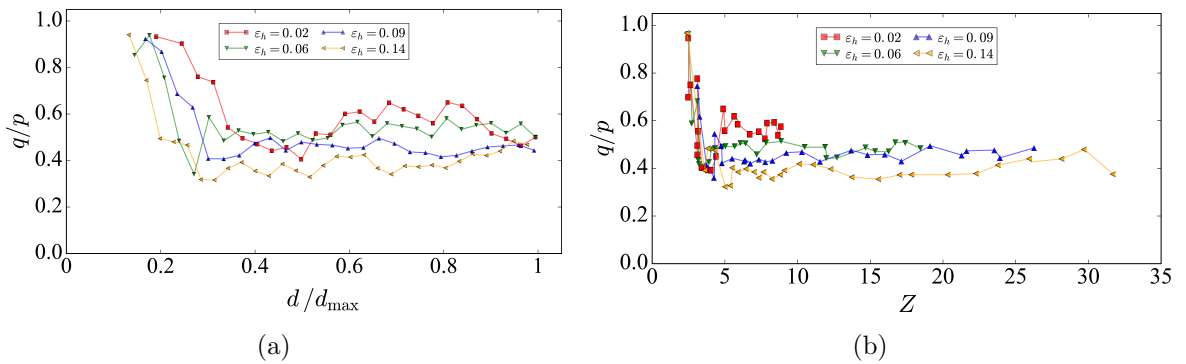


FIGURE 4.23 – Rapport q/p en fonction de (a) la taille de particule et (b) le nombre de coordination, pour l'échantillon avec $C_n = C_t = 1\sigma_r$.

Conclusion

Les résultats les plus intéressants de ces études sont :

1. La compaction en fonction de la déformation présente un aspect fortement non linéaire avec un premier régime marqué à la fois par des réarrangements et des fragmentations des particules. Même avec une résistance interne nettement plus élevée des grains, les particules se fragmentent dès les premiers instants de la compaction en raison de la forte concentration des contraintes. Ces contraintes locales sont suffisamment importantes pour arracher des fragments à la surface des particules et engendrer rapidement une classe de particules de petites tailles. La compaction et la fragmentation continuent pendant le deuxième régime où la compaction est plus rapide en raison de la production d'un nombre croissant de fragments de tailles suffisamment petites pour combler les pores entre les particules de tailles supérieures. Enfin, c'est dans le troisième régime qu'on observe une dépendance logarithmique de la déformation en fonction de la contrainte exercée. Dans ce régime, l'assemblage continue à évoluer avec un taux plus faible de fragmentation.
2. Les premier régime de déformation conditionne très fortement l'évolution ultérieure du système en termes de fragments produits et leurs tailles ainsi que la texture du milieu. En particulier, pour une résistance interne faible, un grand nombre de petits fragments sont produits assez rapidement (par rapport au niveau de contrainte exercée). Le taux de fragmentation dans les deux régimes qui suivent sont similaires pour les particules plus résistantes avec une production plus faible de fragments dans le premier régime. Néanmoins, ce manque n'est pas rattrapé par l'évolution ultérieure du système. Ainsi, même si les mécanismes locaux de fragmentation des grains sont similaires, l'assemblage conserve la mémoire du premier régime. Cette remarque indique que le taux de production des fragments au début de la compaction joue un rôle important pour la compaction du système. Ce taux initial peut dépendre de divers paramètres tels que la résistance des particules et le taux de déformation.
3. L'analyse des formes des particules a permis de mettre en évidence une différence importante entre les cas de particules résistantes et de particules fragiles. Dans le premier cas, on observe un phénomène d'abrasion sous la forme de détachement de cellules, ce qui conduit à la production des particules non convexes avec un nombre de coordination élevé. Les particules fragiles ont plutôt tendance à se pulvériser, ce qui explique la production d'un grand nombre de petites particules au début de la compaction. Cette différence et celles mentionnées ci-dessus ne sont probablement pas simplement liées à la résistance des particules, mais plutôt au fait que le même incrément de contrainte est appliqué dans tous les cas. Nous n'avons pas pu vérifier l'influence du taux d'incrément de la charge axiale indépendamment, mais il nous semble nécessaire en vue d'une meilleure interprétation des résultats.
4. Les formes des grains présentent par ailleurs un aspect non isométrique qui peut être caractérisé par leur allongement et aplatissement. Nos analyses montrent que

l'allongement tend vers un rapport d'aspect moyen de 1.3, ce qui est proche du nombre d'argent et correspond à un régime auto-similaire.

5. Pendant la compaction, les grains de différentes tailles ne se brisent pas de la même manière. Certains grains restent quasiment entiers en raison de l'effet homogénéisant, en termes de contraintes, est produit par les fragments qui les entourent. Les grains dans la gamme intermédiaire des tailles présentent une distribution de tailles en loi de puissance. Ce comportement signifie que loin des deux bornes supérieure (la taille initiale des grains) et inférieure (les tailles des cellules ou celle qui correspond au pic sur la distribution des tailles des petits fragments), les fragments ne présentent aucune taille caractéristique.

Il n'est pas inutile de remarquer que ces simulations ont été possibles grâce à l'optimisation du code de simulation employé. Certains aspects présentés dans ce chapitre peuvent être étudiés plus en détail en appliquant la méthodologie développée. Mais dans tous les cas une comparaison poussée avec des expériences reste à l'ordre du jour.

Chapitre 5

Micromécanique des milieux granulaires polydisperses en 3D

COMME nous l’avons vu précédemment, le processus de fragmentation conduit naturellement à l’apparition de particules de différentes tailles au sein d’un même matériau. Or, très récemment il a été mis en évidence – pour des empilements 2D de disques et de pentagones – que la résistance au cisaillement est indépendante de la polydispersité de taille des particules [149, 103]. Ainsi, dans ce chapitre nous nous intéressons à l’effet de la taille des particules, mais cette fois-ci dans des empilements 3D de sphères pour les cas (1) non frottant à l’état isotrope et (2) frottant et cisailé jusqu’à l’état d’écoulement continu (dit état critique). Le passage du 2D au 3D implique des difficultés numériques et augmente la complexité de l’analyse physique. Ainsi, on analyse les propriétés macroscopiques et micro-structurales de plusieurs systèmes en fonction de leur étalement granulométrique (de mono-disperse à très polydisperse). L’objectif ici est de montrer que, malgré une forte polydispersité de taille, le comportement macroscopique est essentiellement contrôlé par la transmission des contraintes.

Sommaire

5.1	Préparation des assemblages granulaires	95
5.2	Équilibre statique	96
5.2.1	Compacité et connectivité	96
5.2.2	Transmission des forces	98
5.3	Résistance au cisaillement des assemblages	99
5.3.1	Comportement à l’échelle macroscopique	100
5.3.2	Microstructure granulaire	102
	Conclusion	112

5.1 Préparation des assemblages granulaires

Pour une fonction de distribution arbitraire de tailles de grains, l'étalement granulométrique peut être caractérisé par le paramètre S défini par

$$S = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{d_{\max} + d_{\min}}, \quad (5.1)$$

où $d_{\max}$ et $d_{\min}$ sont les diamètres maximum et minimum de la distribution. Le cas $S = 0$ correspond à un système monodisperse, et $S = 1$ correspond à une polydispersité sans borne inférieure sur les tailles des grains. Dans les études qui suivent, le paramètre S varie entre 0.0 et 0.8 par pas de 0.1. Nous utilisons dans tous les cas une distribution uniforme par fraction volumique. La Fig. 5.1 montre, de manière schématique, la gamme des tailles pour l'échantillon le plus polydisperse que nous avons testé.

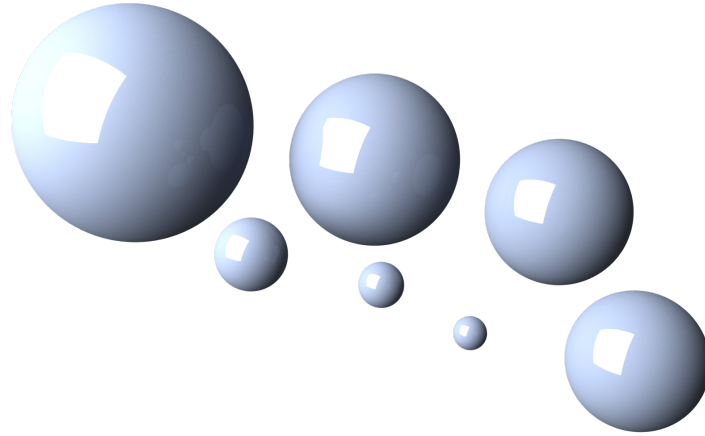


FIGURE 5.1 – Schéma montrant le spectre des tailles de sphères pour l'échantillon dont la polydispersité est égale à $S = 0.8$.

Les échantillons sont construits en déposant 20,000 sphères dans des boîtes de forme cubique à l'aide d'un modèle de dépôt géométrique par couches successives [147]. Ainsi, neuf échantillons différents ont été préparés avec cette méthode ; voir la Fig. 5.2 pour $S = \{0; 0.4; 0.8\}$.

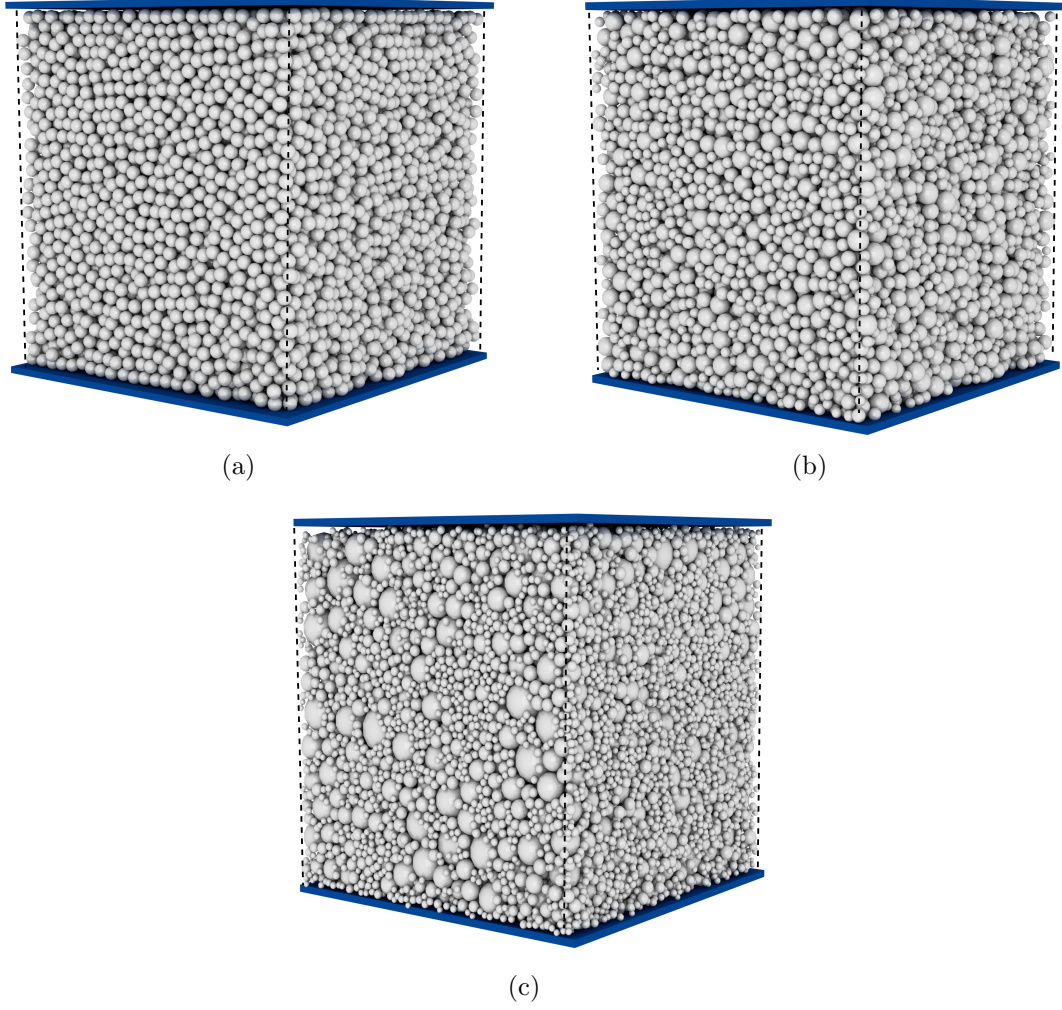


FIGURE 5.2 – Instantanés des échantillons composés de 20,000 sphères dont la dispersion de tailles correspond à (a) $S = 0.0$, (b) $S = 0.4$, et (c) $S = 0.8$.

Une compression verticale est ensuite appliquée avec des conditions périodiques suivant les directions latérales. Les coefficients de frottement grain-grain et grain-mur ainsi que la gravité sont fixés à 0. La compression s'achève dès que les variations des forces et des nombres de contacts se stabilisent autour de leur valeurs moyennes.

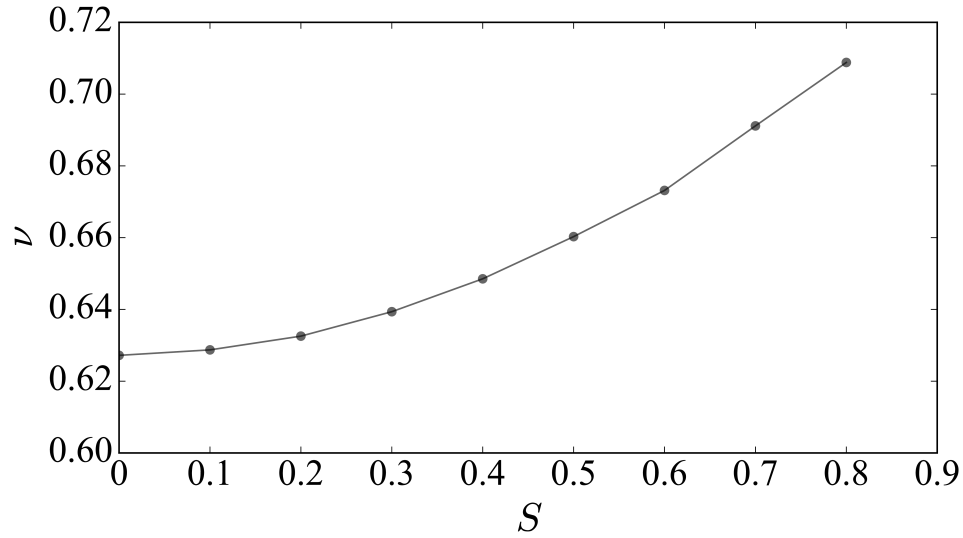
5.2 Équilibre statique

5.2.1 Compacité et connectivité

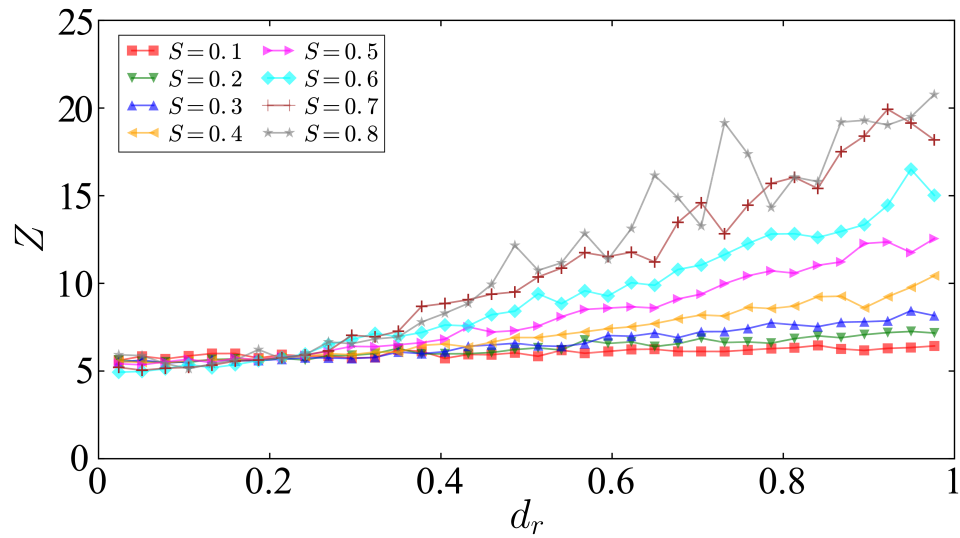
À l'ordre le plus bas, l'état de compacité peut être décrit soit par la compacité ν , soit par le nombre de coordination Z des particules. Pour aller plus loin, la connectivité des

particules peut être décrite par le nombre de contacts moyen par classe de particules. Nous analysons ces descripteurs en fonction de S dans ce qui suit.

La Fig. 5.3(a) montre la variation de la compacité ν , définie comme le rapport entre de la somme des volumes des particules et le volume de la cellule de simulation, en fonction de S .



(a)



(b)

FIGURE 5.3 – Évolution de la compacité (a) et du nombre de coordination moyen (b) en fonction de S .

On voit que $\nu \simeq 0.63$ pour $S = 0$, ce qui est une valeur très proche de la compacité à l'état d'empilement compact aléatoire ("Random Close Packing") des sphères (0.64). La compacité ν augmente en fonction de S jusqu'à 0.71 pour $S = 0.8$.

Dans nos empilements sans frottement, le nombre de coordination moyen Z est proche de 6, comme attendu pour un empilement isostatique [113, 128] bien que la proportion de particules flottantes (particules avec 0 ou 1 contacts) augmente de 0.02 pour $S = 0$ à 0.42 pour $S = 0.8$. Cela suggère qu'il est nécessaire d'adapter notre analyse au cas des polydispersités élevées en étudiant plus particulièrement la corrélation entre taille et nombre de contacts. Pour cela, définissons le diamètre réduit d_r par :

$$d_r = \frac{d - d_{\min}}{d_{\max} - d_{\min}}. \quad (5.2)$$

Ce paramètre peut varier entre 0 et 1. Il représente la taille de chaque particule sur l'échelle des diamètres entre $d_{\min}$ et $d_{\max}$. La Fig. 5.3(b) montre Z en fonction de d_r pour toutes les valeurs de S . Au fur et à mesure que S augmente, la dispersion du nombre de coordination augmente. Pour $S = 0.8$, Z varie entre $\simeq 3$ pour les sphères les plus petites, et $Z \simeq 20$ pour les sphères les plus grandes. Il est remarquable que pour les particules de taille relative $d_r \simeq 0.25$ le nombre de coordination est toujours $\simeq 6$ quelle que soit la polydispersité de taille.

5.2.2 Transmission des forces

La distribution très hétérogène des forces de contact est une propriété remarquable des milieux granulaires et a fait l'objet d'un grand nombre de travaux. Nous nous intéressons ici à la distribution des efforts en fonction de l'étalement S . La Fig. 5.4 montre la densité de probabilité de forces normales, normalisées par la force normale moyenne, en échelle linéaire-log et en échelle log-log. Comme classiquement observé, la distribution des forces peut être décrite en deux régimes avec 1) une décroissance exponentielle pour $f_n > \langle f_n \rangle$ et 2) une partie en loi de puissance pour $f_n < \langle f_n \rangle$. Nos données numériques semblent aussi montrer que la distribution des forces fortes est plus étalée aux grandes valeurs de S .

La Fig. 5.5 montre la force normale moyenne normalisée par la force moyenne globale en fonction de d_r et pour toutes les valeurs de S . Cette force augmente très légèrement, de 0.9 à 1.05 pour $S = 0.1$, mais pour les valeurs plus élevées de S on observe que les particules les plus petites portent des forces de plus en plus faibles, alors que les plus grosses particules portent les forces les plus fortes. En d'autres termes, comme pour les empilements 2D [149, 105] les grosses particules capturent les forces les plus fortes.

L'étude de l'état d'équilibre statique présentée plus haut a permis de mettre en évidence quelques tendances générales sur l'effet de la polydispersité sur l'état aléatoire compact des assemblages de sphères. Dans ce chapitre, nous nous intéressons d'avantage à la rhéologie des assemblages denses décrits. Nous nous focalisons alors sur l'état critique en termes de contraintes, compacité, texture et transmission des efforts, dans le but d'étudier l'effet de la polydispersité et de voir si les résultats connus en 2D se généralisent au 3D.

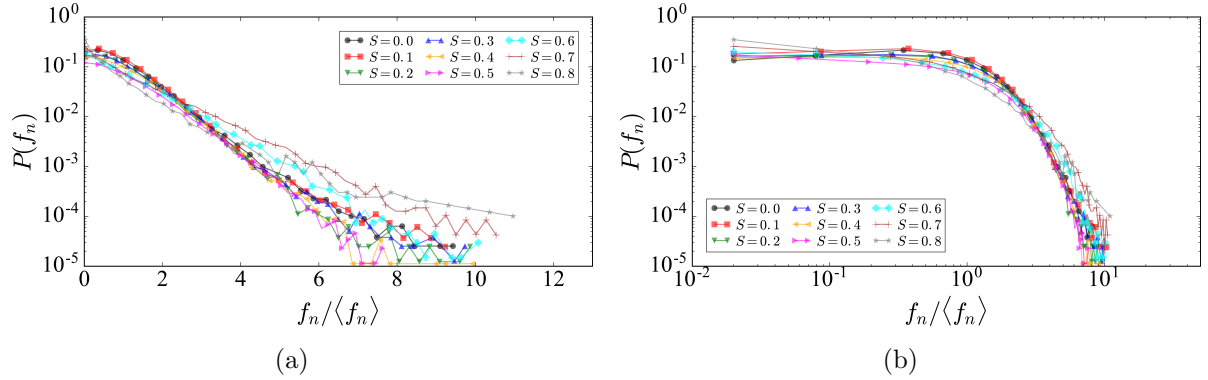


FIGURE 5.4 – Densité de probabilité des forces normales pour différentes valeurs de la polydispersité de taille des particules en représentation (a) linéaire-log et (b) log-log. Comme classiquement observé, la distribution des forces peut être décrite en deux régimes avec 1) une décroissance exponentielle pour $f_n > \langle f_n \rangle$ et 2) une partie en loi de puissance pour $f_n < \langle f_n \rangle$.

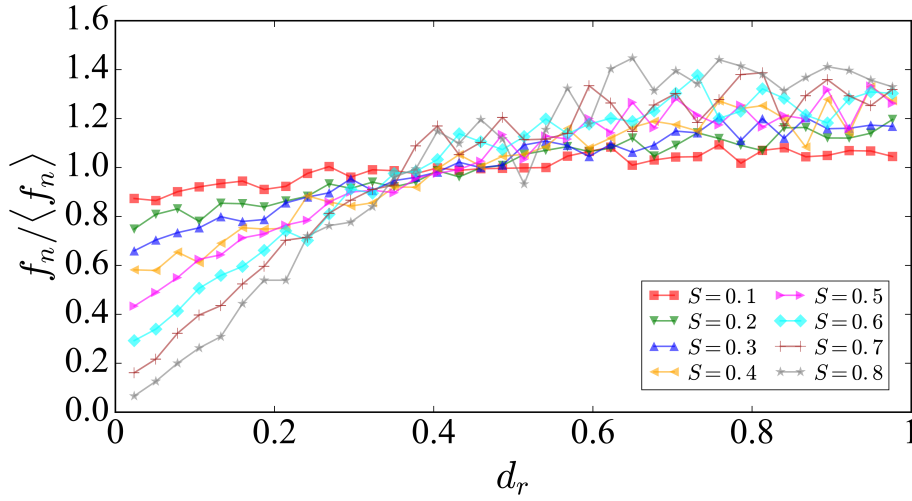


FIGURE 5.5 – Distribution des forces normales normalisées par la force moyenne en fonction de la taille relative des particules.

5.3 Résistance au cisaillement des assemblages

Les assemblages denses construits précédemment sont soumis au cisaillement simple dans la même cellule de simulation avec les conditions aux limites périodiques dans les directions x et y . Sur la paroi supérieure une pression P et un taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ sont imposés, tandis que les déplacements de la paroi inférieure sont bloqués ; voir Fig. 5.6. Une

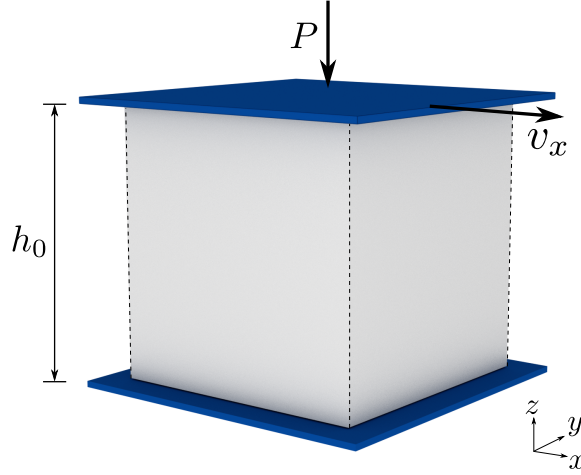


FIGURE 5.6 – Schéma montrant la géométrie des essais de cisaillement périodique.

couche de grains est *collée* aux parois de manière à avoir une rugosité et se prémunir de tout glissement.

La pression et le taux de cisaillement sont choisis de sorte à assurer un régime quasistatique, lequel est quantifié au travers du nombre inertiel $I = \dot{\gamma} \sqrt{m/Pd^{D-2}}$, où $\dot{\gamma} = v_x/h_0$ avec v_x la vitesse de la paroi supérieure, h_0 la hauteur initiale de la boîte, m la masse d'un grain de diamètre moyen $d = (d_{\max} + d_{\min})/2$, et D est la dimension. Dans nos simulations, le nombre inertiel est fixé à $I = 1 \times 10^{-4}$. La déformation cumulée est calculée par $\gamma = \delta_x/h_0$, où δ_x est le déplacement cumulé de la paroi supérieure dans la direction de l'écoulement. Le frottement entre les grains est fixé à $\mu = 0.4$.

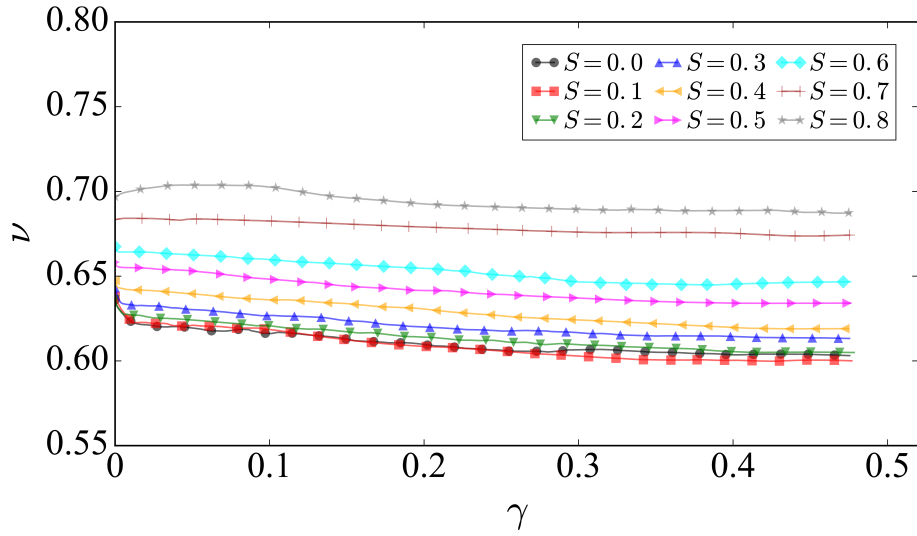
5.3.1 Comportement à l'échelle macroscopique

On se concentre sur l'analyse des contraintes et des déformations dans l'état stationnaire en termes de densité et de résistance au cisaillement dans la direction de l'écoulement. Nous allons considérer alors les composantes du tenseur de contrainte σ dans le plan xz .

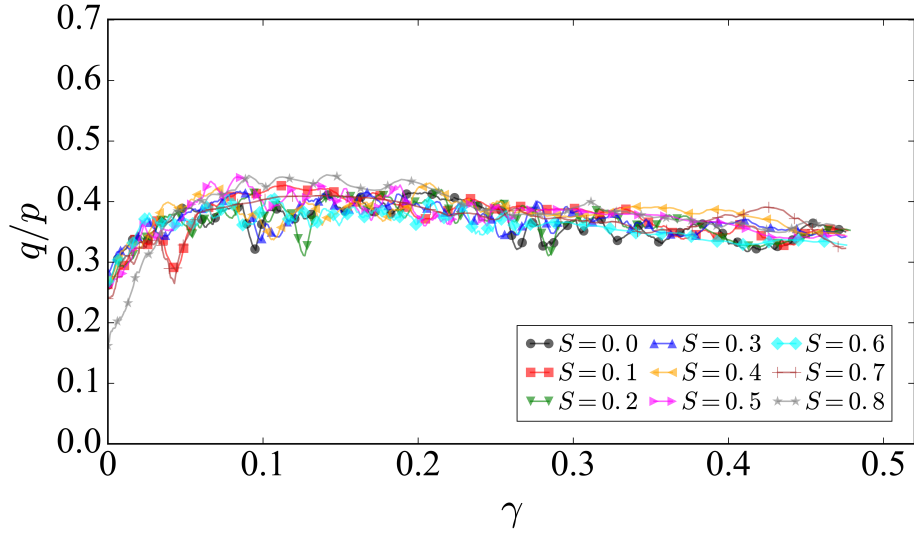
Dans le cadre du critère de Mohr-Coulomb, on calcule l'angle de frottement effectif φ^* par $\sin \varphi^* = q/p$, où $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ est la pression moyenne et $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$ est le déviateur des contraintes, où σ_1 et σ_2 sont les valeurs propres du tenseur σ .

Les Figs. 5.7(a) et 5.7(b) montrent l'évolution de ν et q/p respectivement en fonction de γ pour les 9 échantillons. On voit que la compacité évolue rapidement au début du cisaillement et elle tend ensuite vers une valeur relativement stable. La densité moyenne augmente avec le paramètre S de polydispersité. Cela s'explique par le fait que les pores entre les gros grains peuvent être occupés par les grains les plus petits. En ce qui concerne la résistance au cisaillement, on voit que q/p augmente graduellement en fonction de γ jusqu'à une valeur maximale, puis diminue légèrement vers une valeur stationnaire. L'état stationnaire est donc considéré comme étant atteint à partir de $\gamma \sim 0.3$. Dans la suite, on mesure les valeurs moyennes sur le dernier 20% de déformation cumulée.

Les Figs. 5.8(a) et 5.8(b) montrent la compacité moyenne ν^* et l'angle de frottement macroscopique $\sin \varphi^*$ définis comme la valeur moyenne de q/p dans l'état stationnaire en fonction de S . On observe que la compacité augmente en fonction de S tandis que la résistance au cisaillement est pratiquement indépendante de S . Cela implique que la compacité n'est pas directement corrélée avec la résistance au cisaillement, un effet contre-intuitif qui a déjà été mis en évidence par simulations 2D [149, 58, 103] et qui se confirme ici en 3D.



(a)



(b)

FIGURE 5.7 – (a) Évolution de la compacité ν et (b) de la résistance au cisaillement q/p en fonction de la déformation cumulée pour les 9 échantillons étudiés.

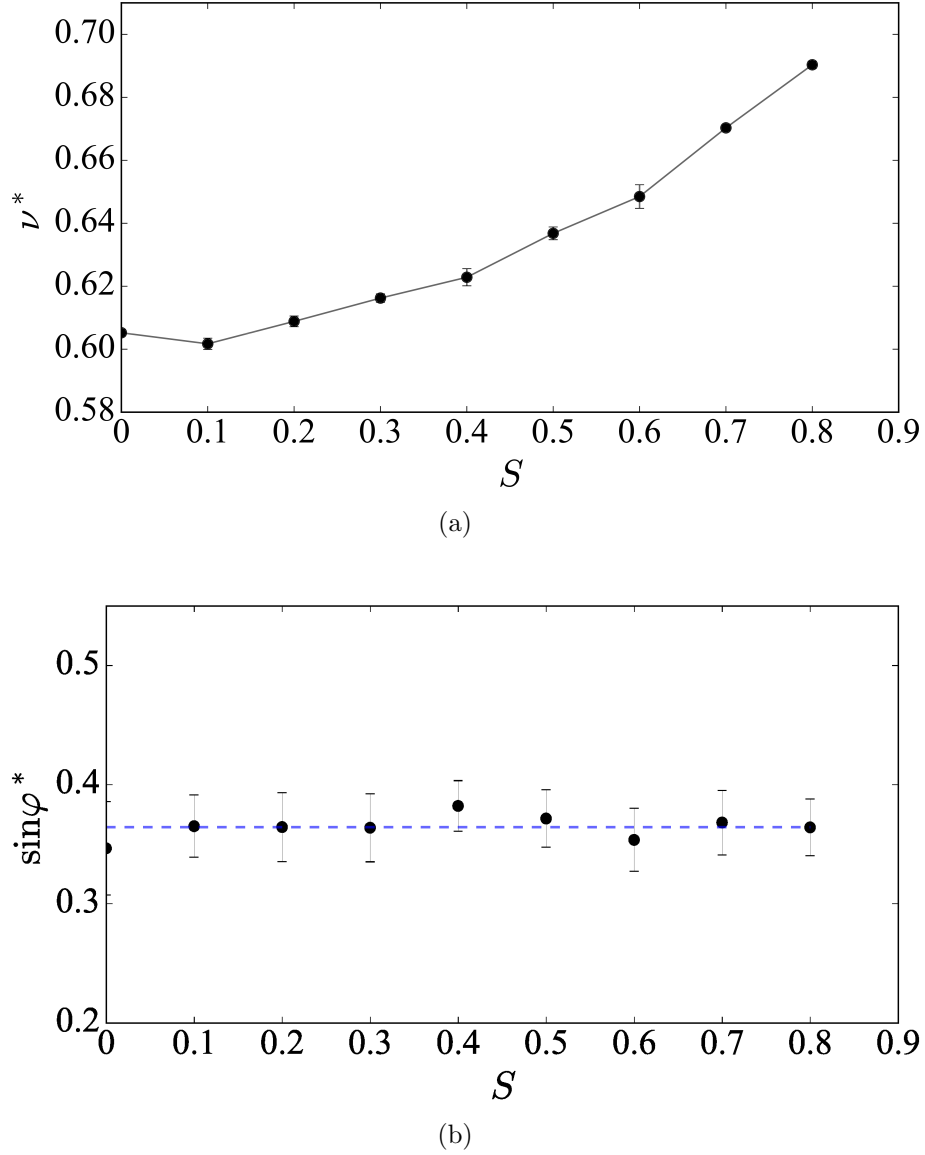


FIGURE 5.8 – (a) Compacité moyenne ν^* dans l'état stationnaire en fonction de la dispersion des tailles de grains S et (b) coefficient de frottement macroscopique $\sin \varphi^*$ dans l'état stationnaire en fonction du paramètre de polydispersité S . Les barres d'erreur représentent l'écart type des données.

5.3.2 Microstructure granulaire

Nous nous intéressons ici aux descripteurs de la texture dans l'état critique. Certains descripteurs ont été présentés et appliqués dans la section précédente à l'état isotrope ou encore dans le chapitre 2. Nous rappelons que les résultats présentés ci-dessous correspondent à des mesures prises dans l'état de référence (i.e., $\gamma > 0.3$).

Connectivité

Les Figs. 5.9 (a) et (b) montrent des instantanées des particules *flottantes* (i.e., des grains qui présentent un ou zéro contact) pour les échantillons avec $S = 0.0$ et $S = 0.8$. De même, les Figs. 5.9 (c) et (d) montrent en niveau de gris le nombre de contacts par grain. Les grains flottants sont plutôt rares pour l'échantillon monodisperse. Par contre, à mesure que la polydispersité des tailles augmente, le nombre de grains flottants semble être plus important et semble correspondre toujours aux particules les plus petites. Ce sont les plus gros grains qui semblent avoir un nombre de contacts plus grand.

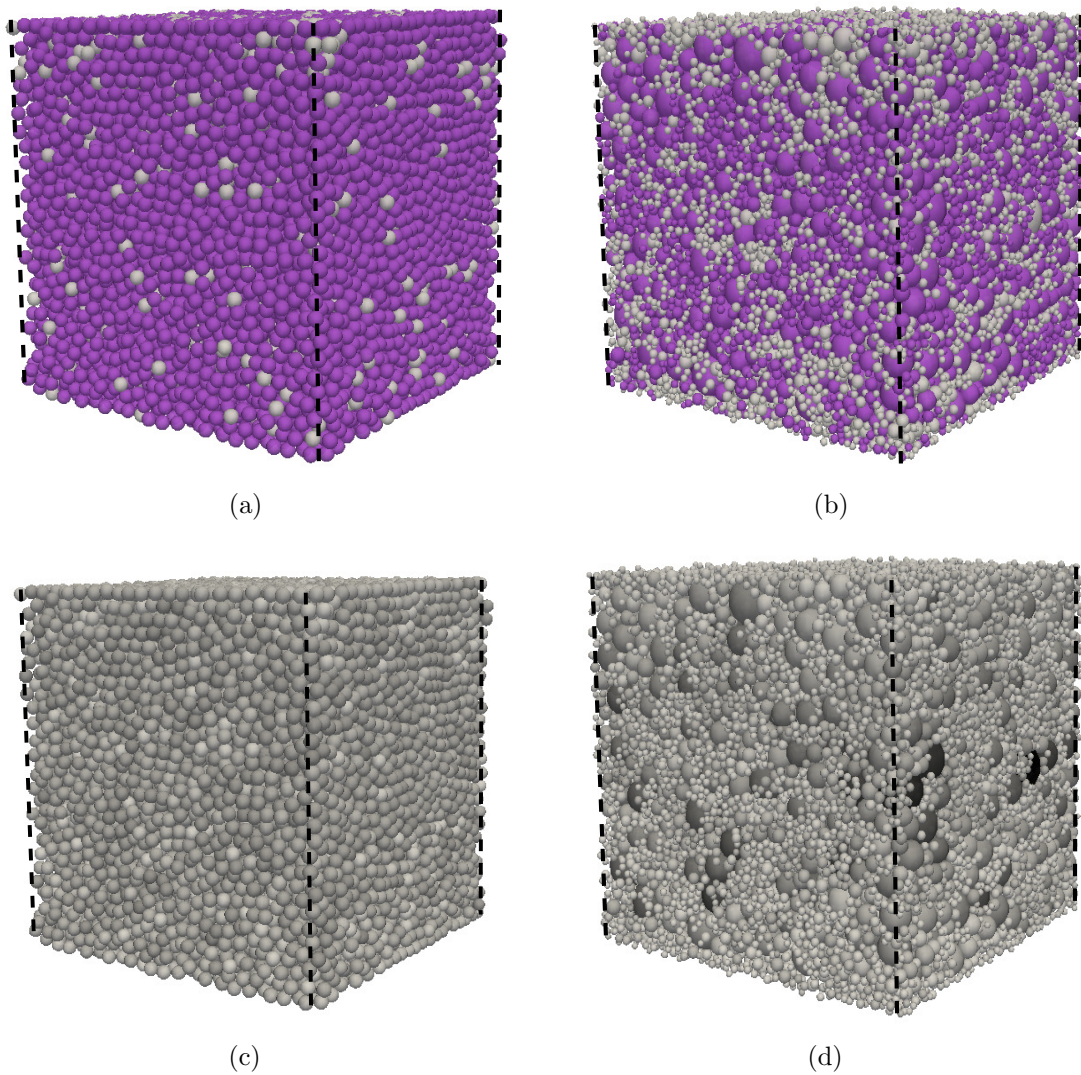


FIGURE 5.9 – Instantanés montrant les grains flottants en gris (a et b), et la distribution du nombre de contacts par grain en niveaux de gris (c et d), pour les échantillons avec $S = 0.0$ et $S = 0.8$ dans l'état stationnaire, respectivement.

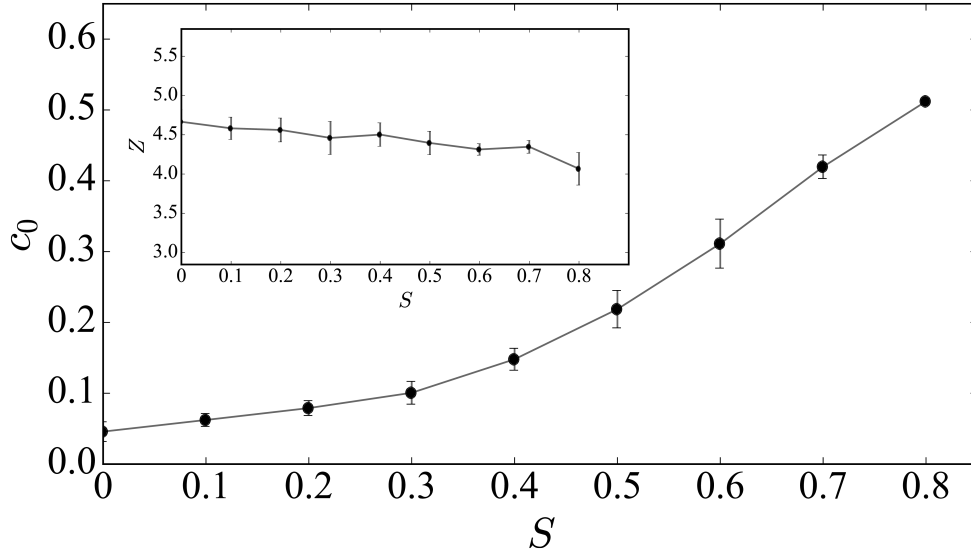


FIGURE 5.10 – Proportion de particules flottantes c_0 et nombre de coordination Z dans l'état stationnaire en fonction de la dispersion de taille S . Les barres d'erreur représentent l'écart type des données.

La Fig. 5.10 montre Z et c_0 (proportion des particules flottantes) en fonction de S . La valeur moyenne de c_0 croît d'une manière non linéaire avec S , avec $c_0 \simeq 0.05$ pour $S = 0.0$ et $c_0 \simeq 0.55$ pour $S = 0.8$. D'autre part, le nombre de coordination moyen diminue graduellement en fonction de S d'une valeur initiale $\simeq 4.5$ jusqu'à une valeur $\simeq 4.0$. Ces résultats suggèrent que pour des grandes dispersions de taille, moins de la moitié des particules participent au réseau de contacts. De même, les particules participant à la transmission des efforts sont, en moyenne, moins connectées que des grains dans des arrangements mono- ou quasi-monodisperses. Ces observations sont assez surprenantes étant donné que les systèmes présentant les plus grandes valeur de S sont aussi les plus denses. Cependant, il faut remarquer que la distribution des tailles des grains est uniforme en volume, et donc un nombre important de petites particules existe dans ces échantillons. Le nombre de coordination moyen est plutôt représentatif de la connectivité des particules de taille inférieure.

La Fig. 5.11 montre l'évolution de Z en fonction de d_r . Nous observons une relation linéaire entre ces deux paramètres dont la pente augmente graduellement en fonction de la dispersion de taille de grains S . Les particules les plus petites portent, en moyenne, un nombre inférieur de contacts par rapport aux particules les plus grandes dont le nombre de coordination peut atteindre des valeurs moyennes excédant 10 contacts par grain. Ces résultats sont cohérents avec ceux présentés sur la Fig. 5.9 où nous observons que les grains les plus petits sont davantage exclus du réseau de contacts.

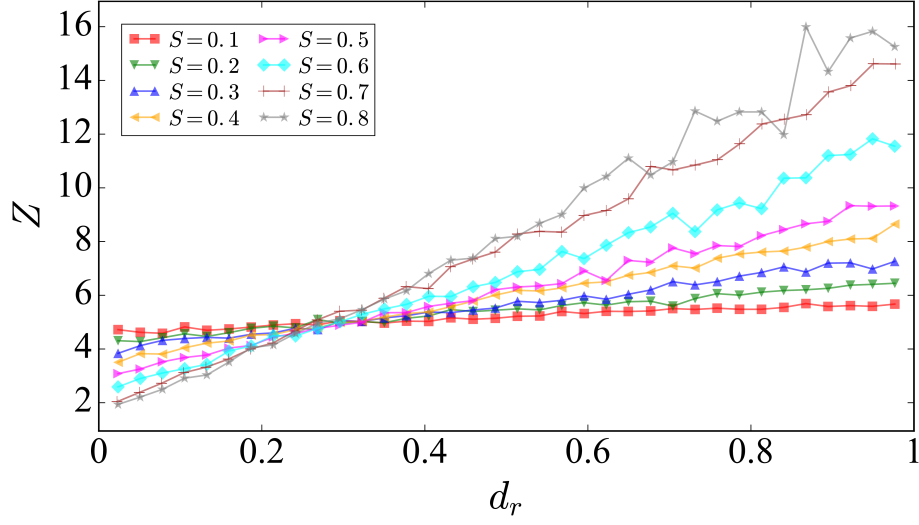


FIGURE 5.11 – Nombre de contacts moyen Z dans l'état stationnaire en fonction de la taille relative de grain d_r pour les différents échantillons.

Transmission des forces et mobilisation du frottement

À chaque contact sont associés un vecteur force $\mathbf{f}$ et un vecteur branche $\boldsymbol{\ell}$; voir un schéma de la géométrie local au contact sur la Fig. 5.12. Dans le cas des sphères, l'orientation de la branche coïncide avec l'orientation du vecteur normal $\mathbf{n}$. Ainsi, $\boldsymbol{\ell} = \ell \mathbf{n}$ où ℓ est la norme du vecteur branche, et le vecteur force est défini comme $\mathbf{f} = f_n \mathbf{n} + f_t \mathbf{t}$, où f_n et f_t sont les forces normale et tangentielle, respectivement.

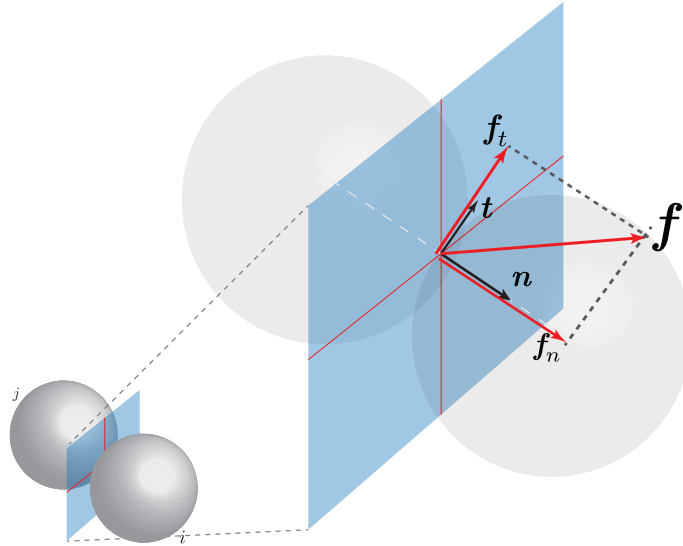


FIGURE 5.12 – Géométrie locale du contact et force associée.

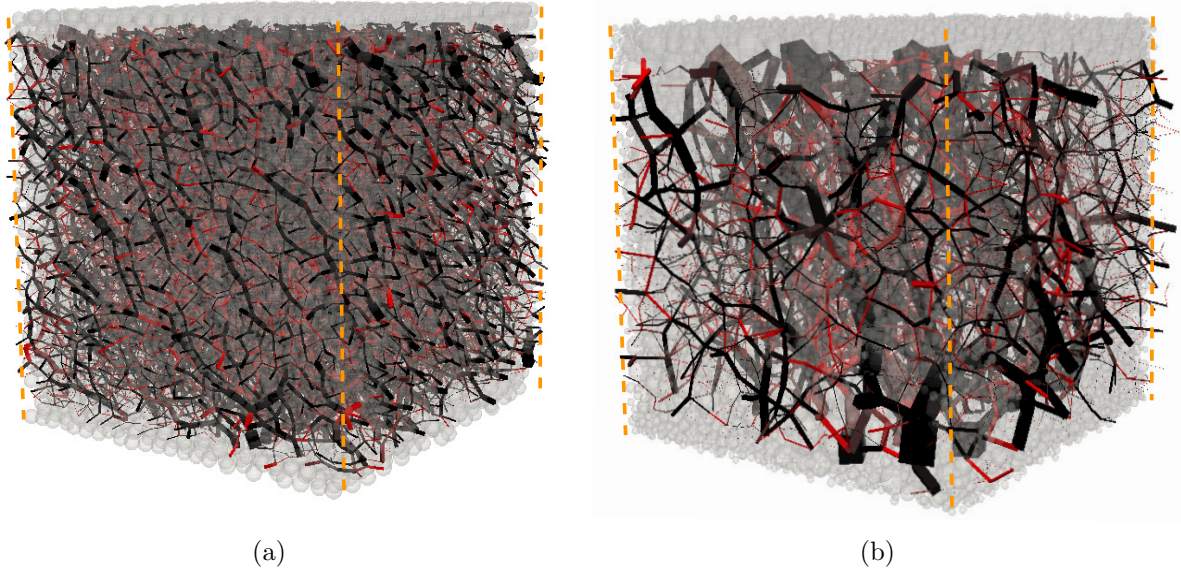


FIGURE 5.13 – Instantanés montrant les forces pour chaque contact dans l'échantillon avec (a) $S = 0.0$ et $S = 0.8$. L'épaisseur des barres est proportionnelle à la valeur de force normale. La couleur rouge indique les contacts critique où $|f_t| = \mu f_n$.

Avec ces définitions, la Fig. 5.13 montre une représentation de cette microstructure sous forme de chaînes de forces. Ici, chaque trait relie le centre de deux particules qui se touchent et son épaisseur est proportionnelle à l'intensité de la force de contact. Les forces en rouges sont celles où la mobilisation du frottement est la plus importante, c'est-à-dire $|f_t| = \mu f_n$. Cette visualisation révèle le caractère hétérogène et anisotrope du réseau des contacts et des forces associées. Ces aspects sont renforcés dans les échantillons qui présentent de grandes dispersions de taille.

La Fig. 5.14 montre la densité de probabilité des forces normales normalisées par la force normale moyenne $\langle f_n \rangle$ en échelle log-linéaire (a) et en échelle log-log (b) pour les échantillons cisailés. On observe que quand S augmente, la distribution de probabilité devient de plus en plus large (comme à l'état statique). Pour $S = 0.0$ la force la plus grande que l'on peut trouver est de l'ordre de 5 fois la force normale moyenne, alors que pour $S = 0.8$ des forces peuvent atteindre jusqu'à 14 fois $\langle f_n \rangle$. En parallèle, on peut noter une augmentation du nombre de contacts qui portent des forces faibles (en dessous de la moyenne) lorsque S augmente.

La transmission des forces est typiquement liée à la *géométrie* du contact, notamment au travers du vecteur branche. On peut montrer que le rapport $\ell/R_{\max}$ varie entre une valeur minimale égale à $2(1 - S)/(1 + S)$ (deux petites particules qui se touchent) jusqu'à une valeur maximale égale à 2 (le contact entre deux grosses particules). Pour la distribution monodisperse de grains $\ell/R_{\max}$ est 2. Pour $S = 0.8$, $\ell/R_{\max} \in [\simeq 0.22, 2]$.

La Fig. 5.15(a) montre la force normale moyenne f_n^ℓ dans l'intervalle $[\ell - \Delta\ell/2, \ell + \Delta\ell/2]$, où $\Delta\ell$ est un petit incrément de taille de branche, en fonction de $\ell/R_{\max}$ pour les différentes

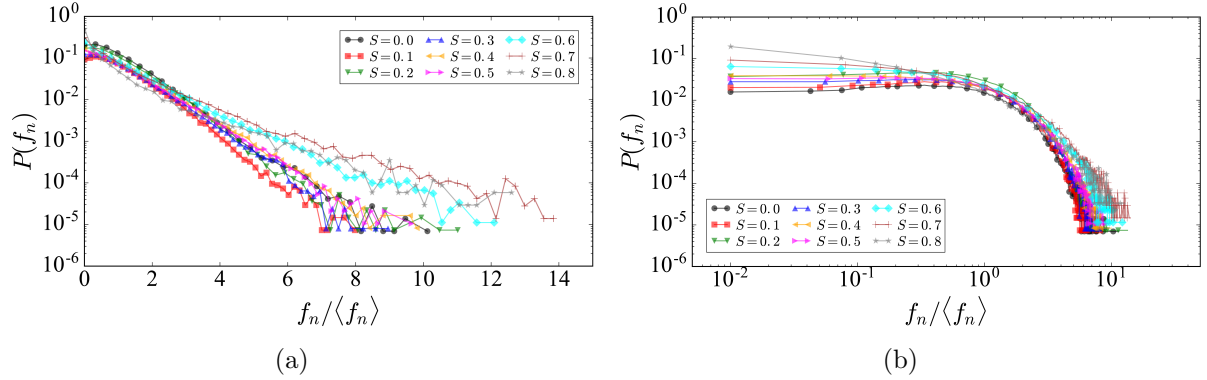


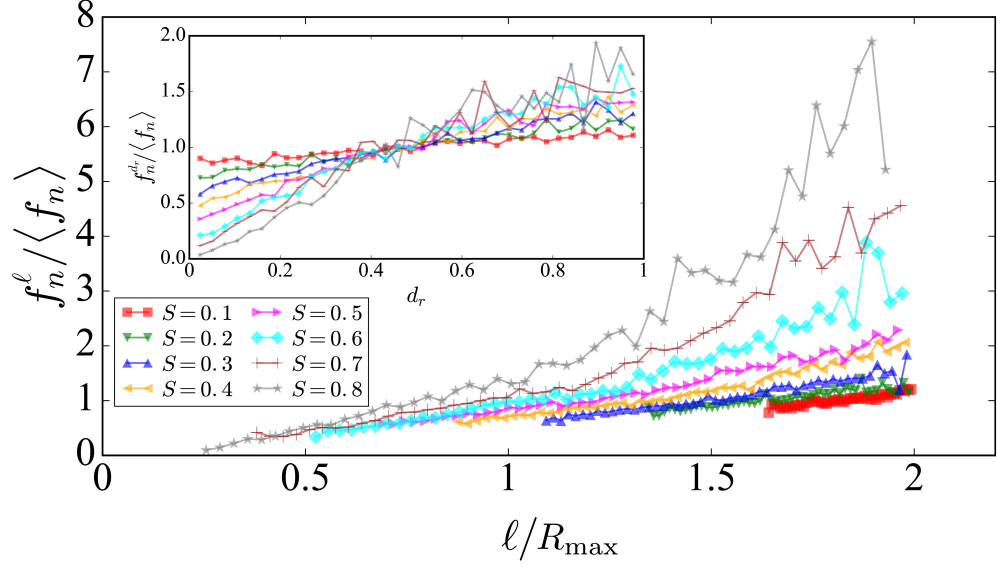
FIGURE 5.14 – Densités de probabilité des forces normales normalisées par la force normale moyenne en échelle (a) log-linéaire et (b) log-log. Ces deux affichages permettent d'observer la coexistence d'un réseau fort et d'un réseau faible de forces.

valeurs de S . On voit que f_n^ℓ augmente avec ℓ . Pour $S \leq 0.5$, cette augmentation reste néanmoins proche de la valeur de la force normale moyenne. Pour des valeurs plus grandes de S , on distingue deux régimes distincts : le premier correspond à des petites branches $\ell < R_{\max}$ qui concentrent des forces normales inférieures à la force moyenne, et le deuxième est associée à la classe des branches qui portent les forces de contact les plus grandes et dont la longueur est supérieure à $R_{\max}$.

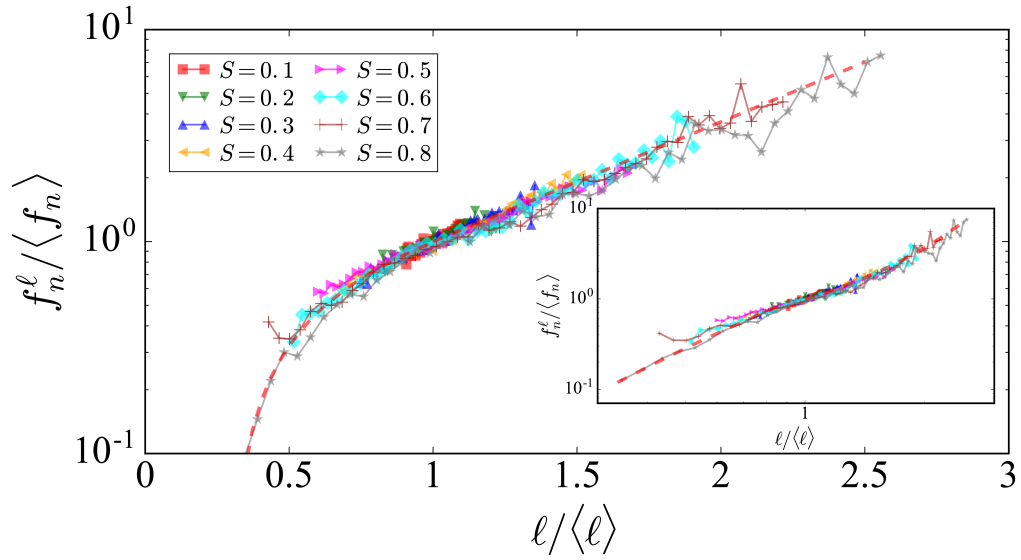
En considérant que les tailles des particules se répercutent sur les longueurs des vecteurs branches, nous pouvons nous attendre à ce que les particules les plus grosses supportent les forces les plus fortes alors que les particules les plus petites concentrent les forces les plus faibles. C'est ce qu'on observe sur l'encart de la Fig. 5.15(a), où la force normale moyenne $f_n^{d_r}$ est calculée par classe de grains sur des intervalles de longueur $[d_r - \Delta d_r/2, d_r + \Delta d_r/2]$. On voit que quand S augmente, les petits grains portent les forces de contact les plus petites. Les grains les plus grands transmettent les forces de contact supérieures à la force normale moyenne. Cette représentation met aussi en évidence le fait que quelle que soit la valeur de S , les grains de taille moyenne $d_r \sim 0.5$ concentrent les forces de contact autour de la valeur moyenne $\langle f_n \rangle$. Ce point constitue donc un point *fixe* pour ces courbes. Cette observation suggère qu'il est possible de mettre toutes ces courbes à l'échelle simplement en normalisant les longueurs des vecteurs branches par leur valeur moyenne $\langle \ell \rangle$ pour chaque valeur de S . En effet, c'est ce qu'on observe sur la Fig. 5.15(b) qui montre la force normale moyenne f_n^ℓ en fonction de la longueur de branche normalisée en échelles linéaire-log et log-log.

Nous remarquons alors que la relation entre force de contact normale et la longueur de branche peut être approchée par une loi exponentielle $f_n / \langle f_n \rangle \propto e^{\ell / \langle \ell \rangle}$ lorsque $\ell > \langle \ell \rangle$. Tandis que pour des longueurs de branches inférieures à la moyenne, leur comportement suit plutôt une loi de puissance de type $f_n / \langle f_n \rangle \propto ((\ell - \ell_{\min}) / \langle \ell \rangle)^\alpha$, où $\ell_{\min} = 2d_{\min}$. Sur la même figure, les lignes rouges en pointillés montrent les ajustements correspondants pour chaque régime. Ces mises à l'échelle sont très intéressantes car elles permettent de prédire

les forces de contact pour toute paire de grains en contact dans un échantillon polydisperse.



(a)



(b)

FIGURE 5.15 – (a) Forces normales normalisées en fonction de la longueur du vecteur branche normalisé par le rayon maximal de particule dans l'échantillon. L'encart montre la même distribution de forces en fonction de la taille relative de grains d_r . (b) Forces normales normalisées en fonction de la longueur du vecteur branche normalisé par la longueur de branche moyenne. L'encart montre les mêmes courbes en échelle log-log. Les lignes rouges en pointillés montrent des ajustements correspondants pour chaque régime (voir le texte).

Parallèlement à la distribution des forces normales, il est intéressant d'étudier la mobilisation des forces tangentielles lesquelles participent de manière significative à l'équilibre du système granulaire et à sa déformation. Nous dirons que les contacts sont *mobilisés* si $|f_t| = \mu f_n$. Il est donc possible de déterminer un indice de mobilisation en termes de forces normales et tangentielles moyennées dans tout l'assemblage par le paramètre $I_\mu = \langle |f_t| \rangle / (\mu \langle f_n \rangle)$. Alternativement, on pourrait utiliser plutôt la mesure locale du degré de mobilisation par contact et ensuite calculer sa moyenne : $M_c = \langle |f_t| \rangle / (\mu \langle f_n \rangle)$. Ces deux définitions donnent bien évidemment des tendances similaires, et les simulations numériques montrent qu'en général $M_c \simeq 2I_\mu$ [130, 11].

La Fig. 5.16(a) montre les valeurs de M_c et I_μ moyennées dans l'état stationnaire en fonction de S . On voit que ces indices de mobilisation restent indépendants de S , tout comme la résistance au cisaillement. De même, nous avons remarqué dans nos simulations que la proportion des contacts glissants est constante avec une valeur de l'ordre de 20% indépendamment de la valeur de S . La Fig. 5.16(b) montre l'indice de mobilisation I_μ^ℓ normalisé par sa valeur moyenne dans tout l'échantillon en fonction de ℓ . On constate que pour $S \leq 0.5$, I_μ^ℓ reste proche de sa valeur moyenne $\langle I_\mu \rangle$. Lorsque S est supérieur à 0.5, une différence est observée pour les vecteurs branches de plus grande longueur. Ces vecteurs branches plus longs, relient les plus gros grains et portent en moyenne les forces normales les plus fortes, ce qui peut expliquer leur plus faible mobilisation en frottement. En d'autres termes, l'équilibre mécanique de ces grains est plutôt contrôlé par les forces normales.

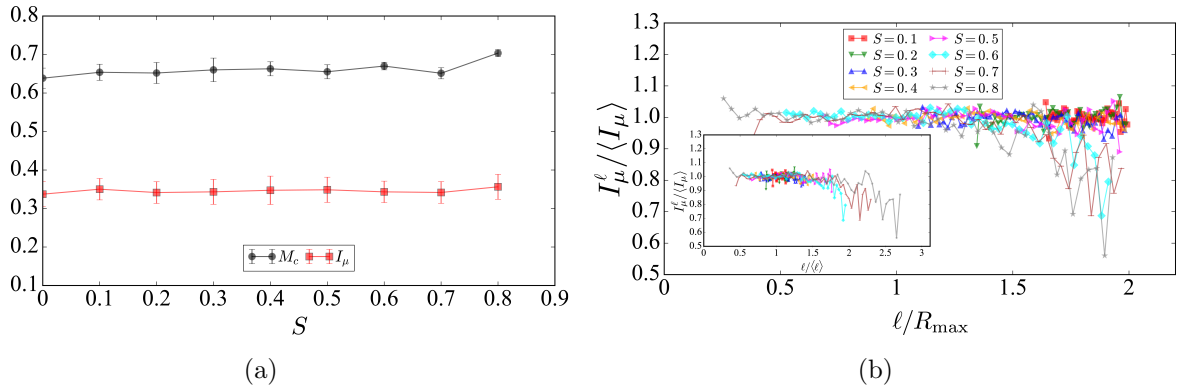


FIGURE 5.16 – (a) Mobilisation moyenne des contacts dans l'état stationnaire en fonction de la polydispersité S . (b) Indice de mobilisation I_μ normalisé par sa valeur moyenne $\langle I_\mu \rangle$ en fonction de la longueur des vecteurs branches normalisée $\ell / R_{\max}$. L'encart montre les mêmes données en fonction des longueurs des vecteurs branches normalisées par leur valeur moyenne.

Texture et anisotropie

Jusqu'à présent nous avons étudié des descripteurs scalaires de la microstructure. Dans cette section, on considère des descripteurs d'ordre supérieur en analysant les évolutions des anisotropies du réseau de contacts et de forces en fonction de S . On reprend les définitions introduites au chapitre 2 pour un système granulaire 2D sachant que les anisotropies sont invariantes dans la direction perpendiculaire au plan de l'écoulement. Nous allons donc considérer les fonctions $P_n(\theta)$, $\langle \ell \rangle(\theta)$, $\langle f_n \rangle(\theta)$ et $\langle f_t \rangle(\theta)$ en fonction de l'orientation θ des contacts dans le plan de l'écoulement.

La Fig. 5.17 montre un exemple de ces fonctions en coordonnées polaires pour trois valeurs différentes de S . Pour les fonctions angulaires des orientations des contacts $P_n(\theta)$ et des forces normales $\langle f_n \rangle(\theta)$ les valeurs maximales se trouvent le long de la direction principale majeure de contraintes $\theta_\sigma \simeq 3\pi/4$. Dans le cas des forces tangentielles, $\langle f_t \rangle(\theta)$ présente des valeurs maximales autour de $\theta_{f_t} \simeq \pi/2$ et $\simeq 0$. D'autre part, la distribution de tailles de branches $\langle \ell \rangle(\theta)$ est faiblement anisotrope.

Ces distributions sont toutes π -périodiques et un développement en séries de Fourier peut être effectué comme suit :

$$\begin{aligned}
 P_n(\theta) &= \frac{1}{2\pi} \{1 + a_c \cos 2(\theta - \theta_c)\}, & (a) \\
 \langle \ell \rangle(\theta) &= \langle \ell \rangle \{1 + a_\ell \cos 2(\theta - \theta_\ell)\}, & (b) \\
 \langle f_n \rangle(\theta) &= \langle f_n \rangle \{1 + a_{f_n} \cos 2(\theta - \theta_{f_n})\}, & (c) \\
 \langle f_t \rangle(\theta) &= \langle f_n \rangle \{a_{f_t} \sin 2(\theta - \theta_{f_t})\}, & (d)
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

où a_c , a_ℓ , a_{f_n} et a_{f_t} sont respectivement les anisotropies des contacts, des longueurs des vecteurs branches, des forces normales et des forces tangentielles. Les valeurs des anisotropies et des orientations préférentielles (θ_c , θ_ℓ , θ_{f_n} et θ_{f_t}) s'extraient facilement à partir des tenseurs de texture et de forces comme ceux présentés dans le deuxième chapitre de ce mémoire ; voir Sec. 2.2.

La Fig. 5.18 montre les valeurs des anisotropies moyennes dans l'état stationnaire en fonction de S . On observe une décroissance de a_c de 0.4 à 0.2 lorsque S augmente. Cette variation reflète le fait que les grains les plus grands sont entourés par un nombre croissant de petites particules. Au contraire, a_{f_n} augmente de 0.3 à 0.45. Ce comportement est cohérent avec l'élargissement des PDF des forces observés précédemment pour S croissant. De même, cela suggère que les plus grandes particules (associées aux plus grandes branches) peuvent potentiellement s'aligner dans la même direction que celle des chaînes de forces fortes. Nous notons aussi que l'anisotropie des branches varie très peu avec S de 0 pour l'échantillon monodisperse à 0.05 pour l'assemblage le plus polydisperse. Finalement, nous observons que l'anisotropie des forces tangentielles reste constante avec S . Si l'on intègre l'équation 5.3 (d) dans l'intervalle $[0, \pi/2]$, on trouve que l'anisotropie des forces tangentielles est liée à l'indice de mobilisation de contacts à travers l'expression $\langle I_\mu \rangle = 2a_{f_t}/\mu$ [11, 13]. Il est donc attendu que la valeur de a_{f_t} ne varie pas étant donné que la mobilisation des contacts est également constante.

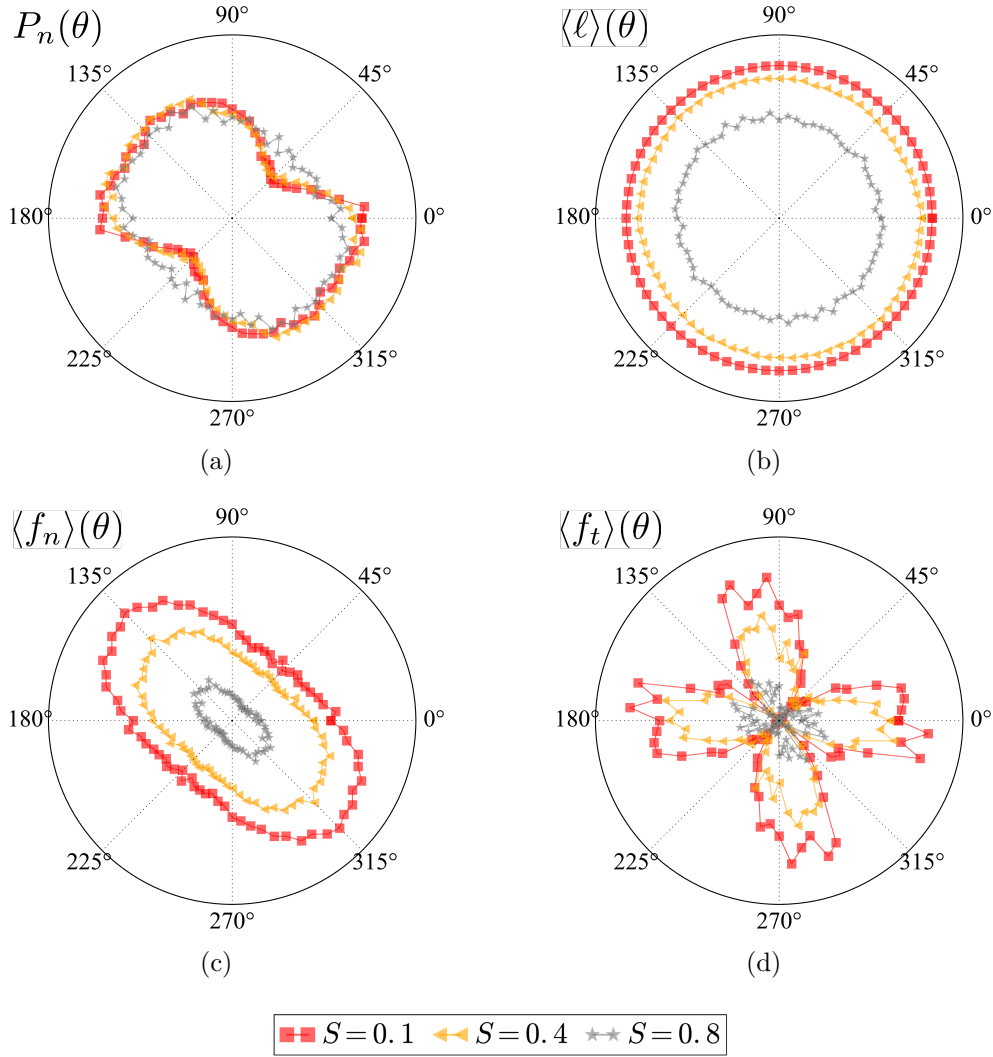


FIGURE 5.17 – Représentation polaire des fonctions (a) $P_n(\theta)$, (b) $\langle \ell \rangle(\theta)$, (c) $\langle f_n \rangle(\theta)$ et (d) $\langle f_t \rangle(\theta)$ pour $S = 0.0$ (en carrés rouges), $S = 0.4$ (en triangles jaunes), et $S = 0.8$ (en étoiles grises).

Comme il a été montré précédemment, l'angle de frottement macroscopique peut être approximé par la relation suivante [127, 122] :

$$\sin \varphi^* \simeq \frac{1}{2}(a_c + a_\ell + a_{f_n} + a_{f_t}). \quad (5.4)$$

Les valeurs de $\sin \varphi^*$ prédites par l'équation 5.4 ainsi que les valeurs macroscopiques mesurées en fonction de S sont tracées sur la Fig. 5.19. On voit que l'approximation de la résistance à travers la demi-somme des anisotropies est très bien vérifiée pour toutes les valeurs de S . Elle permet d'identifier les trois origines de la résistance au cisaillement dans l'assemblage granulaire : (1) géométrique (a_c, a_ℓ), (2) transmission des forces (a_{f_n}), et (3)

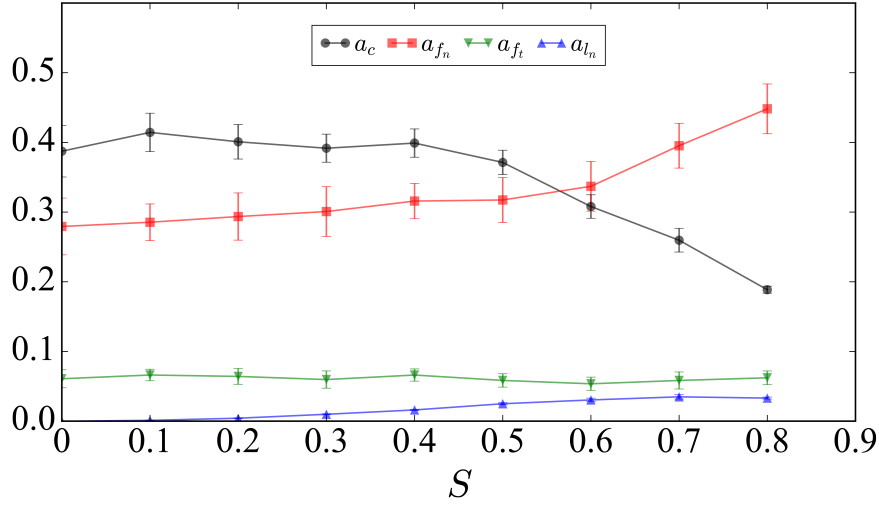


FIGURE 5.18 – Évolution de l'anisotropie des contacts (a_c), des longueurs des vecteurs branches (a_ℓ), et des forces (a_{f_n} , a_{f_t}) en fonction de polydispersité S .

mobilisation du frottement (a_{f_t}). Il est donc possible d'expliquer que la résistance macroscopique est indépendante de S grâce à la compensation entre la baisse de l'anisotropie de contacts a_c (une anisotropie purement géométrique) et le gain de l'anisotropie de forces normales a_{f_n} (une anisotropie liée à la mécanique des interactions entre grains), et une faible augmentation de l'anisotropie des longueurs des vecteurs branches. Un mécanisme de compensation similaire a été observé en 2D, mais entre l'anisotropie des contacts et celle des longueurs des vecteurs branches [149, 105]. Nous observons donc ici une différence notable entre le 2D et le 3D dont l'origine n'est pas évidente et son explication demande des efforts additionnels.

Conclusion

Motivés par le fait que le processus de fragmentation pendant la compaction d'un matériau granulaire conduit à une distribution très étalée des tailles des particules, nous avons analysé dans ce chapitre l'effet de la polydispersité de taille sur la rhéologie 3D et la microstructure des assemblages de sphères. Nous avons utilisé une distribution uniforme par fractions volumiques et fait varier l'étalement granulométrique en contrôlant le paramètre S .

Dans l'état initial, issu d'une compaction isotrope sans frottement, la compacité augmente avec l'étalement alors que la coordination des différents échantillons reste proche de $Z \simeq 6$ en accord avec la nature isostatique des assemblages construits. À l'état d'écoulement stationnaire avec frottement, un résultat contre-intuitif est que la résistance au cisaillement est indépendante de l'étalement granulométrique, alors que la compacité en dépend, comme observé aussi en 2D. Une analyse micromécanique a permis de mettre en

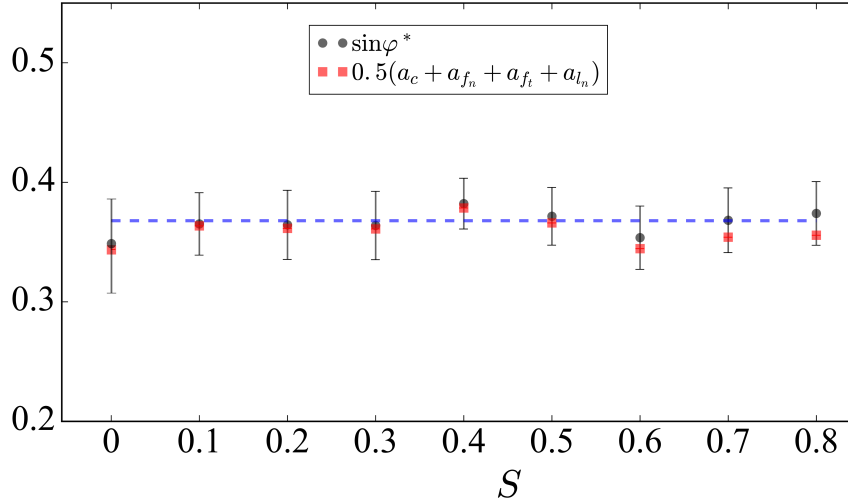


FIGURE 5.19 – La résistance au cisaillement $\sin \varphi^*$ dans l'état stationnaire en fonction de la polydispersité S (points noirs) et l'approximation à travers des ajustements harmoniques donné par l'équation 5.4 (carrés rouges). Les barres d'erreur représentent l'écart type des données.

évidence les mécanismes en jeu expliquant cette indépendance de la résistance par rapport à l'étalement. Une augmentation de S conduit à la diminution de la proportion des particules participant à la transmission des efforts. Les particules les plus grosses s'entourent de particules plus petites. En conséquence, l'anisotropie des contacts diminue au profit de l'anisotropie des forces normales de sorte que leurs contributions à la résistance au cisaillement se compensent.

Un résultat important des études présentées dans ce chapitre concerne les corrélations entre les forces de contact et les tailles des particules ou des longueurs des vecteurs branches reliant les centres des particules en contact. La force normale augmente avec la taille des particules et la relation entre force de contact normale et la longueur des vecteurs branches peut être approchée par une loi exponentielle pour les longueurs supérieures à la longueur moyenne tandis que pour des longueurs de branches inférieures à la moyenne, cette relation suit plutôt une loi de puissance. Ces corrélations permettent d'estimer les forces de contact en fonction des longueurs des vecteurs branches dans un échantillon polydisperse.

Même si les résultats présentés dans cette étude portent sur des assemblages de sphères soumis au cisaillement, ils suggèrent que pendant le processus de fragmentation au cours de la compaction certains aspects de la microstructure n'évoluent pas avec S . Ainsi, même si les valeurs moyennes des tailles des particules et des longueurs des vecteurs branches changent, leurs relations avec les forces de contact restent inchangées à condition de normaliser les forces et les longueurs par leurs valeurs moyennes respectives. C'est fondamentalement cette propriété qui explique l'indépendance de l'angle de frottement effectif vis-à-vis de l'étalement granulométrique. On peut spéculer qu'en compaction uniaxiale avec fragmentation des particules, cela implique un processus auto-similaire qui conduit à une

dépendance logarithmique de l'indice des vides (qui évolue avec la polydispersité) vis-à-vis de la contrainte de confinement. En effet, dans une évolution auto-similaire, la variation de l'indice des vides Δe est proportionnelle à l'incrément relatif de la contrainte $\Delta\sigma_h/\sigma_h$, ce qui implique une relation logarithmique. Si ce sont les contraintes de rupture des particules C_n ou C_t qui contrôlent le processus de compaction, alors la grandeur significative est $\Delta\sigma_h/C_n$ ou $\Delta\sigma_h/C_t$, ce qui entraîne une relation linéaire. Donc, en raison de la distribution large des contraintes au sein du milieu, la résistance des particules apparaît comme une contrainte typique dans une relation logarithmique plutôt que comme une contrainte caractéristique qui contrôle la fragmentation.

Conclusion générale

L'UNE des étapes centrales lors de la fabrication du combustible nucléaire est la compaction de ses constituants (poudres d'uranium). Lors de la compaction, les particules vont se fragmenter et se réarranger au sein du matériau modifiant de fait la tenue mécanique des compacts. L'évolution de la structure granulaire pendant ce chargement mécanique est encore mal connue et difficile à explorer par des moyens expérimentaux. La simulation de la compaction des poudres est un moyen alternatif pour étudier les détails du processus de compaction mais elle nécessite la prise en compte des propriétés des poudres, de la fragmentation des particules, et de leur changement de forme et de taille.

L'objectif des travaux présentés dans ce mémoire était de proposer une méthode numérique permettant de prendre en compte la fragmentation des particules et d'analyser les effets de cette fragmentation sur le processus de compaction pour des assemblages granulaires tri-dimensionnels. Dans le cadre de la méthode de Dynamique des Contacts, nous avons introduit un modèle de cellules liées ("Bonded Cell Method") en trois dimensions. Dans cette méthode, chaque particule est modélisée comme un agrégat de cellules rigides polyédriques dont les faces communes sont collées par une loi cohésive résistant à la traction et au cisaillement jusqu'à un certain seuil. Une fois que l'un de ces seuils est atteint, les liens sont cassés et remplacés par des interactions frictionnelles. Les avantages majeurs du modèle proposé sont la conservation du volume pendant la fragmentation des particules et la gestion des formes des particules. Nous avons appliquée cette méthode à l'étude de la fragmentation d'une particule pour la validation et l'optimisation des paramètres numériques et physiques. Ensuite, nous l'avons utilisée pour l'étude de la compaction uniaxiale d'un assemblage de particules.

Dans le cas des essais de compression diamétrale d'une particule de forme polyédrique, une étude systématique sur l'influence des paramètres du modèle (cohésion interne, nombre et taille des cellules, etc) a permis de montrer que la résistance à la rupture dans cette configuration comportent deux régimes en fonction du rapport des contraintes intercellulaires normales et cisailantes. La résistance des particules dépend non seulement de la résistance à la traction intercellulaire, mais aussi et surtout de la résistance au cisaillement, laquelle prévaut lorsque la résistance en traction est supérieure à la résistance en cisaillement. Dans ce cas, l'enchevêtrement des cellules domine et des fragments de formes très non convexes sont produits.

Après un choix optimisé des paramètres, nous avons ensuite étudié la compaction des assemblages de grains fragmentables soumis à la compression axiale. Nous nous sommes intéressés à l'évolution de la compaction, des tailles des particules, de la texture et de la

transmission des efforts. Les particules se fragmentent dès les premiers instants de la compaction en raison de la forte concentration des contraintes sur certaines particules. En effet, la densité de probabilité des contraintes présente dans tous les cas une large distribution des contraintes pouvant atteindre plusieurs dizaines de fois la contrainte moyenne. Pour cette raison, la fragmentation des particules est hétérogène avec une population de particules pulvérisées et de particules intactes. Ces dernières sont entourées de petits fragments et donc soumises à des contraintes déviatoriques plus faibles que les petites particules. La compaction et la fragmentation continuent après une première phase de fragmentation rapide et évolue avec un nombre croissant de fragments de tailles suffisamment petites pour combler les pores de grande taille. Le système atteint un troisième régime où une dépendance logarithmique de la déformation en fonction de la contrainte exercée est observée.

La forme de la distribution granulométrique évolue vers une courbe en loi de puissance pour les tailles intermédiaires de grains, ce qui indique que loin des tailles limites des grains, les fragments produits par compaction ne présentent pas de taille caractéristique. Pour les simulations avec trois valeurs différentes de la résistance interne des grains, nous avons montré que l'influence principale de la résistance interne concerne le premier régime de compaction alors que le taux de fragmentation après ce premier régime est le même dans tous les cas. En d'autres termes, l'évolution ultérieure du système n'efface pas les différences en nombre de fragments produits au début de la compaction. Cette fragmentation initiale peut dépendre de divers paramètres tels que la résistance des particules et le taux de déformation. Nous n'avons pas étudié l'influence du taux de déformation qui permettrait de mieux caractériser les rôles respectifs de ces paramètres.

Nous avons également montré que le rapport d'aspect moyen des particules évolue durant la fragmentation, mais il tend vers un rapport de l'ordre de 1.3, ce qui est très proche du nombre d'argent $\sqrt{2}$ observé sur des échantillons lunaires et dans les simulations numériques bi-dimensionnelles. Dans le cas des particules plus résistantes, nous avons observé un phénomène d'abrasion sous la forme de détachement de cellules et la production des fragments non convexes avec un nombre de coordination élevé.

Enfin, nous avons présenté une étude systématique de l'effet de la polydispersité de taille sur le comportement rhéologique d'un assemblage de sphères. Cette étude a été motivée par le fait que le processus de fragmentation est marqué par une augmentation de l'étalement granulométrique. De plus, une étude systématique de la texture des milieux fortement polydisperses en 3D exige un grand nombre de particules, ce qui est plus facilement réalisable avec des particules sphériques qu'avec des polyèdres. Nous avons en particulier trouvé que, comme en 2D, la résistance au cisaillement est indépendante de la polydispersité de taille des particules. Ce comportement trouve son origine dans la texture et la transmission des efforts en fonction de l'étalement granulométrique. En augmentant la dispersion de tailles, l'anisotropie des orientations des contacts diminue essentiellement en raison de la coordination plus dense des particules de grandes tailles. Mais les chaînes de forces sont pour la plupart capturées par les plus grosses particules, ce qui conduit à une anisotropie croissante des forces normales lorsque la polydispersité croît. Ces deux contributions opposées se compensent lorsque la polydispersité change, ce qui implique une résistance au cisaillement indépendante de la polydispersité.

L'ensemble de résultats présentés dans ce mémoire montre qu'il est possible de simuler des systèmes granulaires composés de particules de formes complexes pouvant évoluer en taille et forme par fragmentation sous l'effet des contraintes appliquées et de les appliquer à l'étude d'un procédé industriel. Même avec un nombre relativement faible de particules, il a été possible d'obtenir des tendances partiellement observées expérimentalement en mécanique des sols et en métallurgie des poudres. Les simulations présentent l'avantage de permettre d'accéder à la microstructure et d'obtenir une information fine sur les mécanismes de compaction et de fragmentation des particules. Toutefois une insuffisance de cette approche discrète est le nombre limité de grains simulables. Néanmoins, avec l'augmentation rapide de la puissance de calcul, on peut espérer que cette approche puisse être appliquée à l'étude des systèmes statistiquement représentatifs des matériaux considérés.

Les perspectives ouvertes par ces travaux sont nombreuses et concernent en particulier l'influence des paramètres qui n'ont pas pu être considérés dans nos études. Parmi ces paramètres, le taux de compaction joue certainement un rôle important qui reste à déchiffrer en lien avec le mécanisme d'application des incréments de force sur le matériau. Un autre paramètre que nous n'avons pas fait varier est le coefficient de frottement entre particules. Au même titre que la résistance interne des particules, le frottement intergranulaire influence les réarrangements des particules et la transmission des forces et est donc susceptible de modifier l'évolution du système pendant la compaction.

Les assemblages de grains que nous avons préparés par compression isotrope peuvent être soumis au cisaillement avec des conditions aux limites périodiques. Sous cisaillement, il serait intéressant d'étudier l'influence de la pression de confinement sur le taux de fragmentation pendant le cisaillement et de comparer la microstructure avec celle des assemblages de sphères que nous avons présenté dans ce mémoire.

Une autre analyse importante à réaliser à court terme concerne la validation (ou le contraire) des modèles micro-mécaniques dans lesquels la fragmentation est prise en compte par un simple remplacement de la compacité par la densité relative (niveau de densité sur une échelle entre les valeurs minimale et maximale de la compacité). Le fait que la résistance au cisaillement et la mobilisation du frottement entre grains soient indépendantes de la polydispersité et le fait que les chaînes de forces soient majoritairement capturées par les particules de grandes tailles, suggèrent que le comportement macroscopique n'est pas très différent de celui des systèmes monodisperses. Nous avons aussi vu que le taux de fragmentation et la relation entre les longueurs des vecteurs branches et les forces normales à leur normalisation près est indépendante de l'étalement. Ce comportement se traduit par un processus de fragmentation *auto-similaire* ou stationnaire où la distribution des tailles évolue peu et la forme (allongement et aplatissement) des fragments tend vers une forme bien définie. Mais le lien avec les modèles micro-mécaniques reste à analyser plus en détail.

Parmi les analyses complémentaires qui restent à faire dans la continuité de ces travaux, on peut citer la dissipation de l'énergie et la caractérisation de l'espace poral au cours de la compaction. Les aspects énergétiques sont essentiels pour la fragmentation. Le modèle introduit dans nos travaux est sûrement le modèle le plus simple (mais probablement aussi le plus général) de la fragmentation. Ce modèle peut être amélioré pour prendre en compte non seulement la cohésion interne des particules mais aussi leur énergie de rupture. En ce

qui concerne l'espace poral, il s'agit d'un aspect important pour le combustible nucléaire où une porosité est nécessaire pour l'évacuation du gaz de fission. Les assemblages que nous avons simulés peuvent ainsi être introduits dans un code de calcul de perméabilité pour étudier le lien entre la fragmentation et la perméabilité. Il serait également intéressant de quantifier la variabilité de la taille des pores au sein du matériau à différents stades de compaction.

Le modèle de fragmentation de grains a fait l'objet de la publication suivante [30] (voir Annexe A) :

Three-dimensional bonded-cell model for grain fragmentation

Cantor, D., Azéma, E., Sornay, P. and Radjaï, F.

Computational Particle Mechanics. 4 : 441-450, 2017.

Également, l'étude numérique sur la rhéologie des échantillons à tailles de grains variable fait l'objet d'un article que nous allons soumettre prochainement :

Rheology and structure of polydisperse three-dimensional packings made of spheres

Cantor, D., Azéma, E., Sornay, P. and Radjaï, F.

Bibliographie

- [1] CGP -Computational granular physics. <http://cgp-gateway.org>, 2017. [Online ; accessed 22-August-2017]. [Cité page 40.]
- [2] Nuclear Basics, Uranium Ore. <http://www.world-nuclear.org/nuclear-basics/how-is-uranium-ore-made-into-nuclear-fuel.aspx>, 2017. [Online ; accessed 17-June-2017]. [Cité page 11.]
- [3] C.R.A. ABREU, F.W. TAVARES et M. CASTIER : Influence of particle shape on the packing and on the segregation of spherocylinders via monte carlo simulations. *Powder Technology*, 134(1):167 – 180, 2003. [Cité page 25.]
- [4] L. AFFERRANTE, M. CIAVARELLA et E. VALENZA : Is Weibull’s modulus really a material constant ? Example case with interacting collinear cracks. *International Journal of Solids and Structures*, 43(17):5147–5157, 2006. [Cité page 14.]
- [5] T. AFSHAR, M. DISFANI, G. NARSILIO et A. ARULRAJAH : Changes to Grain Properties due to Breakage in a Sand Assembly using Synchrotron Tomography. *In Powders and Grains*, 2017. [Cité page 18.]
- [6] S. ANTONY : Evolution of force distribution in three-dimensional granular media. *Phys. Rev. E*, 63(1):011302, dec 2000. [Cité page 45.]
- [7] J.A. ÅSTRÖM et H.J. HERRMANN : Fragmentation of grains in a two-dimensional packing. *The European Physical Journal B*, 5(3):551–554, 1998. [Cité page 19.]
- [8] E. AZÉMA, N. ESTRADA et F. RADJAÏ : Nonlinear effects of particle shape angularity in sheared granular media. *Phys. Rev. E*, 86(4):041301, 2012. [Cité pages 24, 26, 44, 45 et 48.]
- [9] E. AZÉMA, S. LINERO, N. ESTRADA et A. LIZCANO : Shear strength and microstructure of polydisperse packings : The effect of size span and shape of particle size distribution. *Phys. Rev. E*, 96:022902, Aug 2017. [Cité page 28.]
- [10] E. AZÉMA et F. RADJAÏ : Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Phys. Rev. E*, 81(5):051304, may 2010. [Cité page 25.]
- [11] E. AZÉMA et F. RADJAÏ : Force chains and contact network topology in sheared packings of elongated particles. *Phys. Rev. E*, 85(3):031303, mar 2012. [Cité pages 27, 46, 109 et 110.]

-
- [12] E. AZÉMA, F. RADJAÏ, B. SAINT-CYR, J.Y. DELENNE et P. SORNAY : Rheology of three-dimensional packings of aggregates : Microstructure and effects of nonconvexity. *Phys. Rev. E*, 87(5):1–13, 2013. [Cité pages 27 et 42.]
- [13] E. AZÉMA, F. RADJAÏ et F. DUBOIS : Packings of irregular polyhedral particles : Strength, structure, and effects of angularity. *Phys. Rev. E*, 87(6):062203, jun 2013. [Cité pages 24, 26, 42 et 110.]
- [14] E. AZÉMA, F. RADJAI et G. SAUSSINE : Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles. *Mechanics of Materials*, 41(6):729 – 741, 2009. *Advances in the Dynamics of Granular Materials*. [Cité page 63.]
- [15] S. BARDENHAGEN, J. BRACKBILL et D. SULSKY : Numerical study of stress distribution in sheared granular material in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 62(3):3882–3890, sep 2000. [Cité page 45.]
- [16] J.P. BARDET : *Experimental Soil Mechanics*. Experimental Soil Mechanics. Prentice Hall, 1997. [Cité pages 23 et 25.]
- [17] G.I. BARENBLATT : The Mathematical Theory of Equilibrium of Crack in Brittle Fracture. *Adv. Appl. Mech.*, 7:55–129, 1962. [Cité page 21.]
- [18] V. BECKER, T. SCHWAGER et T. PÖSCHEL : Coefficient of tangential restitution for the linear dashpot model. *Phys. Rev. E*, 77(1):1–12, 2008. [Cité page 37.]
- [19] J. BELLE : *Uranium dioxide : properties and nuclear applications*. U.S. Atomic Energy Commission. Division of Reactor Development, Washington, D.C., USA, 1961. [Cité page 10.]
- [20] J.D. BERNAL et J. MASON : Packing of Spheres : Co-ordination of Randomly Packed Spheres. *Nature*, 188(4754):910–911, 1960. [Cité page 24.]
- [21] J.G. BERRYMAN : Random close packing of hard spheres and disks. *Phys. Rev. A*, 27(2):1053–1061, 1983. [Cité page 24.]
- [22] J. BIAREZ et P.Y. HICHER : Influence de la granulométrie et de son évolution par ruptures de grains sur le comportement mécanique de matériaux granulaires. *Revue Française de Génie Civil*, 1(4):607–631, 1997. [Cité page 17.]
- [23] D. BIDEAU et J.P. TROADEC : Compacity and mean coordination number of dense packings of hard discs. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 17(28):L731, 1984. [Cité page 42.]
- [24] M. BOTON, E. AZÉMA, N. ESTRADA, F. RADJAÏ et A. LIZCANO : Quasistatic rheology and microstructural description of sheared granular materials composed of platy particles. *Phys. Rev. E*, 87(3):1–12, 2013. [Cité page 25.]
- [25] I. BRATBERG, F. RADJAÏ et A. HANSEN : Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds. *Phys Rev E*, 66(3):1–34, 2002. [Cité page 40.]

- [26] H.J.H. BROUWERS et H.J. RADIX : Self-compacting concrete : Theoretical and experimental study. *Cement and Concrete Research*, 35(11):2116–2136, 2005. [Cité page 24.]
- [27] V. BUCHHOLTZ, J.A. FREUND et T. POESCHEL : Molecular Dynamics of Comminution in Ball Mills. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 16(1):169—182, 2000. [Cité pages 19 et 20.]
- [28] B. CAICEDO et L.E. VALLEJO : *Experimental Study of the Strength and Crushing of Unsaturated Spherical Particles*, pages 425–430. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012. [Cité page 13.]
- [29] B. CAMBOU et M. JEAN : *Micromechanics of Granular Materials*. ISTE/Hermes Science Publishing, 2007. [Cité pages 34 et 40.]
- [30] D. CANTOR, E. AZÉMA, P. SORNAY et F. RADJAÏ : Three-dimensional bonded-cell model for grain fragmentation. *Computational Particle Mechanics*, 4, jul 2017. [Cité page 120.]
- [31] D. CANTOR, N. ESTRADA et E. AZÉMA : Split-Cell Method for grain fragmentation. *Computers and Geotechnics*, 67:150–156, apr 2015. [Cité page 13.]
- [32] F. CASINI, G.M.B. VIGGIANI et S.M. SPRINGMAN : Breakage of an artificial crushable material under loading. *Granular Matter*, 15(5):661–673, 2013. [Cité page 13.]
- [33] M. CECCONI, A. DESIMONE, C. TAMAGNINI et G. M.B. VIGGIANI : A constitutive model for granular materials with grain crushing and its application to a pyroclastic soil. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 26(15):1531–1560, 2002. [Cité page 19.]
- [34] G. CHAMBON, J. SCHMITTBUHL, A. CORFDIR, N. ORELLANA, M. DIRAISON et Y. GÉRAUD : The thickness of faults : From laboratory experiments to field scale observations. *Tectonophysics*, 426(1-2):77–94, 2006. [Cité page 12.]
- [35] K.T. CHAU, X.X. WEI, R.H.C. WONG et T.X. YU : Fragmentation of brittle spheres under static and dynamic compressions : experiments and analyses. *Mechanics of Materials*, 32(9):543–554, 2000. [Cité page 13.]
- [36] Y. CHEN, A. BEST, T. HASCHKE, W. WIECHERT et H.J. BUTT : Stress and failure at mechanical contacts of microspheres under uniaxial compression. *Journal of Applied Physics*, 101(8):084908, 2007. [Cité page 13.]
- [37] Y.P. CHENG, D. WHITE, E.T. BOWMAN, M.D. BOLTON et K. SOGA : The observation of soil microstructure under load. *Powders and Grains*, pages 69–72, 2001. [Cité page 13.]
- [38] M.O. CIANTIA, M. ARROYO, F. CALVETTI et A. GENS : An approach to enhance efficiency of DEM modelling of soils with crushable grains. *Geotechnique*, (2):91–110, 2015. [Cité page 19.]
- [39] M.O. CIANTIA, G. PIÑERO, J. ZHU et T. SHIRE : On the progressive nature of grain crushing. In *Powders and Grains*, volume 140, 2017. [Cité page 18.]

- [40] S. N. COPPERSMITH, C. h. LIU, S. MAJUMDAR, O. NARAYAN et T. A. WITTEN : Model for force fluctuations in bead packs. *Phys. Rev. E*, 53:4673–4685, May 1996. [Cité page 45.]
- [41] P.A. CUNDALL : Formulation of a three-dimensional distinct element model-Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and*, 25(3):107–116, 1988. [Cité page 41.]
- [42] P.A. CUNDALL et O.D.L STRACK : A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65, 1979. [Cité page 33.]
- [43] Y.F. DAFALIAS et M.T. MANZARI : Simple Plasticity Sand Model Accounting for Fabric Change Effects. *Journal of Engineering Mechanics*, 130(6):622–634, 2004. [Cité page 19.]
- [44] T.R. DAVIES et M.J. MCSAVENEY : The role of rock fragmentation in the motion of large landslides. *Engineering Geology*, 109(1-2):67–79, 2009. [Cité page 12.]
- [45] J.P. DE BONO et G. R. MCDOWELL : DEM of triaxial tests on crushable sand. *Granular Matter*, 16(4):551–562, 2014. [Cité page 19.]
- [46] J.P. DE BONO et G.R. MCDOWELL : An insight into the yielding and normal compression of sand with irregularly-shaped particles using DEM. *Powder Technology*, 271:270–277, 2015. [Cité page 14.]
- [47] F. DE LARRARD et T. SEDRAN : Mixture-proportioning of high-performance concrete. *Cement and Concrete Research*, 32(11):1699–1704, 2002. [Cité page 24.]
- [48] G. W. DELANEY, R. D. MORRISON, M. D. SINNOTT, S. CUMMINS et P. W. CLEARY : DEM modelling of non-spherical particle breakage and flow in an industrial scale cone crusher. *Minerals Engineering*, 74:112–122, 2015. [Cité page 20.]
- [49] A. DONEV, I. CISSE, D. SACHS, E.A. VARIANO, Frank H. STILLINGER, R. CONNELLY, S. TORQUATO et P.M. CHAIKIN : Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science (New York, N.Y.)*, 303(5660):990–993, 2004. [Cité page 25.]
- [50] A. DONEV, F.H. STILLINGER, P.M. CHAIKIN et S. TORQUATO : Unusually dense crystal packings of ellipsoids. *Phys. Rev. Lett.*, 92(25 I):255506–1, 2004. [Cité page 25.]
- [51] F. DUBOIS, M. JEAN et AL. : LMGC90 wiki page. https://git-xen.lmgc.univ-montp2.fr/lmgc90/lmgc90_user/wikis/home, 2017. [Online; accessed 22-August-2017]. [Cité page 40.]
- [52] F. DUBOIS, M. JEAN, M. RENOUF, R. MOZUL, A. MARTIN et M. BAGNERIS : Lmgc90. In *10e colloque national en calcul des structures*, 2011. [Cité page 40.]
- [53] I. EINAV : Breakage mechanics-Part I : Theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(6):1274–1297, 2007. [Cité pages 16 et 19.]
- [54] I. EINAV : Breakage mechanics-Part II : Modelling granular materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(6):1298–1320, 2007. [Cité page 19.]

-
- [55] L. ELGHEZAL, M. JAMEI et I.O. GEORGOPOULOS : DEM simulations of stiff and soft materials with crushable particles : an application of expanded perlite as a soft granular material. *Granular Matter*, 15(5):685–704, 2013. [Cité page 19.]
 - [56] K. ERNSTSON : Shock spallation – a typical impact process in the Chiemgau meteorite crater strewn field. <http://www.chiemgau-impact.com/2011/10/new-monthly-images-shock-spallation-a-typical-impact-process-in-the-chiemgau-meteorite-crater-strewn-field>, 2017. [Online; accessed 17-June-2017]. [Cité page 12.]
 - [57] K. ERNSTSON : The subparallel fracturing. <http://www.impact-structures.com/impact-spain/shock-deformation-in-triassic-buntsandstein-conglomerates-spain/the-subparallel-fracturing>, 2017. [Online; accessed 17-June-2017]. [Cité page 12.]
 - [58] N. ESTRADA : Effects of grain size distribution on the packing fraction and shear strength of frictionless disk packings. *Phys. Rev. E*, 94:1–7, 2016. [Cité pages 28, 29 et 101.]
 - [59] N. ESTRADA, E. AZÉMA, F. RADJAÏ et A. TABOADA : Identification of rolling resistance as a shape parameter in sheared granular media. *Phys. Rev. E*, 84(1):2–5, 2011. [Cité page 25.]
 - [60] G. FISHERA : Sul problema elastostatico di Signorini con ambigue condizioni al contorno. In *Rendiconti della Accademia Nazionale dei Lincei*, 1963. [Cité page 35.]
 - [61] W.B. FULLER et S.E. THOMSON : The Laws of Proportioning Concrete. *Transactions of the American Society of Civil Engineers*, 59(2):67–143, 1907. [Cité page 24.]
 - [62] A.A. GRIFFITH : The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 221(582-593):163–198, 1921. [Cité pages 12 et 19.]
 - [63] F. GUILLARD, P. GOLSHAN, L. SHEN, J.R. VALDÈS et I. EINAV : Compaction dynamics of crunchy granular material. *EPJ Web of Conferences. Powders and grains*, 140, 2017. [Cité page 17.]
 - [64] J.L. GUILLET et Y. GUERIN : *Les combustibles nucléaires*. E-den, Une monographie de la Direction de l'énergie nucléaire. CEA Saclay ; Groupe Moniteur, juin 2008. [Cité pages 4, 9, 10 et 11.]
 - [65] P. GUO et R. WAN : *A Rational Approach to Stress-Dilatancy Modelling Using an Explicit Micromechanical Formulation*, pages 201–230. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007. [Cité page 19.]
 - [66] V. HAJIABDOLMAJID, P. K. KAISER et C. D. MARTIN : Modelling brittle failure of rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 39:731–741, 2002. [Cité page 19.]
 - [67] B.O. HARDIN : Crushing of Soil Particles. *Journal of Geotechnical Engineering*, 111(10):1177–1192, 1985. [Cité pages 15, 16, 66 et 67.]

- [68] L. HÉGRON, P. SORNAY et N. FAVRETTO-CRISTINI : Compaction of a bed of fragmentable UO₂ particles and associated acoustic emission. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 61(4):2175–2181, 2014. [Cité pages 18, 88 et 89.]
- [69] H.J. HERRMANN, A. HANSEN et S. ROUX : Fracture of disordered, elastic lattices in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 39(1):637–648, 1989. [Cité page 21.]
- [70] Y. HIRAMATSU et Y. OKA : Determination of the tensile strength of rock by a compression test of an irregular test piece. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 3(2):89–90, 1966. [Cité page 13.]
- [71] D. HÖHNER, S. WIRTZ et V. SCHERER : Experimental and numerical investigation on the influence of particle shape and shape approximation on hopper discharge using the discrete element method. *Powder Technology*, 235:614–627, 2013. [Cité page 23.]
- [72] F. HOMAND-ETIENNE, D. HOXHA et J.F. SHAO : A continuum damage constitutive law for brittle rocks. *Computers and Geotechnics*, 22(2):135–151, 1998. [Cité page 19.]
- [73] H. IWATA et T. HOMMA : Distribution of coordination numbers in random packing of homogeneous spheres. *Powder Technology*, 10(1-2):79–83, 1974. [Cité page 42.]
- [74] J.C. JAEGER et E.R. HOSKINS : Rock failure under the confined Brazilian test. *Journal of Geophysical Research*, 71(10):2651–2659, 1966. [Cité page 13.]
- [75] M. JEAN : The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177(3-4):235–257, 1999. [Cité page 33.]
- [76] M. JEAN et J.J. MOREAU : Dynamics in the presence of unilateral contacts and dry friction : A numerical approach. In G. DEL PIERO et F. MACERI, éditeurs : *Unilateral problems in structural analysis - 2*, pages 151–196, 1987. [Cité page 33.]
- [77] M. JEAN et J.J. MOREAU : Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, pages 31–48, 1992. [Cité page 33.]
- [78] R. JEFFREY, X. ZHANG et Z. CHEN : 5 - hydraulic fracture growth in naturally fractured rock. In A.K. SHOJAEI et J. SHAO, éditeurs : *Porous Rock Fracture Mechanics*, pages 93 – 116. Woodhead Publishing, 2017. [Cité page 12.]
- [79] Z. KARATZA, E. ANDO, S.A. PAPANICOLOPULOS, G. VIGGIANI et J.Y. OOI : Evolution of particle breakage studied using x-ray tomography and the discrete element method. In *Powders and Grains*, 2017. [Cité page 18.]
- [80] J. KATAGIRI, T. MATSUSHIMA, Y. YAMADA, A. TSUCHIYAMA, T. NAKANO, K. UE-SUGI, M. OHTAKE et K. SAIKI : Investigation of 3d grain shape characteristics of lunar soil retrieved in apollo 16 using image-based discrete-element modeling. *Journal of Aerospace Engineering*, 28(4):04014092, 2015. [Cité page 84.]
- [81] N.P. KRUYT : Micromechanical study of fabric evolution in quasi-static deformation of granular materials. *Mechanics of Materials*, 44:120–129, jan 2012. [Cité page 43.]
- [82] F. KUN, G.A. D’ADDETTA, E. RAMM et H. HERRMANN : Two-dimensional dynamic simulation of fracture and fragmentation of solids. *Comp. Ass. Mech. Engng.*, 6:385–402, 1999. [Cité page 20.]

-
- [83] F. KUN et H.J. HERRMANN : A study of fragmentation processes using a discrete element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and engineering*, 7825(96), 1996. [Cité page 19.]
- [84] A.V. KYRYLYUK et A.P. PHILIPSE : Effect of particle shape on the random packing density of amorphous solids. *physica status solidi (a)*, 208(10):2299–2302, 2011. [Cité page 25.]
- [85] P.V. LADE, J.A. YAMAMURO et P.A. BOPP : Significance of Particle Crushing in Granular Materials. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 123(9):889–890, 1997. [Cité pages 66 et 67.]
- [86] H. LAUBIE, F. RADJAÏ, R. PELLENQ et F.J. ULM : A potential-of-mean-force approach for fracture mechanics of heterogeneous materials using the lattice element method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 105:116–130, 2017. [Cité page 19.]
- [87] H. LAUBIE, F. RADJAÏ, R. PELLENQ et F.J. ULM : Stress Transmission and Failure in Disordered Porous Media. *Phys. Rev. Lett.*, 119(7):075501, 2017. [Cité page 19.]
- [88] D.M. LEE : *The angles of friction of granular fills*. Thèse de doctorat, University of Cambridge, 1992. [Cité pages 13 et 14.]
- [89] D. LI et L. Ngai Y. WONG : The brazilian disc test for rock mechanics applications : Review and new insights. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 46(2):269–287, 2013. [Cité page 13.]
- [90] C.H. LIU, S.R. NAGEL, D.A. SCHECTER, S. COPPERSMITH, S. MAJUMDAR, O. NARAYAN et T.A. WITTEN : Force fluctuations in a bead packs. *Science*, 269:513, 1995. [Cité pages 45 et 46.]
- [91] Y.Y. LIU, A.T. YEUNG, D.L. ZHANG et Y.R. LI : Experimental study on the effect of particle shape on stress dip in granular piles. *Powder Technology*, 319:415–425, 2017. [Cité page 23.]
- [92] S. LOBO-GUERRERO et L.E. VALLEJO : Discrete Element Method Analysis of Rail-track Ballast Degradation during Cyclic Loading. *Granular Matter*, 8(3-4):195–204, 2006. [Cité page 20.]
- [93] S. LOBO-GUERRERO, L.E. VALLEJO et L.F. VESGA : Visualization of Crushing Evolution in Granular Materials under Compression Using DEM. *International Journal of Geomechanics*, 6(3):195–200, 2006. [Cité page 19.]
- [94] A.E.H. LOVE : *A treatise on the mathematical theory of elasticity*. Cambridge university press, 1927. [Cité page 48.]
- [95] F. LUDEWIG et N. VANDEWALLE : Strong interlocking of nonconvex particles in random packings. *Phys. Rev. E*, 85(5):4–7, 2012. [Cité page 27.]
- [96] G. MARKETOS et M. BOLTON : Quantifying the extent of crushing in granular materials : A probability-based predictive method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(10):2142–2156, 2007. [Cité page 14.]

- [97] P. MAX : Packing of spheres. *Nature*, 188:908–909, 1960. [Cité page 24.]
- [98] G.R. McDOWELL et M.D. BOLTON : On the micromechanics of crushable aggregates. *Géotechnique*, 1998. [Cité pages 14, 59, 66 et 67.]
- [99] R.L. MICHALOWSKI et F. ASCE : Coefficient of Earth Pressure at Rest. 131(November):1429–1433, 2005. [Cité page 79.]
- [100] J.J. MOREAU : New computation methods in granular dynamics. *Powders and grains*, page 227–232, 1993. [Cité page 36.]
- [101] F. NADER, C. SILVANI et I. DJERAN-MAIGRE : Grain breakage under uniaxial compression, through 3D DEM modelling. *EPJ Web of Conferences. Powders and grains*, 140:07005, 2017. [Cité page 20.]
- [102] S. NEZAMABADI, T.H. NGUYEN, J.Y. DELENNE, J. AVERSENG, X. FRANK et F. RADJAÏ : MPM with Frictional Contact for Application to Soft Particulate Materials. *Procedia Engineering*, 175:141–147, 2017. [Cité page 40.]
- [103] D.H. NGUYEN : *Microstructure and mechanical behavior of polydisperse and crushable granular media*. Thèse, Université Montpellier 2; CEA, DEN, DEC, SPUA, LCU, décembre 2014. [Cité pages 9, 43, 84, 93 et 101.]
- [104] D.H. NGUYEN, E. AZÉMA, P. SORNAY et F. RADJAÏ : Bonded-cell model for particle fracture. *Phys. Rev. E*, 91(2):022203, 2015. [Cité pages 20, 21, 51 et 66.]
- [105] D.H. NGUYEN, E. AZÉMA, P. SORNAY et F. RADJAÏ : Effects of shape and size polydispersity on strength properties of granular materials. *Phys. Rev. E*, 91(3):032203, 2015. [Cité pages 28, 29, 98 et 112.]
- [106] F. NICOT, N. HADDA, M. GUESSASMA, J. FORTIN et O. MILLET : On the definition of the stress tensor in granular media. *International Journal of Solids and Structures*, 50(14):2508 – 2517, 2013. [Cité page 48.]
- [107] F. NICOT et R. WAN : *Micromécanique de la rupture dans les milieux granulaires (Traité MIM, série géomatériaux)*. Hermes Science Publications, 2008. [Cité pages 17 et 18.]
- [108] C. NOUGUIER, C. BOHATIER, J.J. MOREAU et F. RADJAÏ : Force fluctuations in a pushed granular material. *Granular Matter*, 2(4):171–178, 2000. [Cité page 40.]
- [109] M. ODA, J. KONISHI et S. NEMAT-NASSER : Some experimentally based fundamental results on the mechanical behaviour of granular materials. *Géotechnique*, 30(4):479–495, 1980. [Cité page 43.]
- [110] A. OKABE, B. BOOTS et K. SUGIHARA : *Spatial Tessellations : Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA, 1992. [Cité page 53.]
- [111] N. OUCHIYAMA : Porosity estimation from particle size distribution. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 25(1):125–129, 1986. [Cité page 24.]
- [112] K. PARK et G.H. PAULINO : Cohesive Zone Models : A Critical Review of Traction-Separation Relationships Across Fracture Surfaces. *Applied Mechanics Reviews*, 64(November 2011):20, 2013. [Cité page 21.]

-
- [113] P.E. PEYNEAU et J.N. ROUX : Frictionless bead packs have macroscopic friction, but no dilatancy. *Phys. Rev. E*, 78:011307, Jul 2008. [Cité page 98.]
- [114] R. PITCHUMANI, O. ZHUPANSKA, G.M.H MEESTERS et B. SCARLETT : Measurement and characterization of particle strength using a new robotic compression tester. *Powder Technology*, 143-144:56–64, 2004. [Cité page 14.]
- [115] V. POPOV : *Contact Mechanics and Friction. Physical Principles and Applications*. Springer, 2010. [Cité page 37.]
- [116] D.O. POTYONDY et P.A. CUNDALL : A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(8):1329 – 1364, 2004. Rock Mechanics Results from the Underground Research Laboratory, Canada. [Cité page 20.]
- [117] M.C. POWERS : A new roundness scale for sedimentary particles. *Journal of Sedimentary Petrology*, 23(2):117–119, 1953. [Cité page 24.]
- [118] R. QUEY, P.R. DAWSON et F. BARBE : Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17-20):1729–1745, 2011. [Cité page 54.]
- [119] J.C. QUEZADA, P. BREUL, G. SAUSSINE et F. RADJAÏ : Stability, deformation, and variability of granular fills composed of polyhedral particles. *Phys. Rev. E*, 86(3):1–11, 2012. [Cité page 40.]
- [120] F. RADJAÏ : Modeling force transmission in granular materials. *Comptes Rendus Physique*, 16(1):3 – 9, 2015. Granular physics / Physique des milieux granulaires. [Cité page 46.]
- [121] F. RADJAÏ, M. JEAN, J.J. MOREAU et S. ROUX : Force Distributions in Dense Two-Dimensional Granular Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 77(2):274–277, 1996. [Cité page 45.]
- [122] F. RADJAÏ et V. RICHEFEU : Bond anisotropy and cohesion of wet granular materials. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 367:5123–5138, 2009. [Cité page 111.]
- [123] F. RADJAÏ, D. E. WOLF, M. JEAN et J.J. MOREAU : Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Phys. Rev. Lett.*, 80:61–64, Jan 1998. [Cité page 48.]
- [124] W. J. M. RANKINE : On the Stability of Loose Earth. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 147(0):9–27, 1857. [Cité page 78.]
- [125] M. RENOUF, F. DUBOIS et P. ALART : A parallel version of the non smooth contact dynamics algorithm applied to the simulation of granular media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168(1-2):375–382, 2004. [Cité page 40.]
- [126] A. RIES, D.E. WOLF et T. UNGER : Shear zones in granular media : Three-dimensional contact dynamics simulation. *Phys. Rev. E*, 76(5):1–9, 2007. [Cité page 40.]
- [127] L. ROTHENBURG et R.J. BATHURST : Analytical study of induces anisotropy in idealized granular media. *Géotechnique*, 39:601–614, 1989. [Cité pages 43, 48 et 111.]

-
- [128] J.N. ROUX : Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Phys. Rev. E*, 61:6802–6836, Jun 2000. [Cité pages 42 et 98.]
- [129] S. SACANNA, L. ROSSI, A. WOUTERSE et A.P. PHILIPSE : Observation of a shape-dependent density maximum in random packings and glasses of colloidal silica ellipsoids. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 19(37):376108, 2007. [Cité page 25.]
- [130] B. SAINT-CYR, J.Y. DELENNE, C. VOIVRET, F. RADJAÏ et P. SORNAY : Rheology of granular materials composed of nonconvex particles. *Phys. Rev. E*, 041302:1–14, 2011. [Cité pages 27, 28, 47 et 109.]
- [131] B. SAINT-CYR, F. RADJAÏ, J.Y. DELENNE et P. SORNAY : Cohesive granular materials composed of nonconvex particles. *Phys. Rev. E*, 87(5):1–18, 2013. [Cité pages 27 et 40.]
- [132] C. SAMMIS, G. KING et R. BIEGEL : The kinematics of gouge deformation. *Pure and Applied Geophysics PAGEOPH*, 125(5):777–812, 1987. [Cité page 12.]
- [133] G. SAUSSINE : *Contribution à la modélisation de granulats tridimensionnels : application au ballast*. Thèse de doctorat, 2004. [Cité page 41.]
- [134] G. SAUSSINE, C. CHOLET, P.E. GAUTIER, F. DUBOIS, C. BOHATIER et J.J. MOREAU : Modelling ballast behaviour under dynamic loading. Part 1 : A 2D polygonal discrete element method approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(19-22):2841–2859, 2006. [Cité pages 40 et 41.]
- [135] P. SCHUHMACHER, F. RADJAÏ et S. ROUX : Wall roughness and nonlinear velocity profiles in granular shear flows. volume 03090, pages 2–5, 2017. [Cité page 40.]
- [136] T. SCHWAGER, V. BECKER et T. PÖSCHEL : Coefficient of tangential restitution for viscoelastic spheres. *European Physical Journal E*, 27(1):107–114, 2008. [Cité page 37.]
- [137] A. SIGNORINI : Questioni di elasticità non linearizzata e semilinearizzata. In *Rendiconti di Matematica e delle sue Applicazioni*, 1959. [Cité page 35.]
- [138] L. STARON, F. RADJAÏ et J.P. VILOTTE : Multi-scale analysis of the stress state in a granular slope in transition to failure. *The European physical journal. E, Soft matter*, 18(3):311–20, 2005. [Cité page 40.]
- [139] L. STARON, J.P. VILOTTE et F. RADJAÏ : Preavalanche instabilities in a granular pile. *Phys. Rev. Lett.*, 89(1):204302, 2002. [Cité page 40.]
- [140] M. STASIAK, G. COMBE, J. DESRUES, V. RICHEFEU, P. VILLARD et G. ARMAND : Experimental investigation of mode I fracture for brittle tube-shaped particles. *EPJ Web of Conferences. Powders and grains*, 07015:4–7, 2017. [Cité page 13.]
- [141] I. STEFANOEU et J. SULEM : Existence of a threshold for brittle grains crushing strength : two-versus three- parameter Weibull distribution fitting. *Granular Matter*, Dec 2015. [Cité page 13.]
- [142] D.N. SUTHERLAND : The Random Packing of Circles in a Plane. *Journal of Colloid and Interface Science*, 60(1), 1977. [Cité page 24.]

- [143] A. TABOADA, K.J. CHANG, F. RADJAÏ et F. BOUCHETTE : Rheology, force transmission, and shear instabilities in frictional granular media from biaxial numerical tests using the contact dynamics method. *Journal of Geophysical Research B : Solid Earth*, 110(9):1–24, 2005. [Cité page 40.]
- [144] V. TOPIN, Y. MONERIE, F. PERALES et F. RADJAÏ : Collapse dynamics and runout of dense granular materials in a fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 109(18):1–5, 2012. [Cité page 40.]
- [145] O. TSOUNGUI, D. VALLET et J.C. CHARMET : Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials. *Powder Technology*, 105(1-3):190–198, 1999. [Cité pages 19 et 20.]
- [146] L.E. VALLEJO et S. LOBO-GUERRERO : DEM analysis of crushing around driven piles in granular materials. *Géotechnique*, 55(8):617–623, 2005. [Cité pages 19 et 20.]
- [147] C. VOIVRET : *Texture et comportement des matériaux granulaires à grande polydispersité*. Thèse de doctorat, Université Montpellier II-Sciences et Techniques du Languedoc, 2008. [Cité page 95.]
- [148] C. VOIVRET, F. RADJAÏ, J.Y. DELENNE et M.S. EL YOUSOUFI : Space-filling properties of polydisperse granular media. *Phys. Rev. E*, 76(2):1–12, 2007. [Cité pages 28, 46, 47 et 71.]
- [149] C. VOIVRET, F. RADJAÏ, J.Y. DELENNE et M.S. EL YOUSOUFI : Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 102(17):2–5, 2009. [Cité pages 46, 93, 98, 101 et 112.]
- [150] H. WADELL : Volume, Shape, and Roundness of Quartz Particles. *The Journal of Geology*, 43(3):250–280, 1935. [Cité page 22.]
- [151] R.G. WAN et P.J. GUO : A simple constitutive model for granular soils : Modified stress-dilatancy approach. *Computers and Geotechnics*, 22(2):109–133, 1998. [Cité page 19.]
- [152] R.G. WAN et P.J. GUO : A pressure and density dependent dilatancy model for granular materials. *Soils and Foundations*, 39(6):1–11, 1999. [Cité page 19.]
- [153] J.T. WEIDINGER, O. KORUP, H. MUNACK, U. ALTENBERGER, S.A. DUNNING, G. TIPPELT et W. LOTTERMOSER : Giant rockslides from the inside. *Earth and Planetary Science Letters*, 389:62–73, 2014. [Cité page 12.]
- [154] J. WIACEK, M. MOLEND, J. HORABIK et J.Y. OOI : Influence of grain shape and intergranular friction on material behavior in uniaxial compression : Experimental and DEM modeling. *Powder Technology*, 217:435–442, 2012. [Cité page 23.]
- [155] F.K. WITTEL : Single particle fragmentation in ultrasound assisted impact comminution. *Granular Matter*, 12(4):447–455, 2010. [Cité pages 20 et 21.]
- [156] S.Z. WU et K.T. CHAU : Dynamic response of an elastic sphere under diametral impacts. *Mechanics of Materials*, 38(11):1039–1060, 2006. [Cité pages 14, 15 et 57.]
- [157] A.B. YU et N. STANDISH : An analytical-parametric theory of the random packing of particles. *Powder Technology*, 55(3):171–186, 1988. [Cité page 24.]

- [158] A.B. YU et N. STANDISH : A study of the packing of particles with a mixture size distribution. *Powder Technology*, 76(2):113–124, 1993. [Cité page 24.]
- [159] F. ZAMPONI : Mathematical physics : packings close and loose. *Nature*, 453(May): 606–607, 2008. [Cité page 42.]
- [160] A. ZUBELEWICZ et Z.P. BAŽANT : Interface Element Modeling of Fracture in Aggregate Composites. *Journal of Engineering Mechanics*, 113(11):1619–1630, 1987. [Cité page 21.]

Annexes

Annexe A

Article publié dans Computational
Particle Mechanics

Three-dimensional bonded-cell model for grain fragmentation

D. Cantor^{1,2}  · E. Azéma^{1,3} · P. Sornay² · F. Radjai^{1,4}

Received: 29 March 2016 / Revised: 14 July 2016 / Accepted: 21 July 2016 / Published online: 28 July 2016
© OWZ 2016

Abstract We present a three-dimensional numerical method for the simulation of particle crushing in 3D. This model is capable of producing irregular angular fragments upon particle fragmentation while conserving the total volume. The particle is modeled as a cluster of rigid polyhedral cells generated by a Voronoi tessellation. The cells are bonded along their faces by a cohesive Tresca law with independent tensile and shear strengths and simulated by the contact dynamics method. Using this model, we analyze the mechanical response of a single particle subjected to diametral compression for varying number of cells, their degree of disorder, and intercell tensile and shear strength. In particular, we identify the functional dependence of particle strength on the intercell strengths. We find that two different regimes can be distinguished depending on whether intercell shear strength is below or above its tensile strength. In both regimes, we observe a power-law dependence of particle strength on both intercell strengths but with different exponents. The strong effect of intercell shear strength on the particle strength reflects an interlocking effect between cells. In fact, even at low tensile strength, the particle global strength can still con-

siderably increase with intercell shear strength. We finally show that the Weibull statistics describes well the particle strength variability.

Keywords Bonded-cell model · Fragmentation · Discrete element method · Contact dynamics method · Voronoi cell · Weibull statistics

1 Introduction

The fragmentation of particles is an important factor in everyday use of granular materials and in processing industries dealing with powders and grains. It modifies the grain size distribution [9,21,33], packing fraction [15,25,29], shear strength [30], yielding surface [34,50], and microstructure of granular materials [31]. However, there is presently no clear quantitative understanding of such effects in the rheology and processing of granular materials and, conversely, the properties of the fragments such as their size, shape, and strengths cannot be predicted from the process [23].

The effects of particle crushing can be investigated experimentally but its origins are much more difficult to trace back to the particle scale. In a similar vein, some continuum mechanics models are able to reproduce phenomenologically the effects of particle fragmentation or degradation [8,13]. Such models are, however, mostly based on idealized description of grain failure. For these reasons, numerical simulations based on the discrete element method (DEM) have been extensively used for a better understanding of the fragmentation process and its impact on the macroscopic behavior. The first DEM simulations of crushable particles were proposed in the late 80s [62] and 90s [1,28,58]. Initially, these models were two-dimensional and involved simplified (circular) shapes of fragments and their interactions (frictional con-

D. Cantor
david.cantor@umontpellier.fr

¹ Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC), Université de Montpellier, CNRS, Montpellier, France

² CEA, DEN, DEC, SFER, LCU, 13108
Saint Paul lez Durance, France

³ Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, 239 Huay Kaew Rd, Chiang Mai 50200, Thailand

⁴ Multi-Scale Materials Science for Energy and Environment <MSE>², UMI 3466 CNRS-MIT Energy Initiative, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA 02139, USA

tacts). 2D simulations are now capable of reproducing the evolution of cracks and complex geometries of fragments [39,40].

With increasing computational power, three-dimensional models have also been introduced recently. These models can be classified at least in two main groups. The first group, which we call *Replacing Method*, consists in substituting each broken particle when typically a load threshold is reached by a set of smaller particles [16,61]. However, a nonconservation of mass and volume may occur as the replacements are made and artificial overlapping between particles is sometimes allowed, producing local elastic over-stresses.

The second group, which was coined *Bonded-Cell Method* (BCM) in Ref. [40], is based on the construction of particles by agglomerating a set of potential fragments. These small fragments are held together by diverse mechanisms that assign a bonding strength at each contact. The bonding of spheres is the most wide-spread model to simulate crushing in 3D. However, the spheres are obviously unable to reproduce the broad shape variability of fragments. Moreover, the apparent volume of a sphere agglomerate is considerably larger than those of its fragments. In order to circumvent these problems, some authors have used polygonal or polyhedral subparticles or cells generated by Voronoi tessellation [22]. These cells pave the whole volume of the particle so that the volume is conserved during particle fracture and fragmentation. Nevertheless, intercell contacts are modeled by a linear force law as that between spherical subparticles. This is clearly an unphysical approximation since the contacts extend along a surface between cells and a realistic model must account for the fact that the treatment of such contacts need at least three displacement variables at three independent contact points.

In this paper, we introduce a three-dimensional BCM approach in the framework of the contact dynamics (CD) method. In 3D, each particle is composed of cells of irregular polyhedral shape. The framework of the CD method has the advantage of accounting for the correct kinematics of face-face contacts between fragments [27,46]. Furthermore, the treatment of cells as rigid particles leads to numerically efficient simulations in 3D. We also introduce a general cohesive law governing cell interactions before fracture. Using this approach, we investigate the fracture properties of a single particle subjected to diametral compression.

This paper is organized as follows: In Sect. 2.3, we present the 3D BCM as well as the treatment of intercell contacts within the CD method. In Sect. 3, numerical simulations of diametral compaction are introduced. In Sect. 3.2, we investigate the effects of different geometrical and mechanical parameters on the particle strength. Finally, in Sect. 4, a brief summary and perspectives of this work are presented.

2 BCM with contact dynamics

2.1 Voronoi meshing

We perform a three-dimensional meshing of polyhedral particles with the help of the package NEPER [43] and using a centroidal Voronoi tessellation [18]. In general, a Voronoi tessellation is a division of a space $\mathbf{X}$ in $\mathbb{R}^N$ via a set of points or generators $\{P_j\}$. The main property of this division is that any point x belongs to a Voronoi cell V_i if a distance function $d(x, P_i)$ is minimal between all the generators [42]. A compact definition of a Voronoi cell may be written as follows:

$$V_i = \{x \in \mathbf{X} \mid d(x, P_i) < d(x, P_j) \forall j \neq i\}. \quad (1)$$

In three dimensions, the Voronoi tessellation produces always convex polyhedra sharing common faces if the region $\mathbf{X}$ is also convex.

Furthermore, a centroidal Voronoi tessellation has the property that the generators are also the centroids of the cells. The points $\{P_j\}$ are usually located randomly and, as a consequence, the locations of those points differ from those of the corresponding cell centroids $\{c_j\}$. One possible technique to reduce the distances $d(P_j, c_j)$ is known as the Lloyd's method. This iterative procedure may be described as follows:

1. Define the space $\mathbf{X}$,
2. select points $\{P_j\}$,
3. define the corresponding cells $\{V_j\}$,
4. compute the centroid of each cell $\{c_j\}$,
5. replace points $\{P_j\}$ with points $\{c_j\}$ and recompute $\{V_j\}$,
6. repeat from step 4 until a convergence criterion is satisfied.

The convergence criterion that is used in this work may be written as follows:

$$\frac{\sum_{j=1}^{n_{cl}} d(P_j, c_j)}{\sum_{j=1}^{n_{cl}} r_j} \leq \lambda, \quad (2)$$

where n_{cl} is the number of cells, and r_j is the average radius of cell j . This ratio should be below or equal the tolerance λ at which we stop the iterations. The quantity λ is actually a quite interesting parameter because, as it is shown below, it may be interpreted as a measure of disorder of the cell shapes and their distributions.

Figures 1 and 2 display several examples of meshing of a truncated icosahedron, a semiregular polyhedron with 60 vertices and 21 faces, for $\lambda = 0.25$ and two different numbers of cells, and for $n_{cl} = 250$ and two values of λ , respectively. In general, values of $\lambda \simeq 0$ produce less elongated shapes and

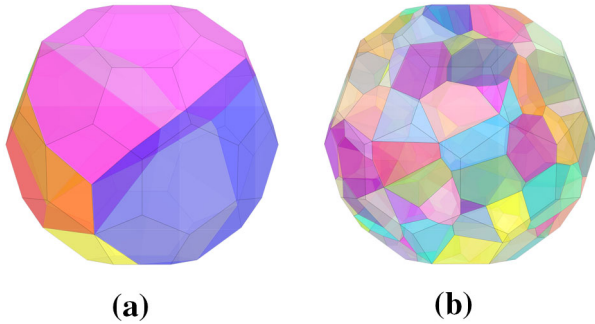


Fig. 1 Examples of icosahedral particles for $\lambda = 0.25$ and meshed by **a** 5 and **b** 250 cells

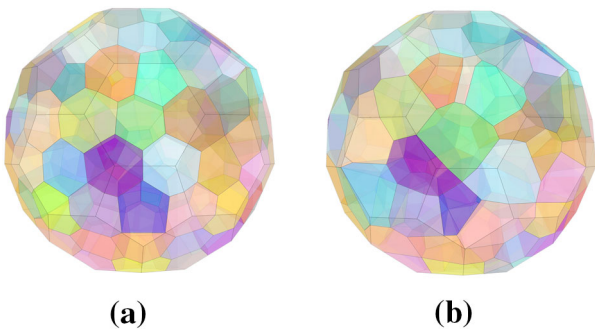


Fig. 2 Examples of icosahedral particles composed of 250 Voronoi cells and disorder parameters $\lambda = 0.005$ (**a**) and $\lambda = 0.5$ (**b**)

the cells are well distributed in the volume. As λ increases, the dislocation of the centroids with respect to the generators create disorder in the assembly of cells.

By construction, the sizes of the initial aggregates and cells determine the upper and lower bounds of the fragment size distributions during crushing simulations. In this sense, for DEM simulations it is important to optimize the number of cells per aggregate in order to ensure the representativity of the fragments sizes for a convenient computational time.

2.2 Cell interactions

The contact between two polyhedral shapes can have three different geometries: contact point, contact line, and contact surface, as shown schematically in Fig. 3. The determination of the contacts between two polyhedral cells is performed in several steps. First, a “bounding box” method is used to compute a list of neighboring pairs. Then, for each pair, the overlaps are calculated through the so-called “common plane” method introduced by Cundall [17]. This is an iterative method based on the perturbation of the orientation of the normal vector. The process is initialized by a first guess based on the vector joining the centers of the two polyhedra. This detection procedure is fairly rapid when correctly optimized [37,38]. The interactions may include

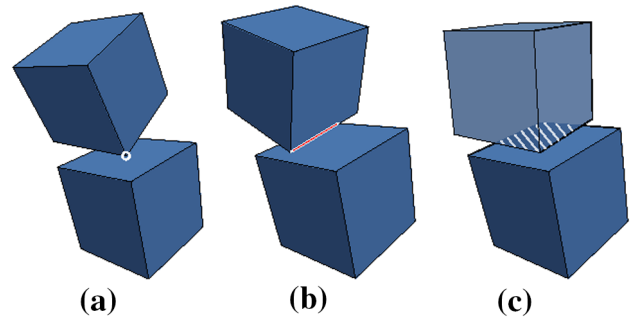


Fig. 3 Examples of contact types that may occur between polyhedral cells: **a** Point, **b** line, and **c** surface

vertex–vertex, vertex–edge, vertex–face, edge–edge, edge–face, or face–face contacts. The contact line, such as that produced by a edge–face interaction, can be represented by two distinct points, whereas a surface (face–face) contact can be replaced by three points since they involve an equivalent number of geometrical unilateral constraints between two faces. Note that vertex–vertex or vertex–edge contacts are rare but, when they occur, the common plane method is able to provide a normal direction based on geometrical criteria.

In the Bonded-Cell Method, we assume that rigid cells interact only via cohesive forces through face–face contacts. The normal adhesion threshold f_n^c depends on the area S of the contact. Since the contact plane is represented by three points, the tensile threshold for each contact point is given by $f_n^c = C_n S/3$, where C_n is the internal cohesion of the material. In the same way, the shear threshold for each contact point in the contact plane is given by $f_t^c = C_t S/3$, where C_t is the contact shear strength. C_n and C_t are assumed to be independent strength parameters of the material. Once either of the critical stresses is reached, the intercell bond breaks irreversibly and the interaction turns into a frictional contact with coefficient of friction μ_{cl} . Note that, since the cells are rigid, a cohesive face–face contact can not kinematically break until the three points representing the interface do so, i.e., when either of the two thresholds is reached for each of the three points.

The normal force f_n and normal velocity u_n at each contact point satisfy the following relations [46]

$$\begin{cases} u_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ u_n = 0 \Rightarrow f_n + C_n S/3 > 0 \end{cases} \quad (3)$$

which simply expresses the unilateral nature of the contact between the two cells at their contact points in the presence of a cohesive force. In the same way, along the tangential direction, we have the following relation between the tangential force f_t and the tangential velocity u_t :

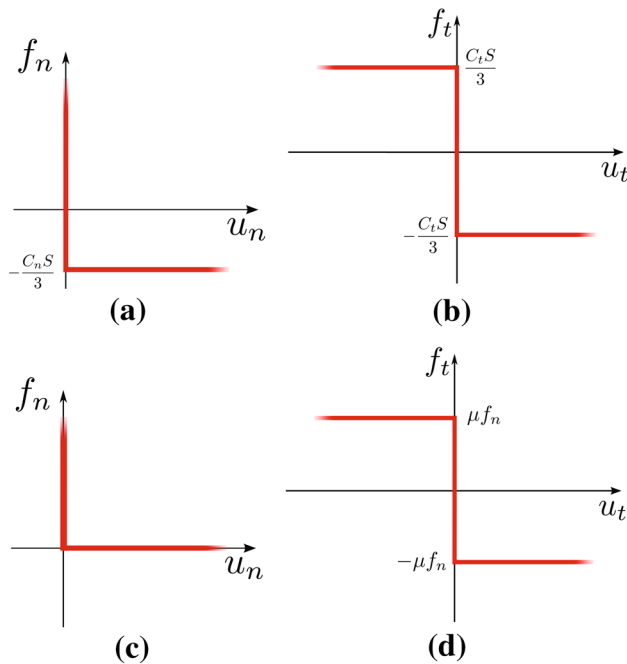


Fig. 4 Complementarity relations along the normal and tangential directions of the contact frame for cohesive contacts (**a**, **b**) and broken contacts (**c**, **d**) respectively

$$\begin{cases} u_t > 0 \Rightarrow f_t = -C_t S/3 \\ u_t = 0 \Rightarrow -C_t S/3 \leq f_t \leq C_t S/3 \\ u_t < 0 \Rightarrow f_t = C_t S/3 \end{cases} \quad (4)$$

These “complementarity relations” are represented by two graphs shown in Fig. 4a, b.

The above relations should be taken into account together with the equations of motion in order to determine both the velocities and forces at all contacts in the system. We use the contact dynamics (CD) method, which, as briefly discussed below, allows for exact prescription of these relations based on an implicit time-stepping integration scheme. To use molecular dynamics (MD) or common DEM, it is necessary to regularize the above relations so that the classical explicit integration schemes can be applied.

At each time step, the “critical” contact points, where $u_n > 0$ (separation) or $|u_t| > 0$ (sliding), break irreversibly and the contact point turns into a cohesionless frictional contact governed by the following relations:

$$\begin{cases} u_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ u_n = 0 \Rightarrow f_n > 0 \end{cases} \quad (5)$$

and

$$\begin{cases} u_t > 0 \Rightarrow f_t = -\mu_{cl} f_n \\ u_t = 0 \Rightarrow -\mu_{cl} f_n \leq f_t \leq \mu_{cl} f_n \\ u_t < 0 \Rightarrow f_t = \mu_{cl} f_n \end{cases} \quad (6)$$

The graphs of these relations are shown in Fig. 4c, d.

2.3 Contact dynamics

The above complementarity relations were prescribed within the CD method [27, 35, 46, 59]. In this method, the rigid-body equations of motion are integrated for all particles, which are treated as undeformable bodies, by taking into account the kinematic constraints resulting from the complementarity relations. An iterative algorithm similar to Gauss–Seidel iterations is used to determine the contact forces and particle velocities simultaneously at all potential contacts. Since this algorithm is implicit, the contact velocities u_n and u_t entering the complementarity relations can represent the velocities u_n^+ and u_t^+ at the end of a time step. This is equivalent to the assumption that the coefficients e_n and e_t of normal and tangential restitution are both zero. However, it is also possible to use the complementarity relations with the following weighted means:

$$u^n = \frac{e_n u_n^- + u_n^+}{1 + e_n} \quad (7)$$

$$u^t = \frac{e_t u_t^- + u_t^+}{1 + e_t}, \quad (8)$$

where u_n^- and u_t^- are the normal and tangential contact velocities at the beginning of a time step. With complementary relations involving these weighted velocities, it can be shown that in a binary collision between two particles the postcollisional velocities are indeed given by $u_n^+ = -e_n u_n^-$ and $u_t^+ = -e_t u_t^-$. In this way the contact laws involve five independent parameters: coefficient of friction μ_{cl} , coefficient of normal restitution e_n , coefficient of tangential restitution e_t , normal cohesive strength C_n , and tangential cohesive strength C_t .

An implicit time-stepping scheme makes the CD method unconditionally stable. In contrast to the molecular dynamics method, in the CD method the tiny numerical overlaps between particles are used for contact detection but they do not represent an elastic deflection. For this reason, the time step can be larger than that in the MD method or DEM. The CD method has been extensively employed for the simulation of granular materials in 2D and 3D [2, 4–7, 12, 19, 36, 41, 44, 45, 48, 49, 51–54, 56, 57]. We implemented the Bonded-Cell method in the software LMGC90 [20]. Video samples of diametral compression tests can be found at www.cgp-gateway.org/ref035.

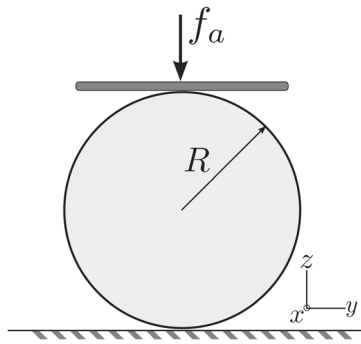


Fig. 5 Schematic representation of diametral compression test on a particle of average radius R

3 Diametral compression and particle strength

3.1 Diametral compression of an icosahedron

We consider icosahedral particles of mean radius R compressed between two platens, as illustrated in Fig. 5. A gradually increasing vertical force f_a is applied on the top platen. The platens directly touch two opposite hexagonal faces of the icosahedron. Hence, the force f_a is always exerted on this supporting hexagonal surface belonging to the periphery of the particle. This surface may be shared between several cells depending on the number n_{cl} of cells inside the icosahedron. As f_a is increased from zero, the contact forces inside the particle increase proportionally to f_a but, since the particle is rigid, no fracture occurs until a threshold f_c is reached. At this point, an unstable failure of the particle occurs and the particle breaks into several fragments. Several snapshots of a particle at incipient crushing are shown in Fig. 6. The subsequent fragmentation is a dynamic process and can be investigated under controlled displacement of the top platen. Here we are interested in the initiation of failure and the breaking force f_c , which represents the particle strength.

The intercell breaking strengths C_n and C_t having the dimensions of a stress, the particle strength should be expressed as a stress threshold σ_c . However, the stress field inside a particle subjected to diametral compression is nonuniform [14,60]. The average vertical stress in the largest section of the particle πR^2 is $f_a/\pi R^2$. The highest tensile stress inside the particle can be much larger than this stress. In our meshed particles, even with a large number of cells, the disordered configuration of the cells results in a strongly inhomogeneous distribution of intercell forces. Figure 7 shows an example of intercell forces in a particle composed of 150 cells. We observe both compressive forces along the vertical direction and tensile forces along the horizontal direction. We can compute the average vertical stress from the forces by applying the following well-known micro-mechanical expression:

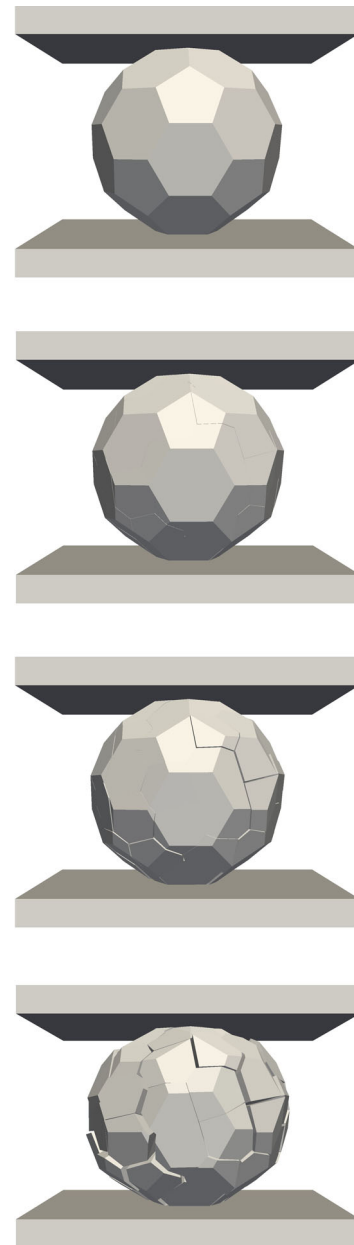


Fig. 6 Snapshots of a particle composed of 75 cells undergoing incipient breakage under the action of a vertical force

$$\sigma_a = \frac{1}{V} \sum_{\alpha \in V} f_z^\alpha \ell_z^\alpha, \quad (9)$$

where V is the volume of the particle, α denotes the contact labels between the cells, f_z is the vertical component of the intercell force, and ℓ_z is the vertical component of the branch vector joining the centers of cells. This average stress is proportional to $f_a/\pi R^2$ by a factor of 1.2 and it reaches its maximum value for f_c . Note that, to avoid inhomogeneities induced by gravity, the latter is set to zero although its value is by orders of magnitude below the breaking threshold f_c .

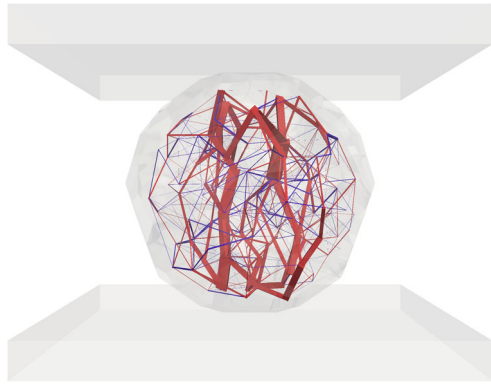


Fig. 7 Intercell forces in a particle composed of 150 cells subjected to diametral compression. *Line thickness* is proportional to the force. The compressive and tensile forces are in *red* and *blue*, respectively

3.2 Effects of meshing on the particle strength

We performed a series of simulations with a particle of constant size but varying number n_{cl} of cells and degree of disorder λ . In these simulations, the intercell strengths are kept constant and equal $C_n = C_t$. The intercell coefficient of friction, which becomes effective only when an intercell contact fails, is set to $\mu_{cl} = 0.4$. Figure 8 shows the vertical strength σ_c , normalized by normal strength C_n , as a function of n_{cl} . Each point represents the mean value for 10 simulations performed with particles composed of cells with the same degree of disorder $\lambda = 0.25$ and the same strength, but independent Voronoi tessellations for the generation of the cells. The maximum and minimum values are shown by error bars.

Despite the large variability of the data, specially at small numbers of cells, we see that the particle strength increases on the average with n_{cl} and it becomes independent of it beyond 75 cells. We also observe that this steady value of the particle strength is nearly 1.25 times the intercell strength C_n . The high variability of the particle strength with low number of cells reflects the very high inhomogeneity of forces for such a low number of intercell contacts. The particle may break just as a result of the failure of a single intercell contact. For this reason, the average values in this range for 10 independent simulations do not represent statistically well-defined averages.

In order to evaluate the effect of the degree of disorder in cell configurations, we used particles composed of 150 cells and an increasing degree of disorder λ . Figure 9 displays the normalized strength as a function of λ . We see that, as λ increases from zero, the particle strength rapidly declines. The particle strength is nearly constant beyond $\lambda = 0.2$. The transition between these two limits seems to be nonlinear. This variation can be explained by remarking that ordered cell structures are formed for λ close to zero where the cells

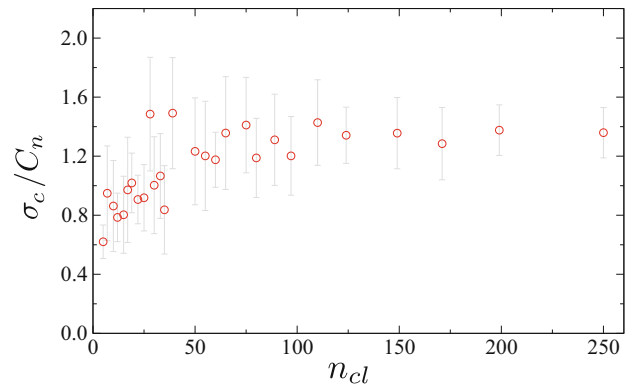


Fig. 8 Evolution of particle strength with the number of cells. Each point represents an average value over 10 independent cell configurations. The *error bars* represent minimum and maximum values

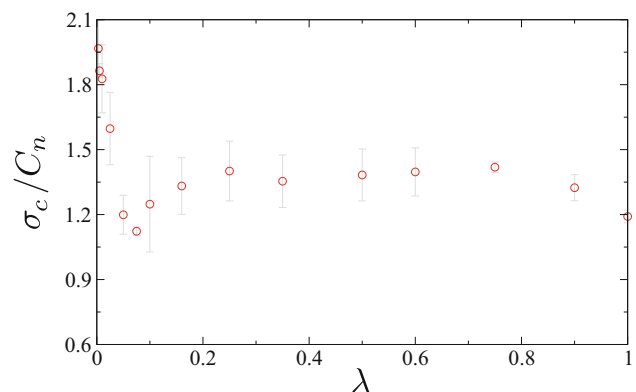


Fig. 9 Evolution of particle strength as a function of the degree of disorder

have nearly the same size. Such structures have less variability in the orientations of cell contacts and are thus able to sustain large external loads through column-like arrangements of cells. A degree of disorder $\lambda = 0.25$ was used in the simulations reported below.

3.3 Effect of intercell strength parameters

Since the stresses and forces inside the particle scale with the applied force, it is generally expected that the particle strength is a linear function of the tensile strength C_n of intercell contacts. However, we expect the shear strength C_t to play a crucial role since an intercell contact fails at this threshold (when sliding occurs) and both C_n and C_t vanish upon failure. Generally, the shear strength C_t is a function of C_n depending on the material [10,11,55]. However, in view of exploring the respective roles of C_t and C_n , we varied these parameters independently in the range between 0.25 and 8 MPa.

Figure 10 shows the evolution of the particle strength σ_c as a function of C_n for different values of C_t . Each data point is an average over 10 independent simulations. We observe

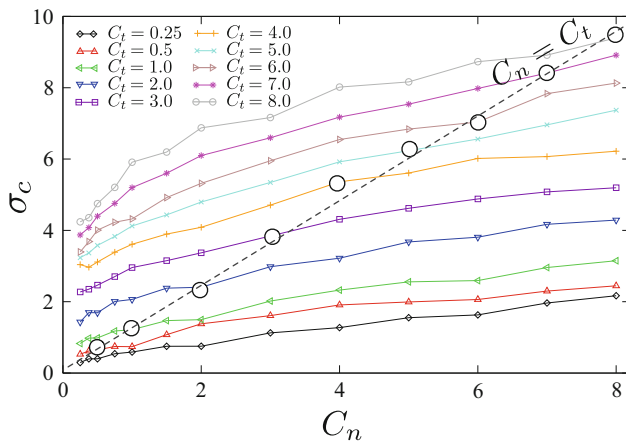


Fig. 10 Evolution of particle strength as a function of intercell tensile strength C_n for different values of intercell shear strength C_t . All stresses are in MPa. The circles indicate the data points for $C_n = C_t$

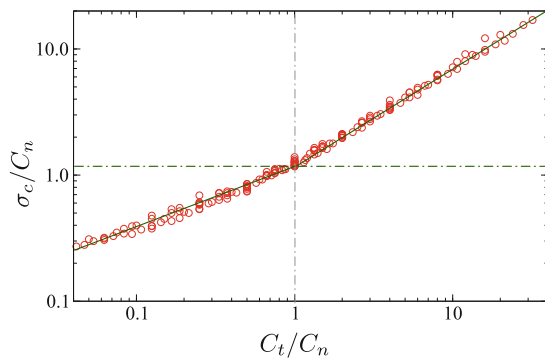


Fig. 11 Evolution of particle strength normalized by the tensile intercell strength as a function of the ratio of intercell shear to tensile strength. The solid lines are power-law fits to the data

a nonlinear dependence of the particle strength on both cell strength parameters. At low values of C_n , σ_c is rather low but it varies by a factor of 20 as C_t increases to its largest value. At largest values of C_n , on the other hand, σ_c can take values as much as two times larger but varies by only a factor of 4 as C_t increases in the same range. This shows that the effect of C_t directly depends on the value of C_n . In the same figure, we also see that the particle strength for $C_n = C_t$ increases nearly linearly with the latter with a proportionality coefficient of 1.25.

The nonlinear trends observed in Fig. 10 are clearly a consequence of the variation of failure mode in response to the relative values of C_t and C_n . In particular, we expect that at low values of C_t with respect to C_n , particle breakage by intercell slip requires less energy dissipation and is thus more likely to occur, whereas at high values of C_t with regard to C_n , failure by tensile rupture should prevail. This picture is consistent with the evolution of the normalized particle strength σ_c/C_n as a function of the ratio C_t/C_n plotted in Fig. 11. First, we see that all data points from simulations nicely

collapse on a single curve. Secondly, the data are well fitted by two straight lines of slopes α and β representing power laws with exponents α and β for $C_t < C_n$ and $C_t > C_n$, respectively, over nearly three decades. Hence, to a good approximation, we have

$$\frac{\sigma_c}{C_n} = 1.25 \times \begin{cases} \left(\frac{C_t}{C_n}\right)^\alpha & C_t \leq C_n \\ \left(\frac{C_t}{C_n}\right)^\beta & C_t > C_n \end{cases}, \quad (10)$$

where $\alpha \simeq 0.5$ and $\beta \simeq 0.8$. Note how these two relations are reduced to a linear function of C_n for $C_t/C_n = 1$ with the same prefactor 1.25 as in Fig. 10.

Equation (10) with the values of the exponents α and β can be written as $\sigma_c = 1.25\sqrt{C_n C_t}$ in the range $C_t \leq C_n$. This form is a generalization of the observed linear relation in the case $C_n = C_t$. In the range $C_t > C_n$, we have $\sigma_c \simeq 1.25 C_n^{0.2} C_t^{0.8}$. This relation implies that the particle strength increases faster here with C_t than with C_n . The exponent β is so close to 1 that, in practice, σ_c varies almost linearly in response to C_t . This seems to contrast the expected picture that in this regime, where C_t is above C_n , tensile debonding is more likely to occur, implying thus that the particle strength should be mainly controlled by C_n . But the larger values of the intercell shear strength compared to tensile strength is a special condition in which the number of possible configurations accommodating cell motions, and hence failure, declines as C_t increases. In other words, tensile forces are activated to a lower extent since force balance over cells is increasingly ensured by shear forces. Most of time, a mechanically compatible displacement field of the cells at incipient failure involves both tensile debonding and slip at a subset of intercell contacts. This is very similar to the effect of friction in granular materials. Extensive simulations indicate that in packings of polyhedral particles, the friction force mobilization and its anisotropy play a much more important role for the shear strength than in a packing of spherical particles [7]. This effect is reminiscent of “frictional interlocking” in analogy to “geometrical interlocking” of strongly nonconvex particles [26]. The values of the exponents in the above two regimes reflect thus the discrete texture of the particle, steric exclusions between rigid cells and frictional interlocking.

3.4 Strength variability

The foregoing analysis of particle strength as a function of intercell strength refers to the measured average values of the particle strength for several independent cell configurations. However, particle-to-particle fluctuations occur to a large extent, and the particle can survive under compressive stresses above its mean strength. As in rocks and agglomerates of fine particles, such fluctuations reflect the presence

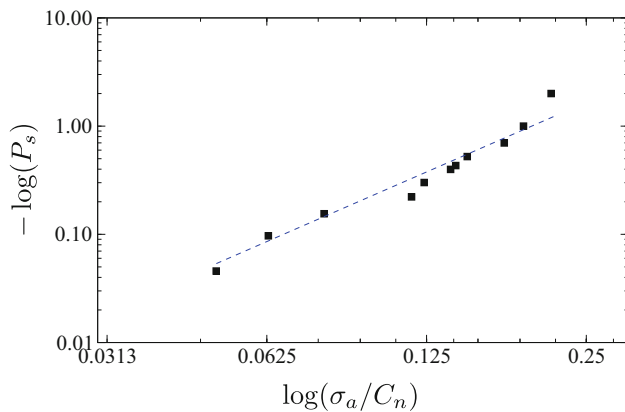


Fig. 12 Survival probability of particles as function of the mean applied stress for particles composed of 150 cells

and distribution of defects and stress concentration factors, which vary with particle size and/or the size of defects compared to particle size [32,40]. In our simulations, the particle size is kept constant and the number n_{cl} of cells is varied in a limited range such that our largest spheres contain only 250 cells. This is too small to allow for a systematic analysis of size effect as the particle size increases (except for particles containing below 75 cells and showing slightly lower strength as discussed in Sect. 3.2). For this reason, we focus here on strength variability only for particles composed of 150 cells.

Figure 12 shows the survival probability P_s (the probability that the particle does not break under a load σ_a) of normalized particle stress σ_a/C_n in the case $C_n = C_t$. The log–log plot is consistent with Weibull probability distribution:

$$P_s(\sigma_a/C_n) = e^{-(\sigma_a/\sigma_0)^m}, \quad (11)$$

where $\sigma_0 = kC_n$ is a scaling stress parameter and m is the Weibull modulus. Here, we have $m \simeq 2$, which corresponds to a Gaussian distribution around the mean strength σ_c , and $k \simeq 1.4$. This is below experimental values, which typically vary in the range from 3 to 10 [24,29,32]. But m is expected to increase with disorder parameter λ and particle size [40]. This value of m is an interesting observation since it shows that normal fluctuations should be expected in this range of the rather small numbers of cells.

4 Summary and perspectives

In this paper, a three-dimensional model for grain crushing was proposed in the framework of the Contact Dynamics Method. This model belongs to the class of bonding methods as each particle is discretized into a collection of polyhedral cells. The bonding strength between fragments was assumed

to obey Tresca's failure criterion. Specifically, the bonding strength is controlled by critical stresses along normal and shear directions between cells. The cells were generated by means of a three-dimensional Voronoi meshing in which the control parameters are the number of cells and their degree of disorder.

A systematic study was undertaken to analyze the effect of various parameters on the particle strength defined as the compressive strength of the particle under diametral loading between two platens. For this purpose, particles of icosahedral shape were loaded between two platens. We showed that particle strength increases with the number of cells and levels off at around 1.25 times the tensile intercell strength. On the other hand, as disorder increases, the particle strength rapidly declines to a well-defined value. The particle strength in those asymptotic states was shown to define two distinct regimes as a function of the ratio of intercell shear strength to tensile strength. In both regimes, the particle strength varies as a power law of both shear and normal intercell strengths. We argued that this nonlinear behavior is a consequence of the evolution of failure modes at the cell scale as the above ratio increases. In particular, the particle strength depends not only on the intercell tensile strength but also crucially on the intercell shear strength, which prevails when the strength ratio is above 1, and amplifies interlocking effect between cells. Finally, we also showed that particle strength fluctuations are consistent with Weibull statistics.

Our bonded-cell model in 3D and its behavior analyzed here under diametral loading provide the first applications of this model in the framework of the contact dynamics method with particles and cells treated as perfectly rigid bodies. This model is simple and capable of reproducing the angular shapes of fragments while conserving the total volume. Further analyses are underway to highlight the initiation of particle failure at the cell scale, the effects of cell disorder on strength variability, and finite size effect as the number of cells is increased. This method can be applied to simulate large samples of crushable particles in 3D.

Acknowledgements This work was financially supported by a research grant awarded by the French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA). Farhang Radjai would also like to acknowledge the support of the ICoME2 Labex (ANR-11-LABX-0053) and the A*MIDEX projects (ANR-11-IDEX-0001-02) cofunded by the French program Investissements d'Avenir, managed by the French National Research Agency (ANR).

References

1. Åström J, Herrmann H (1998) Fragmentation of grains in a two-dimensional packing. *Eur Phys J B* 5(3):551–554
2. Azéma E, Radjai F (2010) Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Phys Rev E* 81:051,304

3. Azéma E, Estrada N, Radjai F (2012) Nonlinear effects of particle shape angularity in sheared granular media. *Phys Rev E* 86:041,301
4. Azéma E, Radjai F (2012) Force chains and contact network topology in sheared packings of elongated particles. *Phys Rev E* 85:031,303
5. Azéma E, Radjai F, Peyroux R, Saussine G (2007) Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Phys Rev E* 76(1 Pt 1):011,301
6. Azéma E, Radjai F, Saint-Cyr B, Delenne JY, Sornay P (2013) Rheology of 3D packings of aggregates: microstructure and effects of nonconvexity. *Phys Rev E* 87:052,205
7. Azéma E, Radjai F, Saussine G (2009) Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles. *Mech Mater* 41:721–741
8. Bagherzadeh Kh A, Mirghasemi A, Mohammadi S (2011) Numerical simulation of particle breakage of angular particles using combined dem and fem. *Powder Technol* 205(1–3):15–29
9. Bandini V, Coop MR (2011) The influence of particle breakage on the location of the critical state line of sands. *Soils Found* 51(4):591–600
10. Barton N (1976) The shear strength of rock and rock joints. *Int J Rock Mech Min Sci Geomech Abstr* 13(9):255–279
11. Barton N (2013) Shear strength criteria for rock, rock joints, rock-fill and rock masses: Problems and some solutions. *J Rock Mech Geotech Eng* 5(4):249–261
12. Bratberg I, Radjai F, Hansen A (2002) Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds. *Phys Rev E* 66(3):1–34
13. Cecconi M, DeSimone A, Tamagnini C, Viggiani G (2002) A constitutive model for granular materials with grain crushing and its application to a pyroclastic soil. *Int J Numer Anal Meth Geomech* 26(15):1531–1560
14. Chau K, Wei X (1998) Spherically isotropic elastic spheres subject to diametral point load strength test. *Int J Solids Struct* 25
15. Cheng YP, Nakata Y, Bolton MD (2008) Micro- and macro-mechanical behaviour of dem crushable materials. *Géotechnique* 58(6):471–480
16. Ciantia M, Arroyo M, Calvetti F, Gens A (2015) An approach to enhance efficiency of dem modelling of soils with crushable grains. *Géotechnique* 65(2):91–110
17. Cundall PA (1988) Formulation of a three-dimensional distinct element model-Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *Int J Rock Mech Min Sci* 25(3):107–116
18. Du Q, Faber V, Gunzburger M (1999) Centroidal Voronoi tessellations: applications and algorithms. *SIAM J Numer Anal* 41(4):637–676
19. Estrada N, Azéma E, Radjai F, Taboada A (2011) Identification of rolling resistance as a shape parameter in sheared granular media. *Phys Rev E* 84(1):011306
20. Dubois F, Jean M, et al (2016) LMGC90 wiki page. https://git-xen.lmgc.univ-montp2.fr/lmgc90/lmgc90_user/wikis/home. Accessed 7 Mar 2016
21. Fukumoto T (1992) Particle breakage characteristics of granular soils. *Soils Found* 32(1):26–40
22. Galindo-Torres S, Pedrosa D, Williams D, Li L (2012) Breaking processes in three-dimensional bonded granular materials with general shapes. *Comput Phys Commun* 183(2):266–277
23. Guimaraes M, Valdes J, Palomino AM, Santamarina J (2007) Aggregate production: Fines generation during rock crushing. *Int J Miner Process* 81(4):237–247
24. Hardin BO (1985) Crushing of soil particles. *J Geotech Eng* 111(10):1177–1192
25. Hégron L, Sornay P, Favretto-Cristini N (2014) Compaction of a bed of fragmentable UO₂ particles and associated acoustic emission. *IEEE Trans Nucl Sci* 61(4):2175–2181
26. Jaeger H (2015) Celebrating soft matter's 10th anniversary: Toward jamming by design. *Soft Matter* 11:12
27. Jean M (1999) The non-smooth contact dynamics method. *Comput Methods Appl Mech Eng* 177(3–4):235–257
28. Kun F, Herrmann H (1996) A study of fragmentation processes using a discrete element method. *Comput Methods Appl Mech Eng* 7825(96)
29. Lade PV, Yamamuro J, Bopp P (1997) Significance of particle crushing in granular materials. *J Geotech Geoenviron Eng* 123(9):889–890
30. Lobo-guerrero S, Vallejo LE (2005) Discrete element method evaluation of granular crushing under direct shear test conditions. *J Geotech Geoenviron Eng* 131(10):1295–1300
31. Ma G, Zhou W, Chang XL (2014) Modeling the particle breakage of rockfill materials with the cohesive crack model. *Comput Geotech* 61:132–143
32. McDowell G, Bolton M (1998) On the micromechanics of crushable aggregates. *Géotechnique* 48(5):667–679
33. McDowell G, Bolton M, Robertson D (1996) The fractal crushing of granular materials. *J Mech Phys Solids* 44(12):2079–2101
34. Miura N, Murata H, Yasufuku N (1984) Stress-strain characteristics of sand in a particle-crushing region. *Soils Found* 24(1):77–89
35. Moreau J (1994) Some numerical methods in multibody dynamics: application to granular. *Eur J Mech A Solids* 13:93–114
36. Nezamabadi S, Radjai F, Averseng J, Delenne J (2015) Implicit frictional-contact model for soft particle systems. *J Mech Phys Solids* 83:72–87
37. Nezami EG, Hashash YMA, Zhao D, Ghaboussi J (2004) A fast contact detection algorithm for 3-D discrete element method. *Comput Geotech* 31(7):575–587
38. Nezami EG, Hashash YMA, Zhao D, Ghaboussi J (2006) Shortest link method for contact detection in discrete element method. *Int J Numer Anal Meth Geomech* 30(8):783–801
39. Nguyen DH, Azéma E, Radjai F (2015) Evolution of particle size distributions in crushable granular materials. *Geomechanics from Micro to Macro (Md)*, pp 275–280
40. Nguyen DH, Azéma E, Sornay P, Radjai F (2015) Bonded-cell model for particle fracture. *Phys Rev E* 91(2):022,203
41. Nouguier C, Bohatier C, Moreau JJ, Radjai F (2000) Force fluctuations in a pushed granular material. *Granular Matter* 2:171–178
42. Okabe A, Boots B, Sugihara K, Chiu SN (1992) Spatial tessellations: concepts and applications of voronoi diagrams. Wiley, New York
43. Quey R, Dawson P, Barbe F (2011) Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Comput Methods Appl Mech Eng* 200(17–20):1729–1745
44. Quezada JC, Breul P, Saussine G, Radjai F (2012) Stability, deformation, and variability of granular fills composed of polyhedral particles. *Phys Rev E* 86(3):1–11
45. Radjai F, Richefeu V, Jean Mm, Moreau JJ, Roux S (1996) Force Distributions in Dense Two-Dimensional Granular Systems. *Phys Rev Lett* 77(2):274–277
46. Radjai F, Richefeu V (2009) Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mech Mater* 41(6):715–728
47. Radjai F, Dubois F (2011) Discrete-element modeling of granular materials. ISTE Ltd and Wiley, London
48. Renouf M, Dubois F, Alart P (2004) A parallel version of the non smooth contact dynamics algorithm applied to the simulation of granular media. *J Comput Appl Math* 168(1–2):375–382
49. Ries A, Wolf DE, Unger T (2007) Shear zones in granular media: Three-dimensional contact dynamics simulation. *Phys Rev E* 76(5):1–9
50. Russell AR, Muir Wood D, Kikumoto M (2009) Crushing of particles in idealised granular assemblies. *J Mech Phys Solids* 57(8):1293–1313

51. Saussine G, Cholet C, Gautier PE, Dubois F, Bohatier C, Moreau JJ (2011) Modelling ballast behaviour under dynamic loading. Part 1: A 2D polygonal discrete element method approach. *Comput Methods Appl Mech Eng* 195(19–22):2841–2859
52. Saint-Cyr B, Delenne J, Voivret C, Radjai F, Sornay P (2011) Rheology of granular materials composed of nonconvex particles. *Phys Rev E* 84(4):041302
53. Staron L, Radjai F, Vilotte J (2005) Multi-scale analysis of the stress state in a granular slope in transition to failure. *Eur. Phys. J. E* 18:311–320
54. Staron L, Vilotte JP, Radjai F (2002) Preavalanche instabilities in a granular pile. *Phys Rev Lett* 89(1):204,302
55. Stoller RE, Zinkle SJ (2000) On the relationship between uniaxial yield strength and resolved shear stress in polycrystalline materials. *J Nucl Mater* 283–287(PART I):349–352
56. Taboada A, Chang KJ, Radjai F, Bouchette F (2005) Rheology, force transmission, and shear instabilities in frictional granular media from biaxial numerical tests using the contact dynamics method. *J Geophys Res B* 110(9):1–24
57. Topin V, Monerie Y, Perales F, Radjai F (2012) Collapse dynamics and runoff of dense granular materials in a fluid. *Phys Rev Lett* 109(18):1–5
58. Tsoungui O, Vallet D, Charmet JC (1999) Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials. *Powder Technol* 105(1–3):190–198
59. Moreau JJ (1997) Numerical investigation of shear zones in granular materials. In: Wolf D, Grassberger P (eds) *Friction, arching, contact dynamics*. World Scientific, Singapore
60. Wu S, Chau K (2006) Dynamic response of an elastic sphere under diametral impacts. *Mech Mater* 38:1039–1060
61. Zhou W, Yang L, Ma G, Chang X, Cheng Y, Li D (2015) Macro-micro responses of crushable granular materials in simulated true triaxial tests. *Granular Matter* 17(4):497–509
62. Zubelewicz A, Bažant ZP (1987) Interface element modeling of fracture in aggregate composites. *J Eng Mech* 113(11):1619–1629

COMPACTION DES MATERIAUX GRANULAIRES FRAGMENTABLES EN 3D

Relation entre les propriétés des particules et la tenue mécanique des assemblages granulaires

Résumé : L'objectif des travaux présentés dans ce mémoire de thèse est de développer une modélisation numérique de la compaction des poudres composées de particules sécables dans le cadre de la méthode de Dynamique des Contacts en vue d'application au procédé de fabrication du combustible nucléaire. Les particules sont modélisées comme des agrégats cohésifs de fragments potentiels (cellules) de formes polyédriques irréguliers. A l'aide de ce modèle de cellules liées (Bonded Cell Method), nous avons réalisé une étude paramétrique de la résistance des particules par rapport aux paramètres géométriques et mécaniques du modèle. Nos résultats révèlent deux régimes et une mise à l'échelle en loi de puissance de la résistance à la compression en fonction de l'adhésion normale et du rapport entre l'adhérence tangentielle et l'adhésion normale entre cellules. Nous avons optimisé les paramètres du modèle pour la compaction uniaxiale des assemblages d'un grand nombre de particules sécables. Les simulations ont permis d'identifier les mécanismes de compaction et de rupture des particules, et de caractériser l'évolution de la texture et des tailles et formes des fragments. Les résultats obtenus montrent clairement que le processus de compaction est fortement non-linéaire en raison notamment de l'évolution de l'étalement granulométrique qui contrôle la texture et la transmission des contraintes. Enfin, nous avons mené une étude systématique de l'effet de la polydispersité de taille dans le cas de particules sphériques.

Mots-clés : Matériaux granulaires, fragmentation, rupture, compaction, méthodes d'éléments discrets, polydispersité.

COMPACTION OF CRUSHABLE GRANULAR MATERIALS IN 3D

Relation between the particles properties and the strength of granular assemblies

Abstract : The goal of this work is to develop a numerical modeling approach of the compaction of powders composed of crushable particles in the framework of the Contact Dynamics method in view of application to the manufacture process of nuclear fuel. The particles are modeled as cohesive aggregates of potential fragments (cells) of irregular polyhedral shape. Using this Bonded Cell Method, we performed a parametric investigation of the strength of particles with respect to the geometrical and mechanical model parameters. Our results reveal two regimes and a power-law scaling of the compressive strength as a function of the ratio between tangential adherence and normal adhesion between cells. We optimized the model parameters for the uniaxial compression of packings of a large number of crushable particles. The simulations allow us to identify the mechanisms of compaction and fracture of particles, and to characterize the evolution of texture and the sizes and shapes of fragments. Our simulation results clearly show that the compaction process is strongly nonlinear as a consequence of the evolution of particle size distribution, which controls the texture and stress transmission. We also perform a systematic analysis of the effect of size polydispersity in the case of spherical particles.

Key words : Granular materials, fragmentation, rupture, compaction, discrete element methods, polydispersity.

