



HAL
open science

Modélisation micromécanique de la densification d'un milieu granulaire cohésif constitué de particules ductiles

Nils Audry

► **To cite this version:**

Nils Audry. Modélisation micromécanique de la densification d'un milieu granulaire cohésif constitué de particules ductiles. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2023. Français. NNT: 2023GRALI061 . tel-04352284

HAL Id: tel-04352284

<https://theses.hal.science/tel-04352284>

Submitted on 19 Dec 2023

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

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

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

École doctorale : I-MEP2 - Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Énergétique, Procédés, Production

Spécialité : 2MGE - Matériaux, Mécanique, Génie civil, Electrochimie

Unité de recherche : Laboratoire Sols, Solides, Structures et Risques

Modélisation micromécanique de la densification d'un milieu granulaire cohésif constitué de particules ductiles

Micromechanical modelling of the densification of a cohesive granular medium made up of ductile particles

Présentée par :

Nils AUDRY

Direction de thèse :

Didier IMBAULT

Grenoble INP

Directeur de thèse

Barthélémy HARTHONG

Grenoble INP

Co-encadrant de thèse

Rapporteurs :

Emmanuelle VIDAL-SALLE

PROFESSEURE DES UNIVERSITES, INSA Lyon

Jean-Philippe CHATEAU-CORNU

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Bourgogne-Franche-Comté

Thèse soutenue publiquement le **9 novembre 2023**, devant le jury composé de :

Didier IMBAULT

MAITRE DE CONFERENCES, Grenoble INP

Directeur de thèse

Emmanuelle VIDAL-SALLE

PROFESSEURE DES UNIVERSITES, INSA Lyon

Rapporteuse

Jean-Philippe CHATEAU-CORNU

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Bourgogne-Franche-Comté

Rapporteur

Emilien AZEMA

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université de Montpellier

Examineur

Christian GEINDREAU

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Grenoble Alpes

Président du jury

Invité :

Barthélémy HARTHONG

MAITRE DE CONFERENCES, Grenoble INP



“All we have to decide is what to do with the time that is given us.”
Gandalf (J.R.R. Tolkien)

À mes parents

Résumé

Le processus de compression à froid de poudres constituées de particules ductiles est largement utilisé dans l'industrie. Lors de cette phase de mise en forme, l'adhésion interparticulaire se développe au cours de la densification, conférant aux pièces fabriquées leurs propriétés mécaniques. L'un des problèmes majeurs de ce processus est le phénomène de rupture pouvant se produire lors de la densification, en raison de sollicitations fortement déviatoires au voisinage de singularités géométriques. Ces défauts entraînent le rejet des pièces ainsi fabriquées. Bien que ce problème soit largement reconnu, il existe peu d'études dans la littérature portant sur la compréhension micro-mécanique de ces phénomènes de rupture au sein de ce type de matériau constitué de particules fortement déformables. Aucun modèle numérique ne permet actuellement de prédire la création de tels défauts et seules de longues procédures par essai-erreur permettent de les éviter. Les campagnes expérimentales étant souvent coûteuses et difficiles à mener suivant des chemins de chargement complexes, le rôle joué par l'adhésion entre les particules et par leur déformabilité sur les phénomènes de rupture restent aujourd'hui mal compris.

Au vu de ces limites, une approche numérique basée sur la méthode des éléments finis multi-particules apparaît comme une alternative prometteuse. Une telle méthode permet la modélisation explicite de la microstructure d'un milieu granulaire idéalisé, considéré comme un assemblage représentatif de particules. Elle correspond à un couplage entre la méthode des éléments finis et la méthode des éléments discrets : les particules sont maillées en volume de manière à prendre en compte pleinement leurs déformations par l'intermédiaire de lois de comportement basées sur la mécanique des milieux continus ; et les interactions entre les surfaces des particules sont gérées à l'aide de formulations de contact exprimées en éléments finis. Le principal inconvénient de cette méthode réside dans son coût de calcul élevé, limitant le nombre de particules pouvant être modélisées. En utilisant une approche multi-échelles, il est toutefois possible de déduire les propriétés mécaniques mésoscopiques associées à un volume élémentaire de Cauchy équivalent à partir de la simulation d'un nombre relativement restreint de particules, grâce à des techniques d'homogénéisation et à la formulation de conditions aux limites appropriées. Une étude portant sur l'analyse de l'impact des conditions aux limites sur la réponse mécanique simulée d'un échantillon granulaire numérique soumis à une charge quasi-statique est ainsi proposée.

Une telle approche micro-mécanique requiert une description très précise des interactions de contact. En particulier, la résistance à la rupture des pièces obtenues par compression de poudres est grandement influencée par le développement de l'adhésion au niveau des contacts entre particules. Un modèle de contact adhésif multi-échelles, basé sur une pondération de l'énergie de surface par un modèle de rugosité, est par conséquent implémenté dans le code éléments finis multi-particules. Ce modèle de contact permet de prédire localement (en chaque nœud du maillage en éléments finis) un niveau d'adhésion développé par les actions mécaniques externes, ce qui est cohérent avec le processus de compression à froid de poudres. Le modèle numérique ainsi construit est finalement utilisé pour prédire les propriétés mésoscopiques associées au volume élémentaire de Cauchy équivalent. Ce modèle numérique permet l'exploration de chemins de chargement fortement déviatoires inaccessibles expérimentalement. Il a pour vocation d'aider au futur développement d'un modèle issu d'une approche de type mécanique des milieux continus du volume de poudre au cours de la compression.

Abstract

The cold compaction process of powders made up of ductile particles is widely used in the industry. During this forming phase, interparticle adhesion develops during densification, building up the mechanical strength of the manufactured parts. One of the main challenges of this process is the occasional occurrence of failure during densification, due to highly deviatoric stresses in the vicinity of geometric singularities. These defects lead to the rejection of the manufactured parts. Despite widespread recognition of this problem, there are few studies in the literature focusing on the micro-mechanical understanding of these failure phenomena within this type of material involving highly deformable particles. Currently, there is no numerical model capable of predicting the formation of such defects. Only time-consuming trial-and-error procedures efficiently mitigate them. Given the often expensive and challenging nature of experimental campaigns along complex loading paths, the role of particle adhesion and deformability in rupture phenomena remains poorly understood.

Given these limitations, a numerical approach based on the multi-particle finite element method appears as a promising alternative. Such a method allows for the explicit modelling of the microstructure of an idealized granular medium, considered as a representative assembly of particles. The method corresponds to a coupling between the finite element method and the discrete element method: the particles are meshed in volume so as to fully account for their deformations through constitutive laws based on continuum mechanics; and the interactions between particle surfaces are handled using finite-element contact formulations. The main drawback of this method lies in its high computational cost, limiting the number of particles that can be modelled. However, by employing a multi-scale approach, it is possible to derive mesoscopic mechanical properties associated with an equivalent Cauchy volume element from the simulation of a relatively small number of particles, through homogenization techniques and formulation of appropriate boundary conditions. A study focusing on the analysis of the influence of boundary conditions on the simulated mechanical response of a numerical granular sample subjected to quasi-static loading is thus proposed.

Such a micro-mechanical approach requires an accurate description of contact interactions. Specifically, the mechanical strength of parts obtained through powder compression is significantly influenced by the development of adhesion at the contact level. Therefore, a multi-scale adhesive contact model, based on the weighting of the surface energy by a roughness model, is implemented in the multi-particle finite element code. This contact model allows for the local prediction (at each node of the finite element mesh) of the level of adhesion developed by external mechanical loads, which is consistent with the powder compaction process. The constructed numerical model is finally used to predict the mesoscopic properties associated with the equivalent Cauchy volume element. This numerical model enables the exploration of highly deviated loading paths that are inaccessible experimentally. Its purpose is to support the future development of continuum mechanics-based model for the modeling of a powder volume during compression.

Remerciements

C'est ainsi que s'achève mon voyage, absorbé par l'écriture de ces quelques lignes me tenant particulièrement à cœur. Trois années déjà se sont écoulées depuis le début de cette aventure parsemée de découvertes, d'embûches parfois, de rencontres et de partages. Il est temps pour moi d'exprimer ma gratitude envers l'ensemble de mes compagnons de route, ayant fait de ce périple une expérience inoubliable.

Je souhaite tout d'abord remercier chaleureusement l'ensemble des membres de mon jury de thèse ayant accepté d'évaluer mon travail : Émilien Azéma, Jean-Philippe Château-Cornu, Christian Geindreau ainsi que Emmanuelle Vidal-Sallé. Merci à vous pour la qualité de vos retours et pour la pertinence de vos remarques. Merci également à Christophe Martin et à Pascal Villard d'avoir accepté d'être membres de mon comité de suivi de thèse, pour la finesse de chacun de vos conseils lors de nos échanges.

Ce voyage dans l'inconnu aurait été une épreuve insurmontable pour moi, sans la présence de mes deux guides, ayant en toutes circonstances su me montrer le chemin. Merci à vous deux de m'avoir accueilli au sein de votre projet et d'avoir été si présents durant ces trois années de thèse. Merci à toi Didier, pour ta disponibilité, pour ta confiance, pour ton implication et pour ton souci constant de mon bien-être. Merci à toi Bart, pour ta présence et pour les connaissances que tu as merveilleusement su partager avec moi, que ce soit en mécanique, en numérique, mais également en réparation de vélo et en mycologie. Tu m'as beaucoup appris et je te remercie d'avoir été une telle source d'inspiration pour moi.

Je souhaite également remercier l'ensemble de mes collègues et amis, ayant contribué à rendre cette expérience si enrichissante :

- Vesna, Aziz et Laurent du service d'entretien du bâtiment, sans qui ce périple n'aurait simplement pas été possible ;
- Mireille du service administratif, pour ta bonne humeur et pour ton assistance précieuse lors de tous mes déplacements ;
- Jérôme du support informatique, pour ta grande patience et pour ton soutien inestimable durant ces trois années ;
- Jean-Baptiste du support technique, pour ta contribution cruciale à la conception de mon dispositif expérimentale ;
- Alexandre du support technique, pour tes compétences d'usinage ayant permis de donner vie à mes projets ;
- Maxime, pour la qualité des scripts que tu m'as légués ;
- mes collègues de l'ENSE³ du module de mécanique des solides déformables, pour m'avoir accueilli dans votre équipe pédagogique ;
- Laurent, Dimitri, Sabine et Lucie pour m'avoir ouvert les portes du monde de la recherche ;
- Clara, pour m'avoir supporté en coloc (pas assez longtemps), pour toutes tes péripéties et pour ton soutien incondtionnel ;
- Antoine, pour nos afterworks en montagne inoubliables et pour ta philosophie de vie ;
- Romain, pour les chocolats, pour la crème de marron, pour les coins à champignons, bref pour ta générosité ;

- Josselin, pour nos sessions d’escalade et pour ces bons souvenirs de tournage du MOOC élastoche – l’élasticité fastoche ;
- François, pour ton expertise en matériel de bivouac, en comté, ou encore en cucurbitaceae au marché de l’Estacade ;
- Sébastien, pour m’avoir montré que l’échec n’était pas une option et que la qualité d’un grimpeur ne venait pas de ses chaussons ;
- Sophie, pour l’organisation des sorties Esca’lab et, quand même, pour les Picantins ;
- Quentin, pour mes plus beaux beach-volley ;
- Hamid, pour ta bienveillance ;
- Marilyn, pour m’avoir fait aimer le taboulé ;
- Julia, même si je ne me suis toujours pas remis du 13-0 ;
- Alberto, pour tes anecdotes ;
- Pascal, pour ton enjouement permanent ;
- Mathilde, Ingrid, Alfild et papa, pour vos relectures attentives.

C’est donc ainsi que s’achève mon voyage, l’esprit empli de souvenirs qui continueront d’illuminer ma route. Je porterai en moi une reconnaissance profonde envers chacun d’entre vous, ayant rendu cette aventure exceptionnelle possible. Mais comment pourrais-je clore ces mots si ce n’est en vous remerciant, vous qui avez toujours été à mes côtés ? Merci à vous mes amis ¹, ma famille, mes parents. Vous êtes une véritable inspiration pour moi, et je vous dédie une reconnaissance infinie pour votre soutien inébranlable.

1. Une mention spéciale à mes amis Juliette, Tanguy, Mathilde, Lucie, PL, Adri, Gab et Sélène qui ont fait le déplacement pour venir assister à ma soutenance de thèse. Vous avez rendu cette journée inoubliable pour moi.

Table des matières

Résumé	i
Abstract	iii
Remerciements	v
Table des matières	ix
Notations et abréviations	xiii
Introduction générale	1
1 Analyses multi-échelles des milieux granulaires confinés	5
1.1 Généralités sur les milieux granulaires	6
1.1.1 Matériaux granulaires	6
1.1.1.1 Quelques chiffres	6
1.1.1.2 Domaines d'utilisations	6
1.1.1.3 Propriétés générales	8
1.1.2 Mécanique des milieux granulaires confinés	10
1.1.2.1 Avant propos	10
1.1.2.2 Définition des tenseurs de contrainte et de déformation	11
1.1.2.3 Surfaces de charge	11
1.1.2.4 Loi d'écoulement	12
1.1.2.5 Écrouissage	13
1.1.2.6 Rupture et endommagement	14
1.2 Modélisation continue des milieux granulaires confinés	15
1.2.1 Essais de caractérisation dédiés aux milieux granulaires confinés	15
1.2.1.1 Compression œdométrique de révolution	15
1.2.1.2 Compression triaxiale de révolution	16
1.2.1.3 Prédiction expérimentale des surfaces de charge	16
1.2.2 Modélisation des surfaces de charge et de rupture	18
1.2.3 Méthode des éléments finis	21
1.2.3.1 Principe de la méthode	21
1.2.3.2 Limites de la méthode	22
1.3 Modélisation discrète des milieux granulaires confinés	23
1.3.1 Méthode des éléments discrets	23
1.3.1.1 Principe de la méthode	23
1.3.1.2 Limites de la méthode	25
1.3.2 Méthode des éléments finis multi-particules	26
1.3.2.1 Principe de la méthode	26

1.3.2.2	Développement et utilisation de la MPFEM	27
1.3.2.3	Limites de la méthode	32
1.4	Problèmes liés à la rupture dans les milieux granulaires confinés	33
2	Influence des conditions aux limites sur la modélisation MPFEM	35
2.1	Introduction	36
2.2	Protocole de la simulation numérique	38
2.2.1	Génération d'un milieu granulaire idéalisé	38
2.2.2	Modèle numérique	39
2.2.2.1	Loi de comportement des particules	40
2.2.2.2	Paramètres de la simulation	41
2.3	Calcul des grandeurs mésoscopiques	42
2.3.1	Détermination du tenseur des déformations de Hencky mésoscopique d'un milieu granulaire par un ajustement aux moindres carrés	42
2.3.2	Détermination de la densité d'un milieu granulaire	42
2.3.3	Détermination du tenseur des contraintes mésoscopique d'un milieu granulaire en fonction des efforts de contact	43
2.4	Méthode de comparaison entre les différents types de conditions aux limites	44
2.4.1	Principe de comparaison	44
2.4.2	Décomposition du tenseur des déformations et des contraintes mésoscopiques	45
2.5	Conditions aux limites adaptées à la MPFEM	47
2.5.1	Conditions aux limites à gradient de déplacement homogène	47
2.5.1.1	Description	47
2.5.1.2	Étude de la convergence	48
2.5.2	Conditions aux limites à gradient de déplacement imposé aux frontières	49
2.5.2.1	Description	49
2.5.2.2	Étude de la convergence	49
2.5.3	Conditions aux limites périodiques	50
2.5.3.1	Description	50
2.5.3.2	Étude de la convergence	52
2.5.4	Conditions aux limites périodiques simplifiées	54
2.5.4.1	Description	54
2.5.4.2	Étude de la convergence	55
2.6	Vérification de l'implémentation des fonctions de post-traitement	56
2.7	Comparaison des différents types de conditions aux limites	60
2.8	Étude de l'influence du nombre de particules	65
2.9	Discussions et conclusions	67
3	Loi de contact adhésive adaptée à la MPFEM	71
3.1	Introduction sur le phénomène d'adhésion	72
3.2	État de l'art sur les modèles de contact existant	73
3.2.1	Modèles de contact entre surfaces parfaites	73
3.2.1.1	Modèles élastiques	73
3.2.1.2	Modèles élastoplastiques	74
3.2.2	Modèles de contact adaptés aux surfaces réelles	75
3.3	Formulation de la loi de contact adhésive	78
3.3.1	Principe physique de la loi de contact	78
3.3.2	Changement d'échelle et adaptation de la loi de contact à la simulation en éléments finis	78
3.3.3	Formulation de la partie tangentielle de la loi de contact	81

3.3.3.1	Principe du modèle de frottement	81
3.3.3.2	Calcul de l'énergie de frottement	82
3.4	Validation de la loi de contact adhésive	83
3.4.1	Vérification de l'implémentation dans le logiciel éléments finis	83
3.4.2	Validation de la loi de contact dans sa forme simplifiée : comparaison avec les modèles de la littérature	84
3.5	Validation expérimentale de la loi de contact dans sa forme globale	89
3.5.1	Principe du dispositif expérimental	89
3.5.2	Description du protocole expérimental	92
3.5.3	Résultats expérimentaux	93
3.6	Conclusion	97
4	Plasticité et endommagement des milieux granulaires ductiles cohésifs	99
4.1	Introduction	100
4.2	Procédure d'obtention des surfaces de charge	101
4.2.1	Principe	101
4.2.2	Définition d'un critère de plasticité	104
4.3	Étude de l'évolution des surfaces de charge	108
4.3.1	Impact de la densité relative	108
4.3.2	Impact de l'adhésion	110
4.4	Qualification de l'endommagement du milieu granulaire	112
4.4.1	Principe	112
4.4.2	Étude de l'évolution de la surface spécifique de contact	113
4.4.3	Analyse de l'endommagement	115
4.4.4	Impact de la densité relative	120
4.5	Vers un critère de rupture	123
4.5.1	Définition d'un critère de rupture	123
4.5.2	Résultats préliminaires	123
4.6	Conclusion	125
	Conclusion générale	127
	Références bibliographiques	I
A	Définition du fichier d'entrée de la simulation en éléments finis sous <i>Abaqus</i>	XIII
B	Subroutine utilisateur implémentée pour la création d'une loi de contact adhésif.	XXI
C	Détermination des grandeurs mésoscopiques associées au milieu granulaire	XXV
C.1	Détermination du tenseur gradient des déplacements mésoscopiques	XXVI
C.2	Détermination du tenseur des contraintes mésoscopiques	XXVII
D	Caractérisation micromécanique expérimentale du milieu granulaire	XXXI

Notations et abréviations

a	Rayon de contact [mm]
d_{bc}	Distance seuil utilisée pour l'application des conditions aux limites [mm]
d_x, d_y, d_z	Dimensions de la cellule périodique [mm]
D_{eq}	Vitesse de déformation équivalente de Mises [s^{-1}]
E	Module de Young [MPa]
E^*	Module de Young équivalent [MPa]
E_c	Énergie cinétique [mJ]
E_{eq}	Déformation équivalente de Mises [-]
E_f	Énergie dissipée par frottement [mJ]
E_p	Énergie dissipée par déformation plastique [mJ]
F	Force [N]
h_d	Second invariant du tenseur déviateur des déformations de Hencky gauche [-]
h_v	Premier invariant du tenseur sphérique des déformations de Hencky gauche [-]
I_1	Premier invariant du tenseur des contraintes de Cauchy [MPa]
J_2	Second invariant du déviateur du tenseur des contraintes de Cauchy [MPa]
k	Raideur de pénalité de contact [$MPa \cdot mm^{-1}$]
K, n	Paramètres d'écrouissage
m	Masse [kg]
M	Point matériel
r	Rayon [mm]
r_{max}	Rayon associé à la plus grosse particule modélisée [mm]
S	Surface [mm^2]
t	Temps [s]
V	Volume [mm^3]
W_2	Travail du second ordre [MPa]
x, y, z	Coordonnées ou distances [mm]
z_0	Distance d'équilibre de Lennard-Jones [mm]
α	Degré de contact [-]
γ	Énergie surfacique de Dupré [$mJ \cdot mm^{-2}$]
δ_{max}	Distance maximale d'interaction [mm]
μ	Coefficient de frottement de Coulomb [-]
μ_T	Paramètre de Tabor [-]
ν	Coefficient de Poisson [-]
ρ	Densité relative [-]
σ_0	Limite d'élasticité initiale [-]
$\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III}$	Contraintes principales [MPa]
σ_c	Contrainte d'adhésion [MPa]
σ_d	Contrainte déviatoire [MPa]
σ_m	Contrainte moyenne [MPa]
σ_y	Limite d'élasticité courante [-]
τ	Contrainte de cisaillement [MPa]
\underline{f}	Vecteur force
\underline{l}	Vecteur branche
\underline{T}	Vecteur contrainte

\underline{u}	Vecteur déplacement
\underline{u}^0	Vecteur déplacement moyen
\underline{x}	Vecteur position
\underline{D}	Tenseur des vitesses de déformation
\underline{D}^{el}	Tenseur des vitesses de déformation élastique
\underline{D}^{pl}	Tenseur des vitesses de déformation plastique
\underline{D}_v	Tenseur des vitesses de déformation volumique
\underline{D}_d	Tenseur des vitesses de déformation déviatoire
\underline{F}	Tenseur gradient de la transformation
\underline{F}^{el}	Tenseur gradient de la transformation élastique
\underline{F}^{pl}	Tenseur gradient de la transformation plastique
\underline{h}	Tenseur des déformations de Hencky gauche
\underline{h}_d	Tenseur déviateur des déformations de Hencky gauche
\underline{h}_v	Tenseur sphérique des déformations de Hencky gauche
\underline{H}	Tenseur gradient des déplacements
\underline{I}	Tenseur identité
\underline{K}	Matrice de rigidité
\underline{P}	Tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff
\underline{R}	Tenseur des rotations
\underline{U}	Tenseur des déformations pures droit
\underline{V}	Tenseur des déformations pures gauche
$\underline{\sigma}$	Tenseur des contraintes de Cauchy
$\overline{\quad}$	Notation de transposée
$\underline{\nabla}$	Opérateur gradient vectoriel
2D	Bidimensionnel
3D	Tridimensionnel
CAO	Conception assistée par ordinateur
CL	Conditions aux limites
CLP	Conditions aux limites périodiques
CLPS	Conditions aux limites périodiques simplifiées
CPU	Processeur
DEM	Méthode des éléments discrets
FEM	Méthode des éléments finis
GDF	Gradient de déplacement imposé aux frontière
GDH	Gradient de déplacement homogène
MMC	Mécanique des milieux continus
MPFEM	Méthode des éléments finis multi-particules
RX	Rayon X
UV	Ultraviolet
VEP	Volume élémentaire périodique
VER	Volume élémentaire représentatif

La convention de la mécanique des sols, pour laquelle une contrainte normale positive correspond à un état de compression, est utilisée par défaut.

Les composantes d'un tenseur d'ordre deux \underline{A} caractérisant une transformation dans l'espace, sont notées A_{ij} , i et j prenant les valeurs 1, 2 ou 3.

La composante d'un vecteur \underline{u} suivant la direction i est notée u_i .

Introduction générale

Contexte

Que ce soit dans l'industrie métallurgique, pharmaceutique ou encore agro-alimentaire, le procédé de compression à froid de poudres est aujourd'hui très largement utilisé. Contrairement aux procédés d'élaboration traditionnels tels que la fonderie ou l'usinage, la mise en forme par compression à froid en matrice illustré à la [figure 1](#) permet d'obtenir des objets à faible coût énergétique et n'engendre des pertes de matière que très limitées. L'objectif de ce processus est de produire une forme quasi-finale cohésive (nommée "pièce à vert" dans le secteur de la métallurgie) en comprimant la poudre lâche dans une matrice. Il ne nécessite ni la transformation préalable du produit disponible sous forme de poudre, ni l'atteinte de températures extrêmement élevées, supérieures à la température de fusion des matériaux utilisés. Ainsi, ce procédé présente un intérêt tant d'un point de vue économique que d'un point de vue environnemental. Le coût principal de ce procédé d'élaboration réside principalement dans le prix des matrices, ce qui le rend particulièrement bien adapté aux très grandes séries.

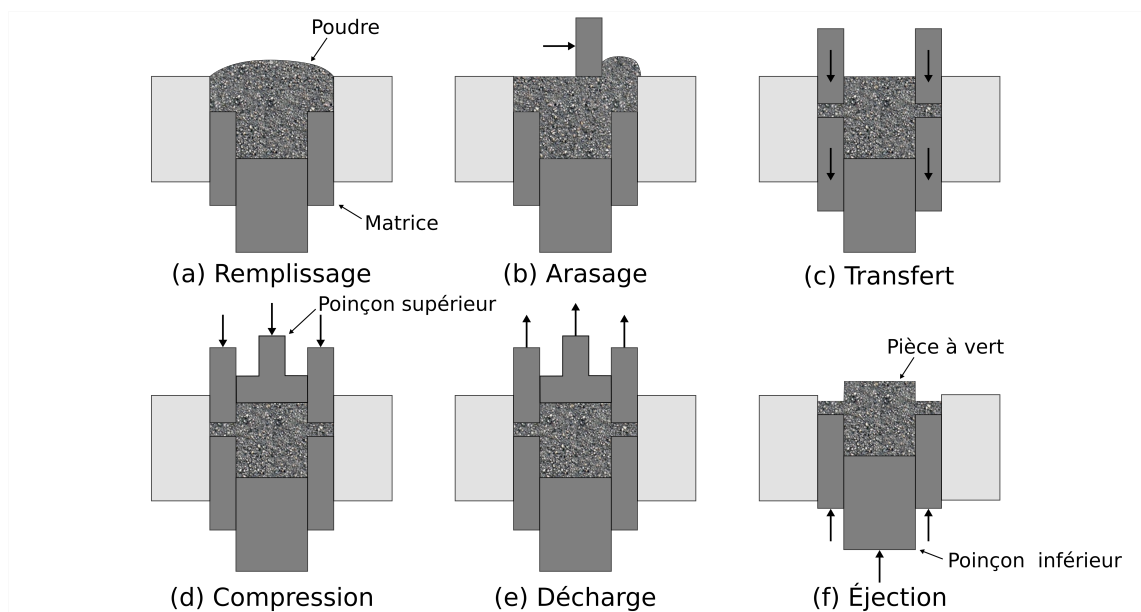


FIGURE 1 – Illustration des différentes étapes d'un cycle de compression à froid en matrice d'une poudre métallique. Figure inspirée des travaux de Abdelmoula [1].

Un des problèmes majeurs de ce procédé est le phénomène de fissuration se produisant lors de la phase de compression. Des chargements localement fortement déviatoires, souvent induits par des singularités géométriques, se retrouvent responsables de défauts voire de rupture complète des pièces fabriquées, conduisant généralement à leurs rejet pur et simple. Si le problème est bien connu, il n'y a toutefois que peu d'études dans la littérature portant sur la compréhension de la rupture macroscopique de ce type de matériau. Les modèles basés sur la mécanique des milieux

continus, tels que le modèle Drucker-Prager/Cap, sont couramment utilisés par les chercheurs et industriels pour l'étude de la densification des milieux granulaires, mais restent toutefois très limités à l'égard de la prédiction des phénomènes de rupture. Aucun modèle de comportement ne permet actuellement la prédiction de l'apparition de tels défauts, et seules de longues procédures de mise au point par essais/erreurs permettent de les éviter. Les difficultés expérimentales associées à l'étude du comportement mécanique du milieu granulaire suivant les chemins de chargement impliquant des contraintes significativement déviatoires rendent difficile le développement de modèles numériques plus précis. En particulier, les mécanismes de décohésion entre particules pour des chargements fortement déviatoires responsables des phénomènes de fissuration, ainsi que le rôle joué par la déformabilité des particules constitutives du milieu granulaire, restent aujourd'hui mal compris.

Différentes techniques de modélisation micromécanique discrète ont ainsi été développées afin de surmonter ces limites et de pallier aux difficultés techniques empêchant l'exploration expérimentale des chemins de chargement conduisant à la rupture. La méthode numérique particulière la plus couramment utilisée pour modéliser explicitement la microstructure du milieu granulaire est la méthode des éléments discrets (DEM) introduite par Cundall et Strack [2]. Cette méthode est particulièrement adaptée à la modélisation de milieux granulaires constitués de particules indéformables, mais rencontre toutefois des difficultés quant à la prise en compte de la déformabilité des particules. Dans le cas de grandes déformations des particules impliquant des changements de forme importants, la méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM) est plus appropriée. Cette méthode de modélisation micromécanique, initialement proposée par Gethin [3, 4], se situe à la jonction entre la méthode des éléments finis (FEM) et la méthode des éléments discrets (DEM) : les particules idéalisées sont maillées de sorte que leurs déformations soient intégralement prises en compte par l'intermédiaire de lois de comportement basées sur le cadre de la mécanique des milieux continus (MMC) et les interactions entre particules sont prises en compte à l'aide de lois de contact formulées en éléments finis.

Objectifs de la thèse

Plusieurs auteurs ont récemment développé cette méthode, en cherchant notamment à introduire des lois de comportement, des lois de contact et des topologies de particules réalistes. Ils se sont également intéressés à l'application des conditions aux limites (CL) sur l'échantillon numérique modélisé. Le présent projet vise à étudier au moyen de la MPFEM, via une campagne d'expérimentation numérique, les conditions de la génération d'un défaut dans un milieu granulaire ductile et à identifier les mécanismes de décohésion entre les particules. Il se base pour cela sur une approche de type endommagement, en supposant un mode de rupture homogène au sein d'un échantillon numérique assimilé à un volume élémentaire de Cauchy.

Après avoir introduit les concepts clés utiles à la compréhension du comportement mécanique des milieux granulaires confinés, les limites concernant leur modélisation dans le cadre de la MMC ainsi que les difficultés liées à l'approche expérimentale, les bénéfices associés à la modélisation discrète sont présentés au [chapitre 1](#). En particulier, l'importance d'une discrétisation à une échelle de longueur inférieure à celle de la taille des particules est soulignée pour permettre la prise en compte de la déformabilité des particules constitutives du milieu granulaire. Dans ce contexte, la méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM) est introduite et les différents développements lui étant associés sont présentés.

Différents types de CL adaptés à la MPFEM sont ensuite étudiés au [chapitre 2](#). Des échantillons numériques tridimensionnels de différentes tailles, composés de particules initialement sphériques au comportement élastoplastique, sont pour cela étudiés afin de simuler la réponse

de la microstructure de milieux granulaires à des chargements compressifs en grandes transformations (jusqu'à des densités relatives finales supérieures à 0,9), tels que couramment rencontrés pendant les phases de mise en forme par compression à froid. Les tenseurs de contrainte et de déformation mésoscopiques associés au volume élémentaire modélisé sont calculés afin d'étudier l'impact des CL et de la taille des échantillons numériques.

Au [chapitre 3](#), une loi de contact adhésive adaptée à la MPFEM est implémentée dans le code d'éléments finis *Abaqus* à l'aide d'une subroutine utilisateur *VUINTERACTION*. Cette loi de contact permet de prédire un développement de l'adhésion inter-particules lors de la compression en définissant un niveau de cohésion en chaque nœud de surface du maillage élément fini. Le principe de la loi de contact ainsi que les raisons justifiant son développement sont dans un premier temps détaillés. Dans un second temps, les prédictions numériques obtenues sont comparées aux modèles analytiques de la littérature dans le cas d'un contact entre sphères élastoplastiques développant des contacts adhésifs. Une étude expérimentale portant sur le développement de l'adhésion lors de la compression est par la suite présentée.

Enfin, le [chapitre 4](#) propose une étude de la densification d'un milieu granulaire cohésif constitué de particules ductiles. Un échantillon numérique constitué de 347 particules élastoplastiques initialement sphériques est pour cela sollicité mécaniquement à l'aide des CL présentés au [chapitre 2](#). Cette étude vise à étudier l'impact de l'énergie de Dupré sur les propriétés mésoscopiques de plasticité et d'endommagement associées au continuum de Cauchy équivalent au volume élémentaire modélisé, dans l'optique d'éclairer les micro-mécanismes responsables du comportement constitutif du milieu continu équivalent au milieu particulaire. Cette étude se base pour cela sur la loi de contact adhésive implémentée au [chapitre 3](#).

1

Analyses multi-échelles des milieux granulaires confinés

Ce chapitre présente les méthodes continues et discrètes développées pour la modélisation des milieux granulaires, leurs vertus, ainsi que leurs limites concernant les problèmes liés à l'étude de la rupture.

Sommaire

1.1 Généralités sur les milieux granulaires	6
1.1.1 Matériaux granulaires	6
1.1.2 Mécanique des milieux granulaires confinés	10
1.2 Modélisation continue des milieux granulaires confinés	15
1.2.1 Essais de caractérisation dédiés aux milieux granulaires confinés	15
1.2.2 Modélisation des surfaces de charge et de rupture	18
1.2.3 Méthode des éléments finis	21
1.3 Modélisation discrète des milieux granulaires confinés	23
1.3.1 Méthode des éléments discrets	23
1.3.2 Méthode des éléments finis multi-particules	26
1.4 Problèmes liés à la rupture dans les milieux granulaires confinés	33

1.1 Généralités sur les milieux granulaires

1.1.1 Matériaux granulaires

Cette section a pour vocation d'illustrer l'importance de l'étude des matériaux granulaires et d'introduire quelques concepts clés pouvant être utiles à leur compréhension. Elle se base en grande partie sur les lectures de Mollon [5] et de Teil [6].

1.1.1.1 Quelques chiffres

L'étude et la compréhension du comportement mécanique des matériaux granulaires est un enjeu économique majeur, en raison de la quantité faramineuse de ces matériaux manipulés par l'industrie chaque année, avoisinant les 10 milliards de tonnes. Les matériaux granulaires interviennent dans la production d'un produit fini sur deux et représentent 70 % de la matière première utilisée dans l'industrie mondiale [7]. Leur traitement et leur transport correspondent à 10 % des dépenses énergétiques de la planète et leur seule vente représente 1 % du produit intérieur brut de la France [8]. Une bonne compréhension du comportement de ce type de matériau permettrait d'obtenir un impact significatif sur l'efficacité énergétique de l'industrie, en amenant à des gains économiques et environnementaux considérables.

1.1.1.2 Domaines d'utilisations

Les matériaux granulaires sont présents dans divers secteurs de l'industrie, pour des applications pouvant être très variées. Quelques-unes de ces applications, ainsi que les enjeux associés, sont sommairement décrits ci-dessous :

Industrie agro-alimentaire – Les matériaux granulaires sont omniprésents dans l'industrie agro-alimentaire, que ce soit à l'état brut (céréales, fruits, graines, ...) ou fini (farine, sucre, ...). Leur bonne compréhension est primordiale afin notamment de s'affranchir de problématiques liées à leur stockage et à leur transport. Par exemple, l'étude de leurs propriétés d'écoulement est nécessaire pour chercher à s'affranchir des problèmes d'obstruction des silos à grains (pouvant être dû au phénomène d'effet de voûte illustré [figure 1.2](#)).

Industrie de la construction – De manière assez similaire, de nombreuses problématiques existent quant à l'écoulement des matériaux granulaires de construction (sable, ciment, ...). La compréhension de ces matériaux est également requise pour l'optimisation des propriétés mécaniques des bétons et mortiers, et l'amélioration de la résistance structurelle des éléments de construction. Enfin, les matériaux granulaires sont également utilisés comme bases de fondations, en permettant d'assurer la résistance mécanique et le drainage des bâtiments et des routes par exemples. Une bonne compréhension de leurs propriétés de perméabilité devient ainsi également nécessaire.

Industrie métallurgique – Le procédé d'élaboration par compression et frittage de poudres illustré [figure 1.1](#) est un procédé largement utilisé dans divers secteurs industriels pour la fabrication de pièces métalliques. Il combine les avantages de ne pas nécessiter de températures extrêmement élevées (supérieures à la température de fusion des matériaux utilisés) et de ne pas induire de pertes de matière significatives. Il s'agit donc d'une option attrayante d'un point de vue économique comme environnemental, par rapport à d'autres techniques plus traditionnelles telles que la fonderie ou l'usinage. Ce procédé permet d'obtenir des pièces de géométries complexes présentant à la fois une bonne résistance mécanique et une grande précision dimensionnelle. Son coût principal résidant dans le prix des outillages utilisés lors de la compression et du frittage, ce procédé est particulièrement adapté aux très grandes séries. Il est utilisé dans divers secteurs industriels, tels que l'industrie automobile pour la fabrication d'engrenages, de bielles, d'arbres à cames ou encore de pièces de transmission. L'utilisation de matériaux initialement sous forme granulaire permet également la production de pièces métalliques à des niveaux de pureté et d'uniformité très

élevés, en s'affranchissant des phénomènes de diffusion couramment rencontrés en fonderie. Ce contrôle accru de la microstructure rend également possible la fabrication d'alliages métalliques et de matériaux composites à matrice métallique et à renfort céramique de très hautes performances. Pour ces raisons, le procédé d'élaboration par compression et frittage est notamment utilisé dans le secteur aéronautique pour la fabrication d'aubes de turbine, dans le secteur médical pour la fabrication de prothèses, dans le secteur électronique pour la production de composants électroniques à haute conductivité ou encore pour la fabrication de plaquettes de coupes et d'outils abrasifs à dureté élevée. Enfin, ce procédé d'élaboration permet également la fabrication de pièces ne pouvant être obtenues par aucune autre technologie, constituées par exemple de matériaux à températures de fusion extrêmement élevées.

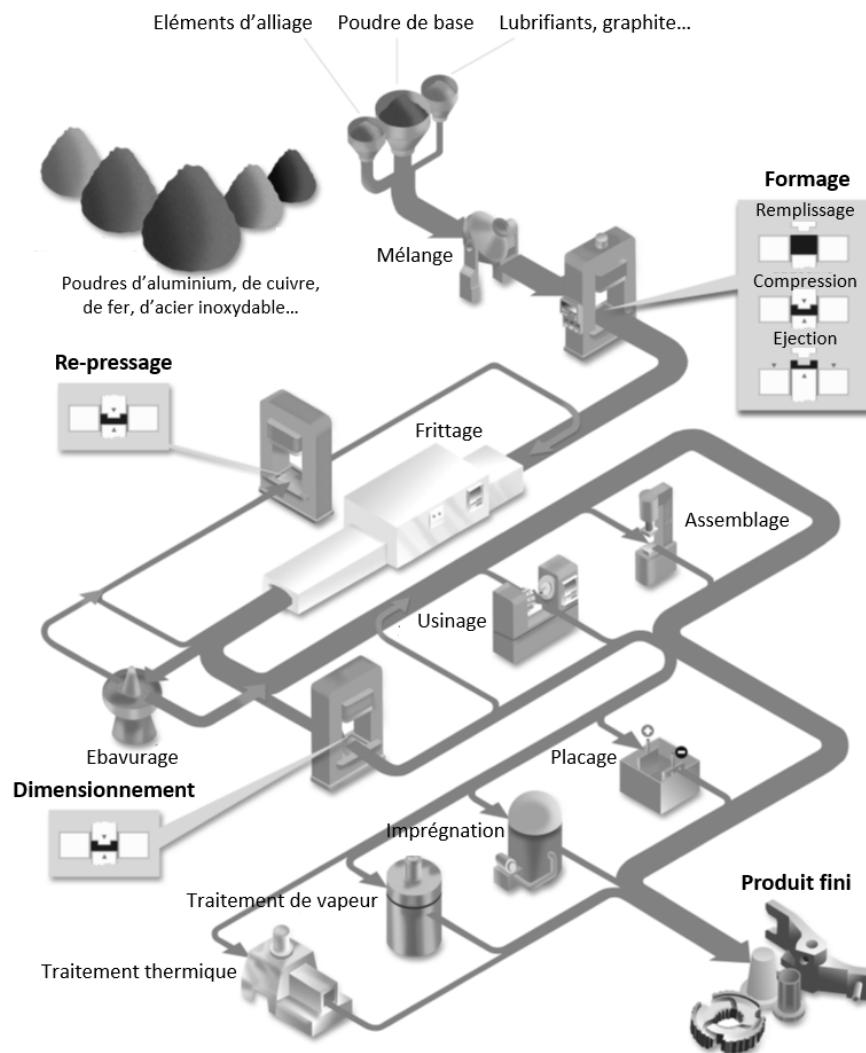


FIGURE 1.1 – Cycle de production d'une pièce par métallurgie des poudres. Figure adaptée de l'association européenne de métallurgie des poudres [9].

Industrie pharmaceutique – Les médicaments peuvent être produits et conditionnés sous différentes formes. Le comprimé pharmaceutique correspond à celle la plus répandue, du fait des nombreux avantages qu'il présente, tant sur le plan de sa fabrication que sur celui de sa prise par le patient. Il est réalisé à l'aide d'un procédé de compression en matrice, à partir d'une poudre dont les particules ont une taille de l'ordre de 100 μm . Le maintien de températures relativement faibles lors de ce procédé d'élaboration permet la conservation des propriétés physico-chimiques des principes actifs du médicament. D'un point de vue industriel, il est fondamental d'obtenir des

comprimés suffisamment résistants mécaniquement pour assurer leur intégrité durant toutes les étapes suivant la compression, de l'enrobage au conditionnement. L'agence américaine des produits alimentaires et des médicaments (FDA) estimait récemment que les problèmes de mise en forme des médicaments sous forme solide engendraient un coût annuel de plusieurs dizaines de milliards de dollars, illustrant ainsi l'intérêt à la fois économique et scientifique d'études fondamentales sur ce sujet.

1.1.1.3 Propriétés générales

La compréhension du comportement mécanique des milieux granulaires correspond donc à un enjeu crucial pour divers secteurs industriels. Les milieux granulaires sont des matériaux compliqués, pouvant exhiber des comportements s'apparentant à ceux des fluides à faible densité relative et à ceux des solides à forte densité relative. Leur étude scientifique est donc complexe et nécessite la prise en compte de multiples paramètres microscopiques venant influencer sur leurs comportements macroscopiques :

Géométrie des particules – La géométrie des particules constitutives du milieu granulaire a un impact crucial sur son comportement mécanique. Des particules sphériques pourront facilement se réagencer tandis que des particules à géométrie plus complexe auront tendance à s'enchevêtrer, augmentant ainsi la résistance à l'écoulement.

Interactions de surface – La compréhension des interactions de contact entre les particules constitutives du milieu granulaire est également un aspect fondamental dans l'étude des matériaux granulaires. Ces interactions de surface peuvent être de natures très différentes, en fonction notamment de la composition chimique et de la taille des particules considérées. Bien qu'intervenant à l'échelle particulaire, elles ont toutefois un impact clé sur le comportement macroscopique du matériau granulaire, sur ses propriétés d'écoulement et de résistance à la rupture notamment. Les phénomènes de friction et d'adhésion intervenant entre particules en contact doivent donc être pris en compte pour le développement de lois de comportement macroscopique du matériau granulaire. Il est pour cela d'usage de distinguer deux grandes familles de milieux granulaires, caractérisées par des comportements mécaniques très différents :

- les milieux granulaires "grossiers", constitués de particules de taille supérieure à la centaine de micromètres, pour lesquels les forces de gravité et de contact (appuis, frottements, chocs) seront prédominantes ;
- les milieux granulaires "fins" (ou poudres), constitués de particules de taille inférieure au micromètre, pour lesquels les forces adhésives (van der Waals, électrostatiques, capillaires) ainsi que les interactions avec le fluide environnant ne pourront plus être négligées.

Une approche purement mécanique sera suffisante pour l'étude des milieux granulaires "grossiers", tandis qu'une approche physico-chimique sera nécessaire concernant les milieux granulaires "fins".

Déformation des particules – Enfin, la ductilité des particules constitutives du milieu granulaire a également un rôle déterminant dans le comportement macroscopique du matériau granulaire. Les surfaces de contact (et donc les interactions de surface) évolueront au cours de la déformation des particules, sous l'action des sollicitations externes, venant modifier les propriétés mécaniques du milieu granulaire.

Le lien sous-jacent entre ces propriétés microstructurales et les caractéristiques macroscopiques du milieu granulaire peut être illustré à l'aide de différents phénomènes physiques, décrits succinctement ci-dessous, pouvant être observés en fonction de la nature du milieu granulaire et du régime d'écoulement considéré :

Effet de voûte – L'effet de voûte, illustré [figure 1.2](#), correspond à l'apparition d'une force opposée à la direction de chargement d'un milieu granulaire confiné. Ce phénomène est causé par

le réagencement des particules et la déviation des chaînes de forces de la direction de sollicitation, venant former une structure de soutien en forme de voûte. Les efforts de frottement permettent alors la redistribution des efforts normaux sur ces faces latérales. L'effet de voûte est particulièrement important dans les applications industrielles où les matériaux granulaires doivent être stockés et transportés en vrac, tels que les silos, les trémies et les convoyeurs. Sa prise en compte est primordiale pour s'affranchir de problèmes d'obstruction.

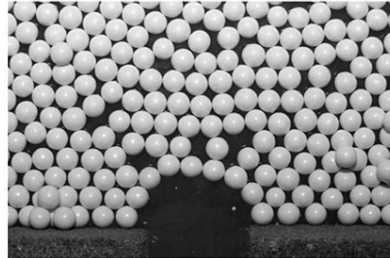


FIGURE 1.2 – Illustration du phénomène d'effet de voûte issue des travaux de Teil [6].

Dilatance de Reynolds – La dilatance de Reynolds est un phénomène se référant à la tendance des matériaux granulaires à se dilater sous contrainte de cisaillement, ce qui augmente leur résistance à l'écoulement. Cette propriété illustrée figure 1.3 est importante dans de nombreuses applications, telles que la conception de barrages, de fondations de bâtiments et de routes. Elle est causée par le réagencement des particules durant le chargement en une structure moins ordonnée.

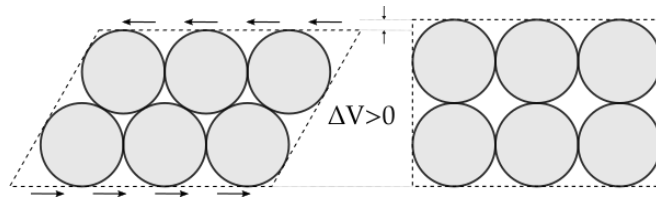


FIGURE 1.3 – Illustration du phénomène de dilatance de Reynolds.

Bandes de cisaillement – Les bandes de cisaillement correspondent à des zones localisées de fort cisaillement, apparaissant sous chargements macroscopiques non-isotropes. Ces contraintes de cisaillement engendrent un effet de dilatance de Reynolds venant réduire la densité du milieu granulaire et par la même occasion sa résistance mécanique. Comme illustré figure 1.4, les bandes de cisaillement sont localisées sur des plans ayant une épaisseur de quelques particules et sont à l'origine de phénomènes de rupture au sein des milieux granulaires (on parle alors de bande de glissement).

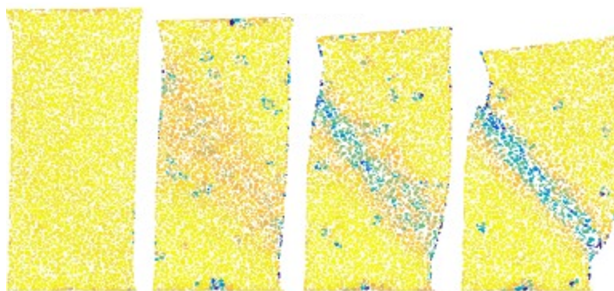


FIGURE 1.4 – Formation d'une bande de cisaillement dans un milieu granulaire observée par tomographie à rayons X. Représentation des déformations déviatoires obtenues par corrélation d'images. Figure issue des travaux de Kawamoto et al. [10].

1.1.2 Mécanique des milieux granulaires confinés

1.1.2.1 Avant propos

Parmi les très nombreuses situations mettant en œuvre des milieux granulaires, il existe une famille de procédés impliquant une mise en forme de poudres industrielles par compression (correspondant à l'étape de "formage" de la [figure 1.1](#)). Il s'agit d'un procédé conférant à un volume de poudre - initialement à l'état pulvérulent – une forme et une cohésion permettant d'aboutir à une pièce solide. Dans ce contexte précis, il est possible de citer :

- la compression à froid en matrice de poudres pharmaceutiques ;
- la compression à froid en matrice suivie du frittage de poudres métalliques ou céramiques ;
- la compression isostatique à chaud de poudres métalliques.

Dans le cas des poudres pharmaceutiques, la cohésion du comprimé est obtenue lors de la seule phase de compression à froid en matrice. Dans le deuxième cas, la compression en matrice confère une forme ainsi qu'une cohésion mécanique de faible niveau au volume de poudre. La phase de frittage suivant cette compression consiste en une exposition du volume de poudre comprimée à de hautes températures, ayant pour objectif de souder les particules de poudre par diffusion, de sorte à obtenir un solide disposant d'une limite d'élasticité comparable à celle du matériau constitutif des particules. La compression isostatique à chaud combine de manière simultanée les phases de compression et de frittage : le volume de poudre versé dans un conteneur subit de manière simultanée une pression et une température élevées par l'intermédiaire des parois du conteneur. Les études scientifiques liées à ces procédés, présentées ci-après, ont conduit à des approches expérimentales, théoriques et numériques de sorte à circonscrire les phénomènes physiques entrant en jeu au cours du procédé d'élaboration, lors des phases de remplissage [11-13] et de compression [14-18]. Dans le cas du procédé de compression à froid suivi de frittage, la pièce issue de la phase de compression (avant frittage) est nommée "pièce à vert". La cohésion mécanique de la pièce à vert est obtenue par l'effet des forts niveaux de pression atteints au sein de la matrice. Cette cohésion de la pièce à vert ne doit pas être confondue avec celle obtenue lors de la phase de frittage, grâce à l'activation thermique du phénomène de diffusion entre les particules de poudre. La phase de frittage (de même que le procédé de compression isostatique à chaud) active ce phénomène, entraînant une soudure des particules et une augmentation significative des caractéristiques mécaniques des pièces [19-21]. Outre les phénomènes impliqués dans le volume de poudre lui-même, il convient de souligner que les interactions entre la poudre et les outillages (frottement, diffusion, ...) sont également à prendre en compte [22-24].

Dans ce contexte inhérent aux procédés précités, où de nombreux phénomènes peuvent être abordés, cette thèse est centrée sur le développement et la rupture de l'adhésion mécanique inter-particules au cours de la phase de compression. Par ailleurs, il s'agit d'étudier le cas de poudres constituées de matériaux ductiles (ce qui concerne par exemple les poudres de fer et exclut par exemple les poudres céramiques). La densité de la poudre est un paramètre important évoluant fortement au cours des phases du procédé. Ainsi, il convient de distinguer : la densité de la composition chimique de la poudre (matériau dense sans porosité), la densité de remplissage, la densité à vert, la densité après frittage. Sauf cas particulier (massif poreux, comprimé pharmaceutique), il est généralement souhaité d'atteindre la densité du matériau dense, c'est-à-dire une pièce sans porosité. La densité relative est également très utilisée, cette quantité sans dimension correspond au ratio entre la densité considérée et la densité du mélange de poudre sans porosité. Ainsi, il convient de retenir que la poudre évoluera typiquement d'une densité relative initiale de l'ordre de 0,6 vers une densité relative finale de 0,95 en fin de compression. Les caractéristiques mécaniques du comprimé à vert (tel que son module de Young et sa contrainte à la rupture) seront des fonctions croissantes de la densité relative [18, 25], suggérant ainsi que l'adhésion inter-particules développée lors de la compression à froid en matrice est elle-même une fonction croissante de la densité relative et donc du niveau de pression atteint au sein de la matrice. Par ailleurs, d'autres

phénomènes peuvent apparaître à l'échelle du comprimé à vert comme l'existence de contraintes résiduelles [26], de gradients de densités relatives [22, 27, 28] ou encore de rupture au cours des phases de compression ou d'éjection [15, 29, 30].

D'un point de vue industriel, il est intéressant (notamment à des fins de modélisation et de dimensionnement) de représenter ce type de matériau comme un milieu continu équivalent. Cependant, les interactions de contact entrant en jeu entre les différentes particules du milieu granulaire sont à l'origine de grandes dissipations énergétiques et de fortes non-linéarités, rendant difficile le développement de lois de comportement appropriées. Par ailleurs, le réagencement et la déformation des particules pouvant survenir en présence de sollicitations mécaniques extérieures confèrent aux matériaux granulaires un comportement fortement anisotrope et compressible. En raison de cette complexité, leur modélisation s'avère difficile. Aucune loi universelle ne permet de prédire leur comportement, et seules des lois empiriques, souvent très restrictives¹, permettent leur modélisation. La forte non-linéarité du comportement mécanique de ce type de matériau équivalent homogénéisé impose également le développement de critères de rupture et de plasticité adaptés. Cette section présente ainsi les différents outils qui seront utiles à la modélisation mécanique des milieux granulaires vus comme des milieux continus dans le cadre des grandes transformations.

1.1.2.2 Définition des tenseurs de contrainte et de déformation

Soit $\underline{\underline{F}}$ le gradient de la transformation au milieu de Cauchy équivalent au matériau granulaire. Il est possible d'effectuer une décomposition polaire de ce tenseur comme le produit d'une dilatation et d'une distorsion pure :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{\underline{U}} = \underline{\underline{V}} \cdot \underline{\underline{R}} \quad (1.1)$$

où $\underline{\underline{U}}$ est le tenseur de déformation pure droit, $\underline{\underline{V}}$ est le tenseur de déformation pure gauche et $\underline{\underline{R}}$ est le tenseur de rotation. Dans le cadre des grandes transformations, et comme il sera détaillé [section 2.3](#), il est d'usage d'utiliser le tenseur de Hencky gauche $\underline{\underline{h}}$ défini [équation 1.2](#) comme descripteur de la déformation² et le tenseur de Cauchy $\underline{\underline{\sigma}}$ comme descripteur de la contrainte.

$$\underline{\underline{h}} = \ln \underline{\underline{V}} \quad (1.2)$$

Le développement d'une loi de comportement permet alors de déterminer le lien entre l'état de déformation et l'état de contrainte associé au milieu granulaire homogénéisé. Dans le présent travail, une loi de comportement élastoplastique écrouissable est considérée. Celle-ci doit inclure la compressibilité plastique du matériau afin de prendre en compte les mécanismes de densification. Elle se base sur les concepts de surfaces de charge, de loi d'écoulement et d'écrouissage décrits ci-dessous.

1.1.2.3 Surfaces de charge

Une surface de charge est une représentation, dans l'espace des contraintes, du seuil de plasticité d'un milieu continu élastoplastique. Elle permet de déterminer, pour un état de contrainte donné, la frontière entre les domaines élastiques et plastiques. Soit pour cela un état de contrainte quelconque, défini par un point M de coordonnées $(\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III})$ dans l'espace des contraintes principales et f la fonction de charge caractérisant la surface de charge :

- pour $f(M) < 0$ (lorsque le point M se situe à l'intérieur de la surface de charge), le matériau a un comportement élastique réversible ;

1. En termes de régime d'écoulement, de géométries de particules, ou encore de types de matériaux.

2. Le tenseur de Hencky droit, défini par $\ln \underline{\underline{U}}$, peut également être utilisé. Comme il sera détaillé [section 2.3](#), le tenseur de Hencky gauche est ici utilisé, ceci afin d'avoir une description objective de l'état de déformation.

- pour $f(M) = 0$ (lorsque le point M se situe sur la surface de charge), le matériau se déforme plastiquement de manière irréversible.

La connaissance de la fonction de charge nécessite l'utilisation d'un critère de plasticité adapté au matériau considéré. Par exemple, le critère de von Mises explicité [équation 1.3](#) permet la définition d'une fonction de charge particulièrement adaptée à la plastification des matériaux métalliques denses, avec σ_y la limite d'élasticité en traction simple du matériau étudié. Ce critère suppose (i) une incompressibilité plastique (la déformation plastique se passe à volume constant) et (ii) une limite élastique identique en traction et en compression.

$$f(M) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2} - \sigma_y \quad (1.3)$$

D'autres critères (qui seront présentés [sous-section 1.2.2](#)) offrent des prédictions plus adaptées aux milieux granulaires.

1.1.2.4 Loi d'écoulement

Une fois l'entrée en plasticité déterminée (grâce à la connaissance de la surface de charge), la direction et l'intensité de la déformation plastique sont ensuite obtenues par l'intermédiaire de la loi d'écoulement. En décomposant les déformations en déformations élastiques et plastiques, le gradient de la transformation $\underline{\underline{F}}$ s'écrit, dans le cadre des grandes transformations :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^{el} \cdot \underline{\underline{F}}^{pl} \quad (1.4)$$

avec $\underline{\underline{F}}^{el}$ et $\underline{\underline{F}}^{pl}$ les gradients de la transformation associés aux déformations élastiques et plastiques respectivement. Sous l'hypothèse des petites déformations élastiques, il est possible d'aboutir à une décomposition additive des vitesses de déformation :

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}^{el} + \underline{\underline{D}}^{pl} \quad (1.5)$$

avec $\underline{\underline{D}}$ le tenseur des vitesses de déformation défini par :

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} + (\underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1})^T \right) \quad (1.6)$$

et $\underline{\underline{D}}^{el}$ et $\underline{\underline{D}}^{pl}$ les tenseurs des vitesses de déformation associés respectivement à la déformation élastique et plastique et définis de manière similaire. Le tenseur $\underline{\underline{\dot{F}}}$ correspond quant à lui au tenseur dont les composantes sont les dérivées temporelles des composantes du tenseur $\underline{\underline{F}}$. La loi de Hooke généralisée permet de relier le tenseur des vitesses de déformation élastique à l'état de contrainte. Il ne reste alors qu'à déterminer le lien entre le tenseur des vitesses de déformation plastique et l'état de contrainte.

Dans le cas des mono-cristaux et de plasticité indépendante des vitesses de déformation, le tenseur des vitesses de déformation plastique se détermine grâce à la loi de normalité (également appelée loi d'écoulement associée) stipulant que la vitesse de déformation plastique est normale à la surface de charge. Ce postulat est justifié par le principe du travail maximal, formulé par Hill [31] suite aux travaux de von Mises [32] et de Taylor [33], qui amène à l'[équation 1.7](#), où λ est un scalaire appelé multiplicateur plastique.

$$\underline{\underline{D}}^{pl} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (1.7)$$

Cette relation s'avère particulièrement bien vérifiée pour les matériaux denses [34]. Il est alors possible de la généraliser aux matériaux plus complexes en substituant dans l'[équation 1.7](#) la fonction de charge f par une fonction g appelée "potentiel plastique". De cette manière, la vitesse de déformation plastique ne sera plus normale à la surface de charge, mais à une autre surface

caractérisant le potentiel plastique. La loi d'écoulement sera dite associée au critère de plasticité lorsque $f = g$ et non associée dans le cas contraire [1]. En plus de la fonction de charge, il sera ainsi nécessaire de connaître le potentiel plastique associé au matériau considéré pour la création d'une loi de comportement.

1.1.2.5 Écrouissage

Enfin, lorsque le point M de l'espace des contraintes tend à se déplacer vers l'extérieur de la surface de charge, celle-ci est alors modifiée par écrouissage plastique. La forme de la surface de charge (et donc les propriétés élastoplastiques du matériau) est alors impactée par l'historique du chargement du milieu considéré. Cette observation s'explique par une adaptation microstructurale du matériau au chargement. Dans le cas d'un matériau granulaire, les surfaces de contact entre particules s'orienteront en fonction de la direction de sollicitation, venant ainsi augmenter la résistance mécanique de l'échantillon suivant cette direction.

Différents modèles d'écrouissage (prédisant l'évolution de la fonction f avec le chargement) permettent de prédire l'évolution des surfaces de charge. Les plus courants sont l'écrouissage isotrope, correspondant à une homothétie de la surface de charge, et l'écrouissage cinématique, correspondant à une translation de la surface de charge dans l'espace des contraintes. L'évolution des surfaces de charge avec ces deux modèles est schématisée [figure 1.5](#). Pour la plupart des matériaux, l'évolution réelle des surfaces de charge se situera entre ces deux prédictions et de longues procédures expérimentales, souvent difficiles à mener, devront être réalisées.

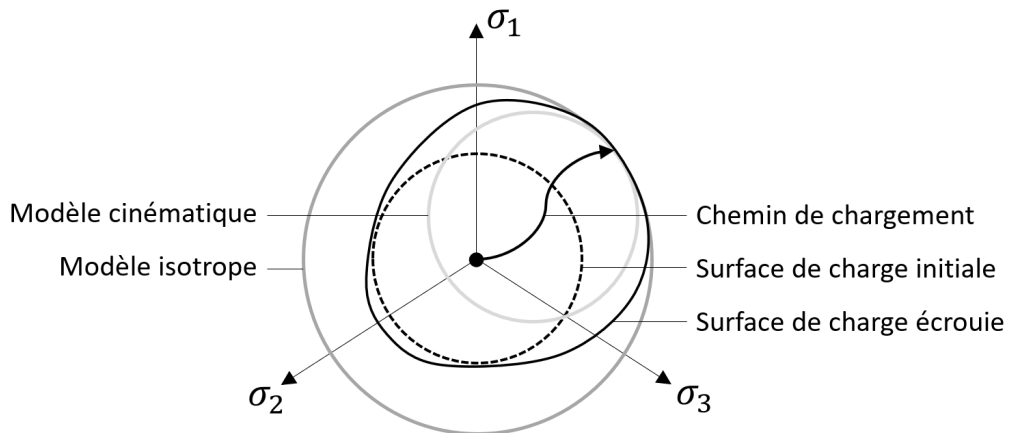


FIGURE 1.5 – Schématisation de l'évolution des surfaces de charge par écrouissage dans le plan déviatoire. Figure inspirée des travaux de Harthong [35].

Reprenons l'exemple du critère de von Mises introduit précédemment. En décomposant le tenseur des vitesses de déformation $\underline{\underline{D}}$ en une partie sphérique isotrope $\underline{\underline{D}}_v$ et une partie déviatoire isochore $\underline{\underline{D}}_d$ (équation 1.8), il est possible de définir une vitesse de déformation équivalente D_{eq} (équation 1.9) et par la même occasion une déformation équivalente E_{eq} (équation 1.10).

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}_v + \underline{\underline{D}}_d \quad (1.8)$$

$$D_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{D}}_d^2)} \quad (1.9)$$

$$E_{eq} = \int_0^t D_{eq} dt \quad (1.10)$$

La modification de la fonction de charge f peut alors être prise en compte à l'aide d'une loi d'écroutissage (isotrope dans le cas présent) telle que présentée [équation 1.11](#), où K et n correspondent à deux paramètres d'écroutissage.

$$\sigma_y = K(E_{eq})^n \quad (1.11)$$

1.1.2.6 Rupture et endommagement

Pour des chemins de chargement s'éloignant de la compression isotrope, il est fréquent que les matériaux exhibant des comportements élastoplastiques viennent à se détériorer sans plastification. L'utilisation de surfaces de rupture, construites sur le même principe, permet de déterminer l'état de contrainte correspondant à cette détérioration.

La notion de rupture dans un matériau n'est pas une notion évidente à définir. Elle est en général associée à l'apparition d'une fissure (création d'une nouvelle interface), voire à la séparation en deux parties distinctes d'un corps solide. Cette définition est mal adaptée aux cas des milieux granulaires, qui par nature sont constitués de plusieurs parties. Elle l'est encore moins concernant les milieux granulaires non-cohésifs. Dans ce cadre, il est donc d'usage d'associer la rupture à la perte de stabilité du matériau, celui-ci n'étant pas en mesure de supporter un chargement statique au-delà d'une certaine limite. Le développement d'un critère de rupture permet de prédire cette perte de stabilité pour un état de contrainte donné.

L'endommagement est quant à lui défini comme une perte progressive de la résistance mécanique du matériau étudié. Il correspond à une détérioration microstructurale (par exemple liée à l'apparition de microfissures) amenant à une réduction de ses propriétés mécaniques. Des critères d'endommagement, basés sur des modifications microstructurales ou sur l'évolution de propriétés mécaniques pouvant conduire à la rupture, permettent de le quantifier.

1.2 Modélisation continue des milieux granulaires confinés

1.2.1 Essais de caractérisation dédiés aux milieux granulaires confinés

La très faible résistance en traction des matériaux granulaires comprimés à froid rend impossible l'utilisation d'essais de caractérisations mécaniques classiques, tels que la traction-torsion ou la traction biaxiale, couramment utilisés dans le cas de la caractérisation des matériaux denses. Les matériaux granulaires ont en effet tendance à perdre rapidement leurs caractéristiques solides, pour des contraintes de traction relativement faibles, suffisantes pour supprimer l'adhésion inter-particulaire. Différents essais mécaniques de caractérisation, présentés ci-dessous, sont ainsi développés pour la caractérisation mécanique des matériaux granulaires.

1.2.1.1 Compression œdométrique de révolution

L'essai de compression œdométrique de révolution³ illustré figure 1.6 permet la caractérisation de la densification et de la consolidation des milieux granulaires sous compression uniaxiale. Dans cet essai, l'échantillon est confiné au sein d'une matrice fixe et rigide, tandis qu'un poinçon supérieur vient appliquer une déformation uniaxiale au milieu granulaire sous l'action d'une presse hydraulique instrumentée.

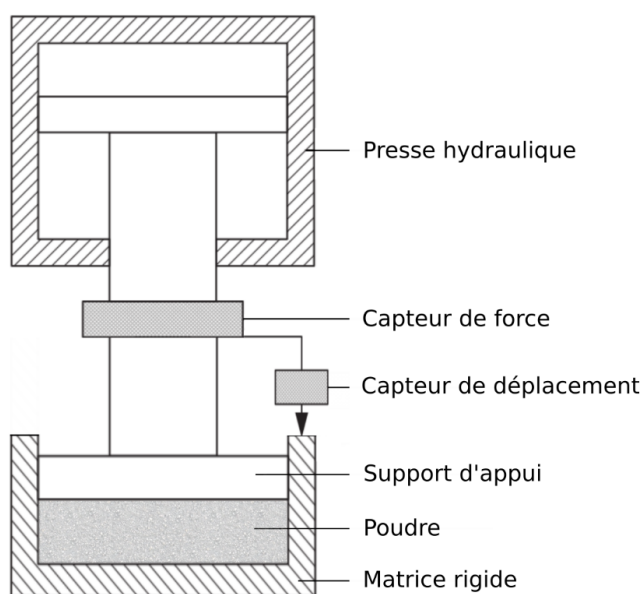


FIGURE 1.6 – Schématisation de l'essai de compression œdométrique de révolution.

L'essai de compression œdométrique permet une caractérisation simple et rapide des milieux granulaires confinés soumis à des chargements axiaux, tels que fréquemment rencontrés dans le secteur de la géotechnique. Il peut aisément être effectué en présence du drainage d'un fluide et est ainsi particulièrement utilisé en analyse des structures géotechniques pour l'étude de l'impact de la saturation des sols. Il reste toutefois limité à l'étude d'un seul chemin de chargement et ne permet donc pas une compréhension totale des mécanismes de déformation entrant en jeu dans la déformation des matériaux granulaires. Cet essai s'apparente à l'essai de compression en matrice instrumentée utilisé en caractérisation des poudres pour mesurer l'évolution de la contrainte radiale avec le chargement.

3. Également appelé essai de consolidation ou de compressibilité.

1.2.1.2 Compression triaxiale de révolution

L'essai de compression triaxiale de révolution présenté [figure 1.7](#) vient pallier ces manques. Dans cet essai, le milieu granulaire n'est plus confiné dans une matrice rigide, mais simplement maintenu à l'aide d'une membrane élastomère souple ne rigidifiant pas l'échantillon. Il est alors possible de soumettre à l'échantillon un chargement axial par l'intermédiaire d'une presse hydraulique (cf. essai œdométrique de révolution), mais également radial par l'intermédiaire d'un fluide mis sous pression.

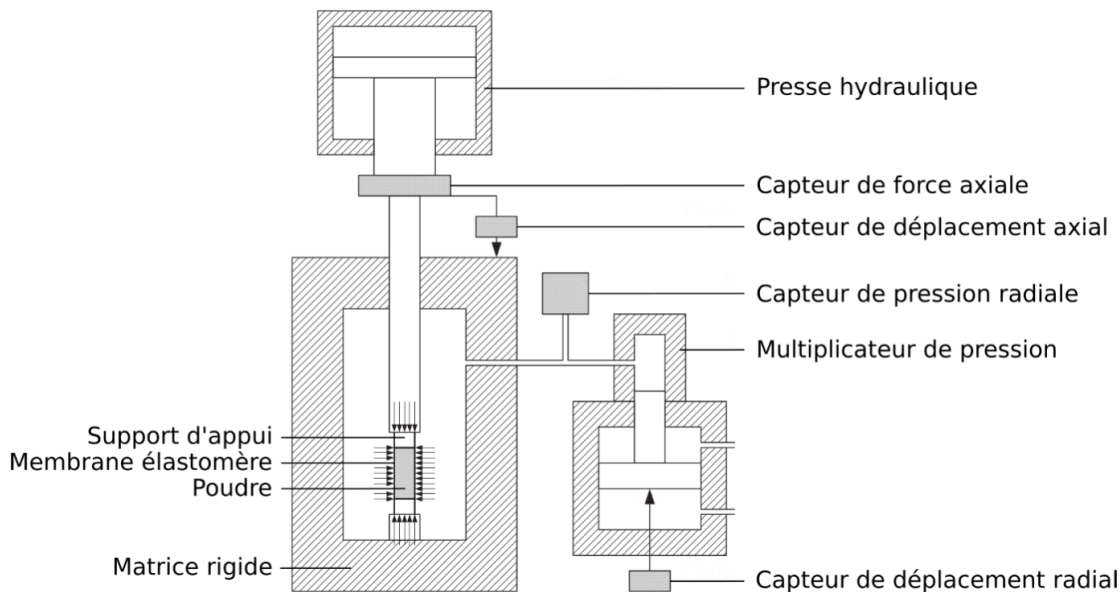


FIGURE 1.7 – Schématisation de l'essai de compression triaxiale de révolution.

L'essai de compression triaxiale de révolution permet ainsi l'exploration de chemins de chargement différent de la compression simple. Il permet également de s'affranchir des problématiques de frottement contre les parois latérales de la matrice rigide, rencontrées avec l'essai œdométrique de révolution. Il s'agit donc d'un essai de caractérisation plus général des matériaux granulaires confinés sous pression hydrostatique, permettant l'étude de la plastification et de la rupture de milieux granulaires sujets à des chargements autres que de la compression simple, également en présence d'un éventuel drainage.

1.2.1.3 Prédiction expérimentale des surfaces de charge

Pour ces raisons, l'essai de compression triaxiale de révolution est fréquemment utilisé pour la détermination expérimentale des surfaces de charge et de rupture associées au milieu granulaire. L'échantillon initialement dans un état donné (écroui ou non) est pour cela soumis à différents chemins de chargement balayant l'espace des contraintes. Le domaine élastique de la poudre lâche étant quasi-inexistant, il est courant d'effectuer une compression initiale venant consolider l'échantillon. Ce chargement initial correspond classiquement à de la compression hydrostatique isotrope ou à de la compression en matrice ([figure 1.8](#)).

Une fois ce chargement initial terminé, une décharge élastique de l'échantillon suivie d'une recharge suivant l'une des directions de l'espace des contraintes est effectuée ([figure 1.9](#)). Le choix d'un critère de plasticité permet finalement de déterminer l'entrée en plasticité de l'échantillon et ainsi d'obtenir un point de la surface de charge dans l'espace des contraintes.

En raison de l'absence de critère de plasticité universel dans le cas des milieux granulaires, il est courant de considérer que l'entrée en plasticité se fait pour une déformation axiale ou radiale résiduelle de l'ordre de 0,1 % [[37-39](#)]. A l'aide de ce critère, Akisanya et al. [[37](#)] et Sridhar et

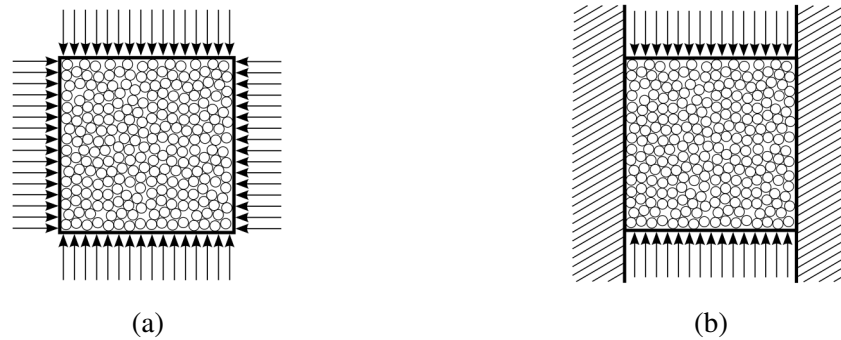


FIGURE 1.8 – Schématisation des chargements couramment utilisés. (a) Compression isotrope et (b) Compression en matrice (ou œdométrique). Figure issue des travaux de Harthong [35].

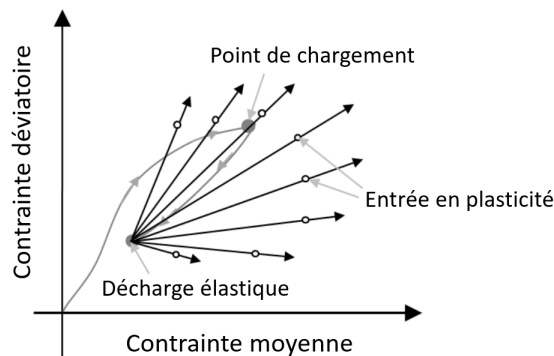


FIGURE 1.9 – Illustration du principe d'obtention des surfaces de charge associées à un milieu granulaire. Figure adaptée des travaux de Abdelmoula [36].

Fleck [38] se sont intéressés à l'impact du chemin de chargement sur les surfaces de charge, en étudiant la compression isotrope et en matrice d'une poudre constituée de particules sphériques de cuivre à une densité relative de 0,8. Leurs études (présentées figure 1.10) ont montré que ces deux chemins de chargement amènent à des surfaces de charge complètement différentes, illustrant ainsi la dépendance de la réponse mécanique du milieu granulaire à l'historique de chargement.

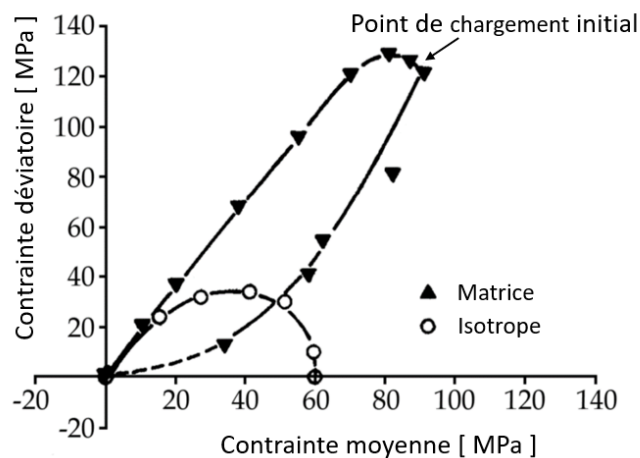


FIGURE 1.10 – Surfaces de charge obtenues par Akisanya et al. [37] pour une compression isotrope et en matrice à une densité relative de 0,8, sur une poudre de cuivre constituée de particules sphériques.

Schneider et Cocks [39] ont ensuite utilisé ce même critère pour illustrer la dépendance des surfaces de charge à la densité relative, au matériau constitutif des particules, ainsi qu'à leur morphologie. Quatre types de poudres, constituées de fer et de cuivre et de morphologies irrégulières ou sphériques, ont pour cela été étudiés. Cette étude a permis de démontrer l'impact de ces différents paramètres sur la plasticité des milieux granulaires. La figure 1.11 représente les surfaces de charge ayant été obtenues sur des poudres de fer constituées de particules sphériques et irrégulières pour différentes densités relatives. La différence entre ces deux figures illustre ainsi l'impact de la morphologie des particules sur la réponse mécanique du milieu granulaire.

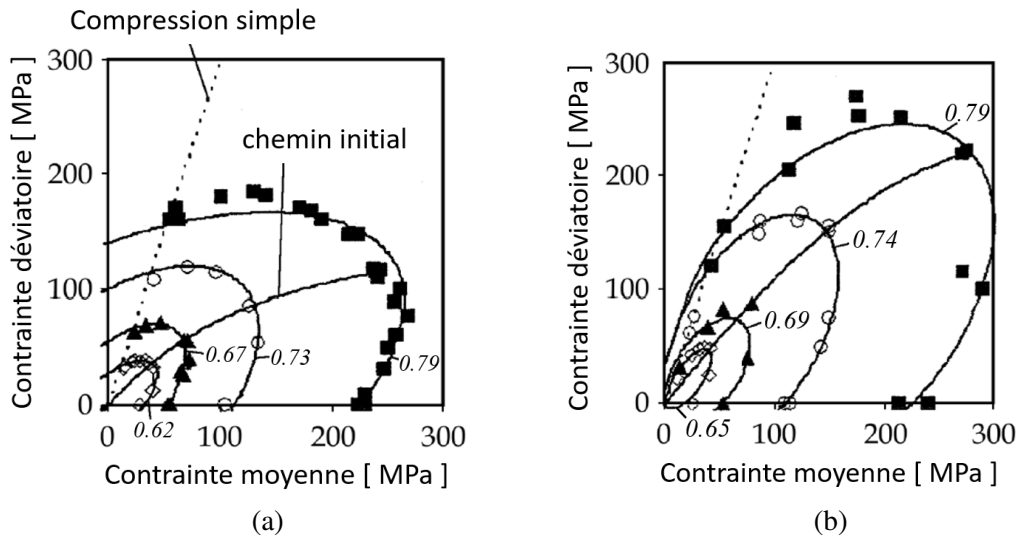


FIGURE 1.11 – Surfaces de charge obtenues par Schneider et Cocks [39] pour une compression en matrice à différentes densités relatives d'une poudre de fer constituée de particules de formes (a) irrégulières et (b) sphériques.

Cependant, l'utilisation expérimentale d'un tel critère impose une investigation complète de la surface de charge à l'aide d'un unique échantillon, en raison de la grande sensibilité au chargement initial. Il est donc primordial de ne (presque) pas plastifier l'échantillon à chacune des recharges, rendant les essais longs et fastidieux pour des densités relatives élevées. En raison de cette difficulté technique, il est fréquent d'aborder la plasticité de manière plus simple, en assimilant les surfaces de charge aux surfaces isodensité. Ceci permet l'utilisation de plusieurs échantillons granulaires, évitant ainsi les problèmes de plastification à la recharge rencontrés précédemment. Cette méthode a été utilisée par Shima et al. [40] et Pavier [41] pour l'étude de la compression de milieux granulaires jusqu'à très haute densité relative (0,98). Pavier a notamment relevé la dépendance du chemin de chargement sur les surfaces isodensité pour un même point de chargement. La figure 1.12 illustre ce résultat en comparant les surfaces isodensité correspondant à des essais de compression triaxiale classiques et sur-consolidés associées à un même point de chargement.

1.2.2 Modélisation des surfaces de charge et de rupture

Du fait de leur complexité et de leur hétérogénéité, il est souvent difficile de modéliser les milieux granulaires à l'échelle macroscopique. Les critères classiques de limite d'élasticité (von Mises, Tresca, ...) ne sont, en effet, pas valides pour ce type de matériau. Plusieurs auteurs, présentés ci-dessous, ont ainsi proposé des critères construits dans le cadre de la MMC, visant à prédire la densification ainsi que les surfaces de charge et de rupture des matériaux granulaires [42, 43]. Ces critères sont associés à des modèles élastoplastiques. Souvent, les termes de rupture et de plasticité sont utilisés indifféremment lorsque ces modèles sont mentionnés; et on parle ainsi de "limite de rupture" alors qu'il s'agit d'une formulation élastoplastique associée à une loi d'écou-

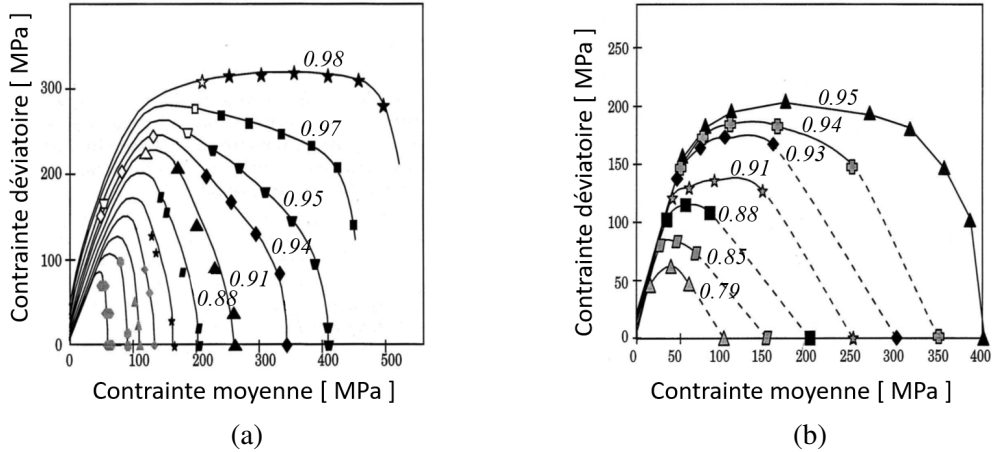


FIGURE 1.12 – Surfaces isodensité associées à différentes densités relatives obtenues par Pavier [41], sur une poudre de fer suivant (a) un essai normalement consolidé (chargement isotrope puis axial à pression constante) et (b) un essai sur-consolidé (chargement isotrope, décharge puis recharge axiale à pression constante).

lement plastique. Cette ambiguïté souligne au passage le flou associé à la notion de rupture pour ce type de matériau.

- Le critère de Mohr-Coulomb prédisant la limite élastique de milieux granulaires isotropes en généralisant la notion de frottement de Coulomb au cas de matériaux granulaires. Il utilise pour cela une relation (équation 1.12) permettant de prédire la limite d'élasticité du milieu granulaire (se produisant lorsque $f(\underline{\sigma}) \geq 0$, où $\underline{\sigma}$ représente le tenseur des contraintes de Cauchy). Cette relation se base sur la contrainte principale maximale σ_{max} , la contrainte principale minimale σ_{min} ainsi que sur deux paramètres : l'angle de frottement interne φ et la cohésion C . Ce critère est une généralisation du critère de Tresca (obtenu pour $\varphi = 0$).

$$f(\underline{\sigma}) = \sigma_{max} - \sigma_{min} - (\sigma_{max} + \sigma_{min})\sin\varphi - 2C\cos\varphi \quad (1.12)$$

- Le critère de Drucker-Prager (équation 1.13), prédisant la limite d'élasticité grâce au premier invariant du tenseur des contraintes I_1 , au deuxième invariant du déviateur du tenseur des contraintes J_2 ainsi qu'à deux paramètres k et α . Ce critère est une généralisation du critère de von Mises (obtenu pour $\alpha = 0$). Les surfaces de rupture prédites par le critère de Mohr-Coulomb ainsi que par Drucker-Prager sont représentées figure 1.13 dans l'espace des contraintes principales.

$$f(\underline{\sigma}) = \sqrt{J_2} - k - \alpha I_1 \quad (1.13)$$

- Le critère empirique de Hoek et Brown, utilisé pour prédire la fracture des roches, définissant la surface de rupture par la relation suivante (équation 1.14), où σ_c correspond à la résistance en compression simple pouvant être déterminée expérimentalement; et s , m et a à trois paramètres pétrographiques. Ce critère est une généralisation du critère de Mohr-Coulomb présenté ci-dessus (retrouvé pour $a = 1$).

$$f(\underline{\sigma}) = \sigma_{max} - \sigma_{min} - \sigma_c \left(m \frac{\sigma_{min}}{\sigma_c} + s \right)^a \quad (1.14)$$

- Le critère empirique parabolique (équation 1.15), permettant de prédire les surfaces de rupture à l'aide des mêmes invariants que ceux utilisés pour la définition du critère de Drucker-Prager et de deux paramètres : la résistance en compression simple R_C et la résistance en traction simple R_T .

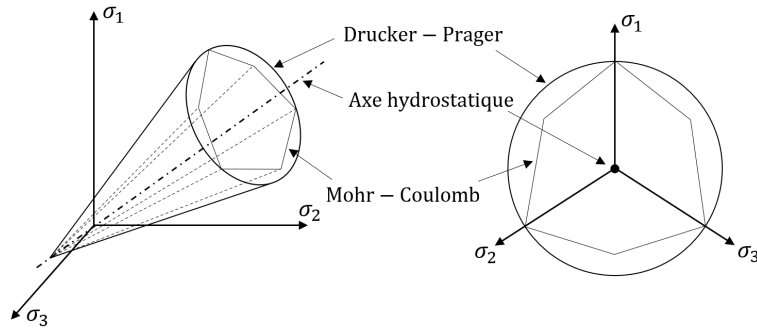


FIGURE 1.13 – Prédiction des surfaces de rupture avec les critères de Mohr-Coulomb et de Drucker-Prager, représentées dans l'espace des contraintes principales et dans le plan déviatoire.

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) = J_2 + \frac{R_C - R_T}{3} I_1 - \frac{R_C R_T}{3} \quad (1.15)$$

Ces différents critères permettent tous une prédiction de la rupture des matériaux granulaires, se produisant pour des chargements fortement déviatoires. D'autres modèles ont ensuite cherché à prédire la consolidation du milieu granulaire survenant lors de la compression des poudres pour des chemins de chargement plus sphériques.

Le critère de Cam-Clay modifié a ainsi été proposé afin de compléter la prédiction des surfaces de charge pour des chargements n'amenant pas à la rupture du matériau. Ce modèle permet de prédire la rupture et la plastification de matériaux granulaires élastoplastiques avec écrouissage isotrope à l'aide d'une surface (de charge et de rupture) elliptique définie par la relation ci-dessous (équation 1.16), avec p et q les contraintes isostatiques et déviatoires respectivement, M la pente de la droite d'état critique dans le plan (p, q) séparant la zone de rupture de la zone ductile et p_c la pression de pré-consolidation permettant de prendre en compte l'écrouissage.

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) = q^2 + M^2 p(p + p_c) \quad (1.16)$$

Des améliorations du modèle de Drucker-Prager (Drucker-Prager Cap introduit par Resende et J.B. Martin [44] et Drucker-Prager Cap modifié [45]) ont également été proposées afin de fermer la surface de rupture à l'aide d'un critère de plasticité écrouissable (figure 1.14).

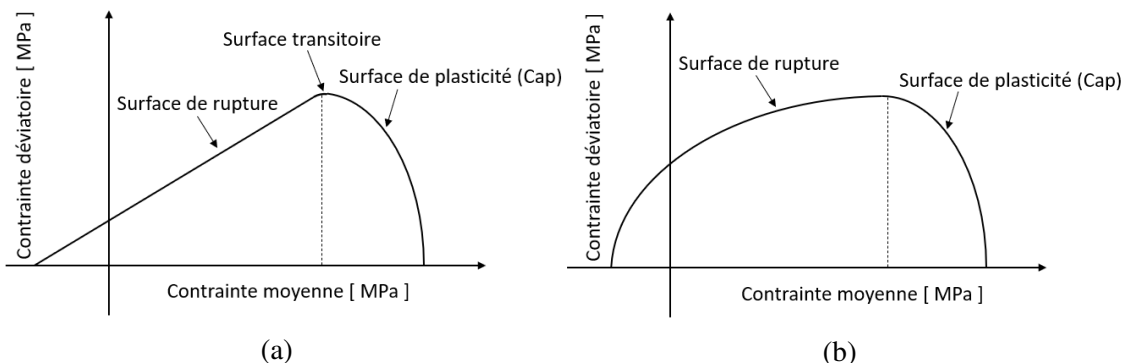


FIGURE 1.14 – Prédiction des surfaces de charge et de rupture avec les critères de (a) Drucker-Prager Cap et (b) Drucker-Prager Cap modifié, représentées dans le plan sphérique/déviatoire.

La prise en compte de l'écrouissage dans ces derniers modèles (par une translation du "Cap") permet d'avoir un lien entre la surface de charge, la densité du matériaux granulaire et l'historique de chargement.

Les différents modèles analytiques présentés ci-dessus correspondent à des modèles isotropes. Un certain nombre de modèles plus complexes ont été proposés, le plus souvent utilisés dans le domaine de la mécanique des sols, afin entre autres de permettre la prise en compte de l'anisotropie. Des avancées de même nature ont été effectuées dans le secteur de la compression des poudres, notamment avec le modèle développé par Brandt et Nilsson [46], permettant la prise en compte de l'anisotropie induite par la compression à froid de poudres métalliques.

1.2.3 Méthode des éléments finis

1.2.3.1 Principe de la méthode

Le développement de ces modèles de comportement basés sur la MMC permet l'utilisation de la méthode des éléments finis (FEM) pour l'étude des matériaux granulaires. La FEM est une technique de calcul numérique permettant la résolution de problèmes multi-physiques complexes, régis par des équations aux dérivées partielles. Cette méthode est principalement utilisée pour la résolution de problèmes de mécanique des structures. Elle a été développée dans les années 1940 par les mathématiciens Hrennikoff [47] et Courant [48]. Depuis, de nombreux auteurs ont contribué à son développement; parmi eux Turner et al. [49], Argyris et Kelsey [50], Zienkiewicz et Cheung [51], Strang et Fix [52]. Le principe fondamental de la FEM est de diviser le domaine de calcul continu en un ensemble discret fini de sous-domaines géométriques simples, appelés éléments, caractérisés par un ensemble de nœuds inter-connectés grâce à une table de connectivité. Cette discrétisation du domaine, appelé maillage, permet de remplacer les équations aux dérivées partielles continues par des équations discrètes, plus faciles à résoudre numériquement. Les grandeurs d'intérêts (déplacement, vitesse, contrainte, température, ...) sont alors calculées par interpolation aux nœuds. Le maillage est une étape clé de la modélisation en éléments finis; un maillage trop grossier ne permettra pas de capturer des variations spatiales des grandeurs d'intérêts, tandis qu'un maillage trop fin augmentera de manière excessive la durée des simulations. Une fois le domaine maillé, le système d'équations discrètes associé à chaque élément est résolu en utilisant les propriétés matériau et les conditions aux limites (CL) associées à l'élément considéré. Dans le cadre d'un problème de mécanique, la méthode énergétique de Rayleigh-Ritz est généralement utilisée. Cette méthode consiste en une minimisation de l'énergie potentielle du système, définie comme la différence entre l'énergie de déformation et le travail des forces volumiques et surfaciques. Cette minimisation amène à l'équation 1.17 dans le cadre d'un problème linéaire, avec $\underline{\underline{K}}$ la matrice de rigidité du système, \underline{U} le vecteur donnant les différents degrés de liberté des nœuds et \underline{F} le vecteur de charge appliqué aux nœuds associés au système.

$$\underline{F} = \underline{\underline{K}} \cdot \underline{U} \quad (1.17)$$

Le principe de la simulation en éléments finis est illustré figure 1.15 : les matrices de rigidité $\underline{\underline{K}}^e$ et vecteurs de charge \underline{F}^e associés à chaque élément e sont tout d'abord calculés, à l'aide de la connaissance de la densité d'énergie de déformation, qui est fonction de la déformation et des propriétés matériau, ainsi que des charges volumiques et surfaciques appliquées à l'élément. Ces matrices sont ensuite assemblées grâce à la table de connectivité afin d'obtenir $\underline{\underline{K}}$ et \underline{F} . Le vecteur \underline{U} est alors déterminé (équation 1.17) par inversion de la matrice de rigidité, grâce à la connaissance des CL du système modélisé. Les efforts internes $\underline{f}^e = \underline{\underline{k}}^e \cdot \underline{u}^e$ sont enfin déterminés dans les repères locaux associés aux différents éléments et les différentes quantités dérivées de \underline{U} (contraintes, déformations, énergies, ...) sont calculées.

De nombreux logiciels commerciaux (e.g. ANSYS, Abaqus, COMSOL) et libres de droit (e.g. FEniCS) permettent la résolution de problèmes en éléments finis. Ces logiciels intègrent le plus souvent des outils de conception assistée par ordinateur (CAO), permettant ainsi la modélisation de géométries complexes. La méthode des éléments finis permet donc de résoudre de manière statique mais également dynamique des problèmes fortement non-linéaires. Elle permet l'étude de

matériaux non-homogènes et est facilement adaptable aux problèmes multi-physiques.

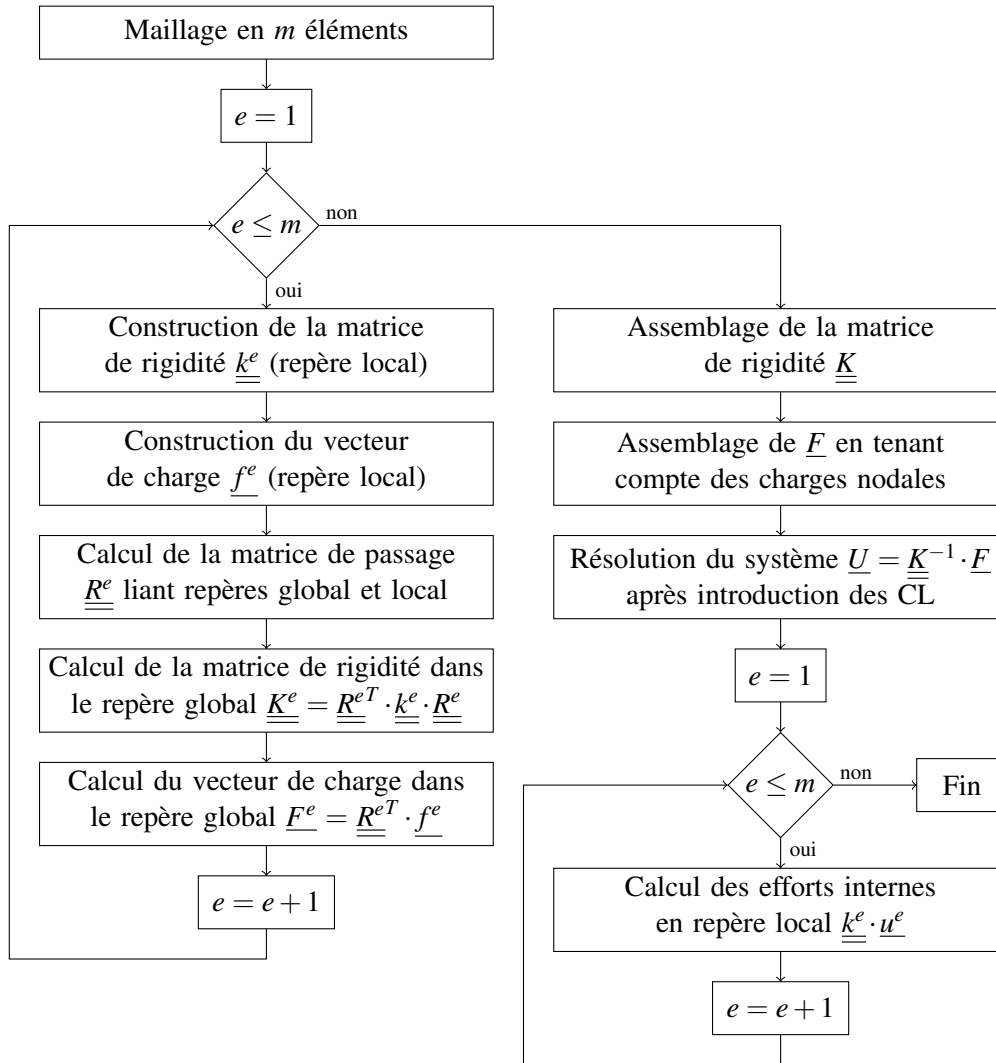


FIGURE 1.15 – Illustration du principe de la simulation en éléments finis dans le cas d'un problème statique. Schéma inspiré des travaux de thèse de Teil [6].

1.2.3.2 Limites de la méthode

La FEM nécessite toutefois une discrétisation suffisamment fine pour obtenir des résultats précis, pouvant être coûteuse en termes de puissance de calcul et de ressources informatiques. Elle nécessite également l'existence de lois physiques adaptées au formalisme des milieux continus régissant le comportement des matériaux constituant le modèle numérique. La méthode des éléments finis rencontrera donc des difficultés pour la modélisation de matériaux discontinus, comme les matériaux granulaires. Les différents modèles présentés section 1.2 se basent sur la MMC, en faisant l'hypothèse de continuité du matériau granulaire. S'ils ne permettent pas une étude à l'échelle particulière, ils ont toutefois l'avantage de pouvoir être utilisés dans le cadre de la modélisation en éléments finis. Les modèles présentés permettent une prédiction précise de la densification et de la plastification des milieux granulaires, prenant notamment en compte les phénomènes de cohésion et d'écroutissage. Ils rencontrent toutefois des difficultés quant aux prédictions de la rupture. Les difficultés expérimentales suivant des chemins de chargement fortement déviatoires, responsables des phénomènes de fissuration, rendent compliqué le développement de modèles plus précis et limitent par la même occasion les prédictions offertes par la FEM.

1.3 Modélisation discrète des milieux granulaires confinés

Pour pallier ce manque et permettre une compréhension fine des mécanismes de déformation à l'échelle particulaire, des méthodes numériques de modélisation micromécanique discrète ont ensuite vu le jour. Ces approches, basées sur la modélisation des particules individuelles, sont intrinsèquement adaptées aux matériaux granulaires. Elles ne cherchent cette fois plus à considérer le milieu granulaire comme un continuum mais, de manière plus intuitive, comme un ensemble de corps solides en interactions réciproques [5].

1.3.1 Méthode des éléments discrets

1.3.1.1 Principe de la méthode

Suite aux travaux pionniers de Fischmeister et Artz [53], Fleck et al. [54-56] et Storåkers et al. [57, 58], la méthode des éléments discrets (DEM) introduite par Cundall et Strack [2] s'est établie comme la méthode de modélisation micromécanique la plus couramment utilisée dans le domaine de la compression des poudres. Cette méthode propose une représentation de la matière comme un ensemble de particules élémentaires rigides pouvant interagir entre elles. Le mouvement de chaque particule i est régi par les équations de la dynamique de Newton (équation 1.18), avec m_i la masse de la particule, \underline{x}_i son vecteur position et $\sum \underline{F}_i$ la résultante des forces extérieures lui étant appliquée.

$$m_i \frac{d^2 \underline{x}_i}{dt^2} = \sum \underline{F}_i \quad (1.18)$$

Les forces extérieures \underline{F}_i appliquées à la particule i peuvent être des forces de champ (telles que la gravité), mais également des forces induites par les contacts avec les autres particules constitutives du milieu granulaire. Des interactions complexes entre particules, comprenant du frottement, de la cohésion, ou d'autres phénomènes multi-physiques, peuvent ainsi être considérées grâce à l'utilisation de lois de contact appropriées. Plusieurs auteurs ont porté leur attention sur la description analytique de ces lois de contact, reliant les forces de contact au déplacement relatif des particules. Un état de l'art détaillé portant sur ce sujet est proposé sous-section 3.2.1.

Cette méthode se situe donc à la frontière entre la dynamique des solides et la mécanique du contact [5]. Le principe itératif de la simulation en éléments discrets est illustré figure 1.16. Il est courant [59] de distinguer deux différentes manières de traiter les interactions entre les particules en éléments discrets :

- les méthodes *Smooth*, modélisant les interactions entre particules à l'aide de fonctions mathématiques continues. Ces méthodes, développées par Cundall et Strack [2], permettent de lisser les forces appliquées aux particules, rendant ainsi les simulations plus stables. Elles peuvent toutefois introduire des artefacts dans la simulation en raison de ce lissage des interactions de contact ;
- les méthodes *non-Smooth*, modélisant de manière discrète (et donc discontinue) les interactions entre particules. Ces méthodes *non-Smooth* fournissent une représentation plus précise des interactions, mais sont plus lentes et peuvent conduire à des oscillations numériques du fait de leurs discontinuités. Elles ont principalement été développées par Moreau [60] et sont souvent utilisées dans les cas où la précision est primordiale, tels que dans la simulation d'impacts.

Dans les applications les plus élémentaires de la DEM, chaque nœud de calcul représente une particule sphérique rigide. Une interpénétration des particules, contrôlée par des relations analytiques, est autorisée afin de déterminer les efforts de contact entre les particules du système (figure 1.17). Cette approche est bien adaptée au cadre des petites déformations dans lequel la forme des particules individuelles peut être considérée comme restant inchangée. La DEM est ainsi

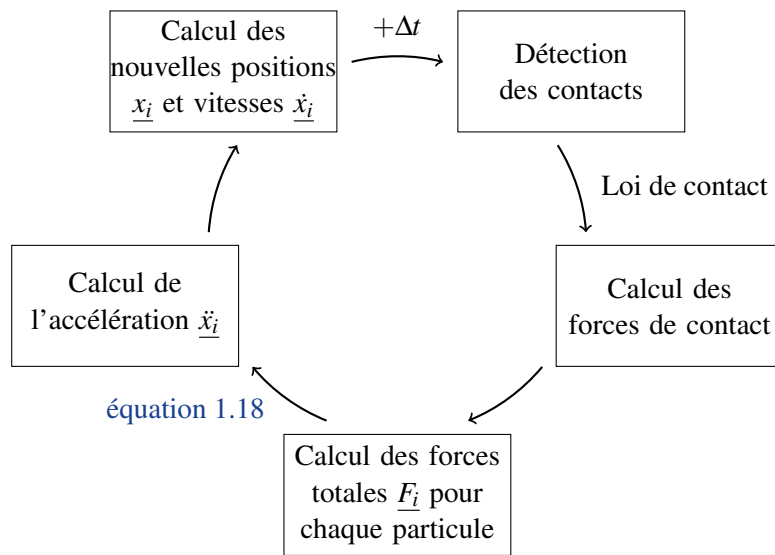


FIGURE 1.16 – Illustration du principe de la simulation en éléments discrets. Schéma inspiré des travaux de thèse de Teil [6].

particulièrement idoine pour l'étude d'écoulements granulaires où la déformation des particules est négligeable [11, 61, 62]. Elle peut également être adaptée à l'étude d'ensembles constitués de particules à géométrie plus complexe.

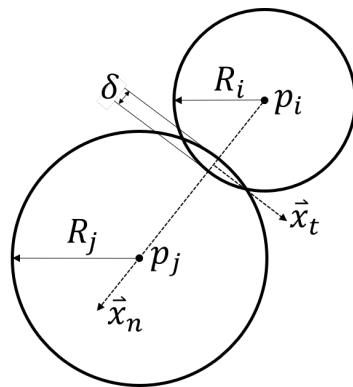


FIGURE 1.17 – Illustration du principe de gestion des contacts inter-particules en éléments discrets. Les forces de contact sont calculées à partir de l'interpénétration des éléments discrets δ et de modèles de contact analytiques.

En dépit du caractère indéformable des éléments discrets, il est toutefois possible de mimer la déformation des particules par l'intermédiaire de lois de contact adaptées. Plusieurs auteurs ont ainsi développé des études de la densification des milieux granulaires incluant la déformabilité viscoplastique des particules, le plus souvent basées sur la théorie du contact de Storåkers et al. [57] décrite sous-section 3.2.1. Parmi eux figurent Redanz et al. [63], Heyliger et McMeeking [64], Martin et al. [65-69], Sheng et al. [70], Skrinjar et Larsson [71]. Ces études ont permis la prédiction numérique des surfaces de charge associées à des poudres métalliques [58, 64, 66] et ont contribué au développement de nouveaux modèles analytiques [58, 66]. La figure 1.18 présente une comparaison entre les résultats DEM obtenus par Martin [68] et Heyliger et McMeeking [64] en comparaison avec des résultats antérieurs issus de modèles analytiques basés sur des champs

de déplacement affines.⁴

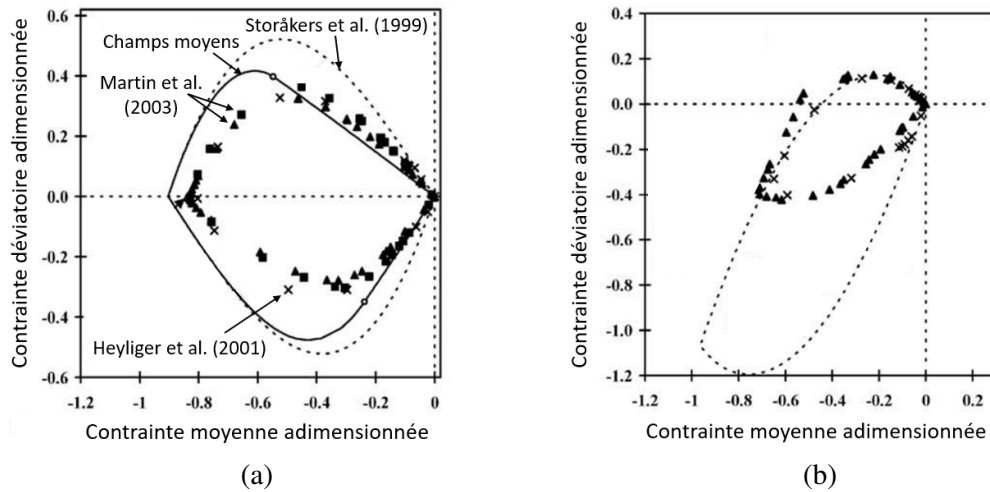


FIGURE 1.18 – Comparaison entre les surfaces de charge obtenues grâce à la DEM par Martin [66] et Heyliger et McMeeking [64] et grâce aux modèles analytiques de champs moyens et de Storåkers et al. [58], pour une densité relative de 0.8 et des chargements (a) isotropes et (b) en matrice. Figure issue des travaux de Martin et al. [68].

1.3.1.2 Limites de la méthode

La DEM rencontre toutefois des difficultés dans le cadre des grandes transformations. Pour des densités élevées (≥ 0.85), les interactions entre les différents contacts d'une même particule ne peuvent plus être considérés comme négligeables et les modèles de contact (e.g. Storåkers et al. [57]) utilisés dans le cadre de la DEM par les auteurs susnommés atteignent leurs limites [66]. La figure 1.19 illustre ces limites de la DEM à haute densité relative, en comparant les prédictions offertes par la DEM [66] et les modèles analytiques de champs moyens [66] et de Storåkers et al. [58] aux résultats expérimentaux de James [72] portant sur l'étude de la densification de poudres de cuivre.

Des études plus récentes, réalisées par Jérier et al. [73], Harthong [35, 74], Persson et Frenning [75] ou encore Gonzalez et Cuitiño [76], ont permis d'atteindre des densités relatives supérieures à 0.9, grâce à l'utilisation d'un paramètre local de densité relative dans la relation force-déplacement, permettant la prise en compte des effets d'incompressibilité régissant le comportement des milieux granulaires à haute densité relative.

Bien que ces applications plus avancées de la DEM permettent la prise en compte de phénomènes d'interactions complexes, la DEM reste par essence peu adaptée pour décrire les changements de géométrie des particules. Une discrétisation à une échelle inférieure à celle de la particule devient nécessaire dans le cadre des grandes transformations afin de permettre la prise en compte de manière réaliste de la déformation des particules. En particulier, le caractère indéformable des éléments discrets empêche la prise en compte des changements de géométrie des particules et altère donc la cinématique des particules à haute densité relative. Les prédictions offertes par la DEM restent ainsi limitées quant à la modélisation de matériaux granulaires constitués de particules ductiles dans le cadre des grandes transformations. La FEM est pour cela plus appropriée.

4. Ici, les auteurs ont adopté la convention classique de la MMC, définissant un état de contrainte positif en traction.

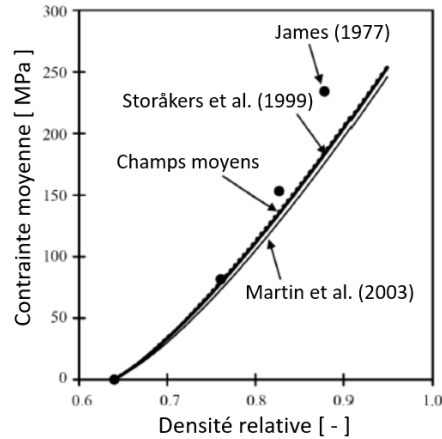


FIGURE 1.19 – Limites des méthodes utilisées par Martin et al. [66] et Storåkers et al. [58] par rapport aux résultats expérimentaux de James [72] à haute densité relative. Figure issue des travaux de Martin et al. [66].

1.3.2 Méthode des éléments finis multi-particules

1.3.2.1 Principe de la méthode

Afin de remédier à cette limite de la DEM, une nouvelle méthode de modélisation micromécanique appelée méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM) a été introduite par Ransing, Gethin et al. [3, 77]. Cette méthode correspond à un couplage entre la FEM et la DEM. Les particules individuelles sont discrétisées à l'aide d'un maillage éléments finis de sorte que leurs déformations soient entièrement prises en compte. Des modèles matériaux basés sur la MMC sont pour cela utilisés afin de modéliser le comportement des particules constitutives du milieu granulaire. Les interactions de contact entre particules sont quant à elles gérées comme des problèmes aux limites en éléments finis entre les différents solides maillés. La figure 1.20 illustre la différence de principe entre la DEM et la MPFEM : les éléments discrets sont indéformables et les contacts sont gérés à l'aide de lois de contact inter-particules ; tandis que les éléments finis sont déformables et que la gestion des contacts est effectuée à l'aide de lois de contact locales exprimées en chaque nœud du maillage éléments finis.

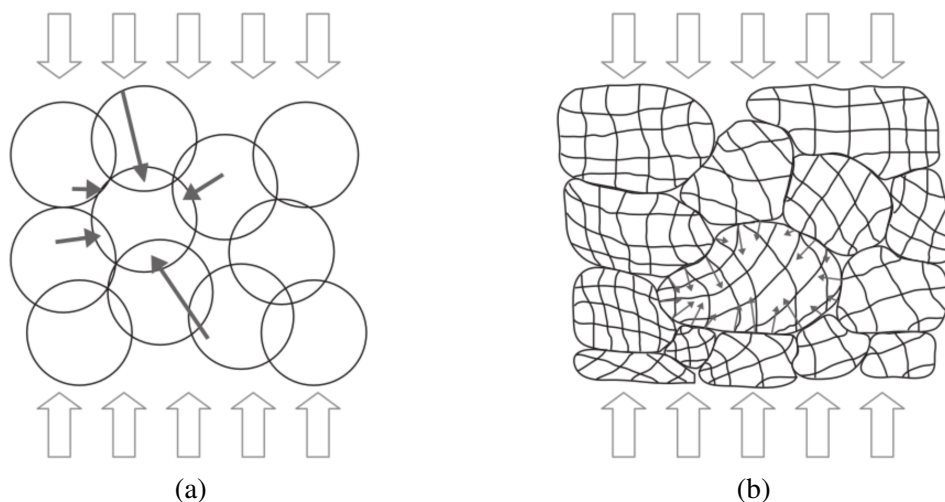


FIGURE 1.20 – Illustration des méthodes (a) DEM et (b) MPFEM. Schéma issu des travaux de Harthong [35].

Cette méthode permet donc une compréhension très fine de la déformation du milieu granulaire, prenant à la fois en compte le déplacement des particules, leurs déformations, ainsi que les interactions entre particules. Elle permet d'avoir accès aux champs de contrainte et de déformation locaux au sein du milieu granulaire, et ce jusqu'à de très grandes déformations. Elle est donc particulièrement adaptée à la modélisation de milieux granulaires constitués de particules ductiles. Cette méthode étant construite sur la base des éléments finis, elle permet la modélisation de géométries, matériaux, interactions complexes.

D'autres méthodes numériques permettant une discrétisation à une échelle inférieure à la taille des particules (et donc une prise en compte de leur déformation) ont également été développées. Cantor et al. [78], Cardenas-Barrantes et al. [79, 80] et Barés et al. [81] ont pour cela proposé un couplage entre la dynamique des contacts et la FEM. Nezamabadi et al. [82-85] et Vu et al. [86] ont quant à eux utilisé la méthode des points matériels en substitut à la FEM pour permettre la prise en compte de la déformation des particules. Par la suite, seule la MPFEM utilisée dans le présent projet sera détaillée.

1.3.2.2 Développement et utilisation de la MPFEM

Ransing, Gethin et al. [3, 77] ont introduit la MPFEM, dans le cas de modélisations bidimensionnelles (2D), pour l'étude de la compression en matrice fermée d'assemblages cubiques simples constitués d'au maximum 150 particules circulaires élastoplastiques, dans une enceinte également maillée en éléments finis (figure 1.21). Une loi de contact basée sur un système de ressorts amortis a pour cela été utilisée. En comparant les résultats obtenus (en termes de relation force-déplacement du poinçon supérieur lors de la compression) à ceux d'une analyse éléments finis basée sur le modèle continu de Gurson⁵ [87], Gethin et al. [3] ont conclu sur les possibilités prometteuses de la MPFEM en termes de considérations microstructurales et de prédictions mécaniques jusqu'à hautes densités relatives. Ils ont ensuite appliqué cette méthode à la simulation de la compression de mélanges de poudres composées de particules ductiles et fragiles [4]. L'étude de chargements uniaxiaux en matrice rigide et de chargements biaxiaux ont permis l'exploration de l'impact des paramètres matériaux des particules constitutives du milieu granulaire. Cette étude a révélé, en accord avec leurs observations expérimentales réalisées sur des poudres de fer, que la présence de particules ductiles permettait de prévenir le phénomène de fissuration des particules fragiles. Enfin, Gethin et al. [88] ont appliqué cette méthode au cas d'assemblages aléatoires constitués de particules de formes irrégulières. Leur algorithme de détection des contacts a alors été amélioré, en adaptant notamment au cadre de la MPFEM la détection évoluée des voisinages, déjà utilisée dans les simulations DEM⁶. Une analyse des déformations à l'échelle particulaire a été effectuée et une méthode d'homogénéisation, basée sur la théorie des champs moyens, a été introduite afin de déterminer les champs de contrainte et de densité au sein du système modélisé.

Le logiciel d'éléments finis commercial *Abaqus* a ensuite été utilisé par Procopio et Zavaliangos [89] pour la modélisation multi-particules 2D d'assemblages de 800 particules circulaires mono-disperses, comprimées à l'aide de plans rigides. Différents chemins de chargement multiaxiaux ont été investigués pour l'étude numérique de l'évolution des surfaces de charge (isodensités) au cours de la compression du milieu granulaire, ce pour différents niveaux de frictions inter-particulaires (figure 1.22). Procopio et Zavaliangos ont, entre autres, observé une réponse mécanique associée au milieu granulaire moins rigide que celle prédite par les modélisations en éléments discrets de Redanz et Fleck [63]. Ces observations illustrent la limite de la DEM dans la gestion non-affine des contacts. En plus de permettre l'atteinte de densités relatives plus élevées,

5. Modèle matériau, basé sur la MMC, particulièrement adapté aux matériaux poreux ductiles.

6. Cette méthode consiste à réduire le nombre de particules pouvant potentiellement être en contact. Elle considère que deux particules peuvent potentiellement entrer en contact à une itération t donnée que si ces deux particules étaient, à l'itération $t - dt$, séparées d'une distance inférieure à une certaine distance critique. Cette méthode permet de réduire drastiquement le temps de calcul nécessaire aux calculs des forces de contact.

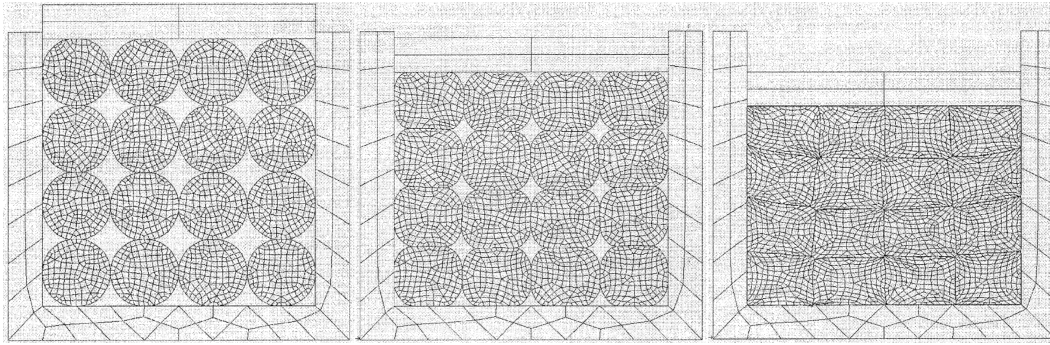


FIGURE 1.21 – Compression d'un assemblage cubique simple de 16 particules maillées. Simulation réalisée par Gethin et al. [3].

Procopio et Zavaliangos ont donc montré que la MPFEM permet de fournir suffisamment de degrés de liberté au modèle numérique pour permettre la gestion des interactions entre les contacts d'une même particule. Leurs observations microstructurales ont montré que cette méthode permet de capturer des mécanismes de déformation à faible densité relative, lors de la formation de chaînes de contrainte, tels que le décalage des zones d'application de certains contacts, impactant le comportement du milieu granulaire une fois densifié.

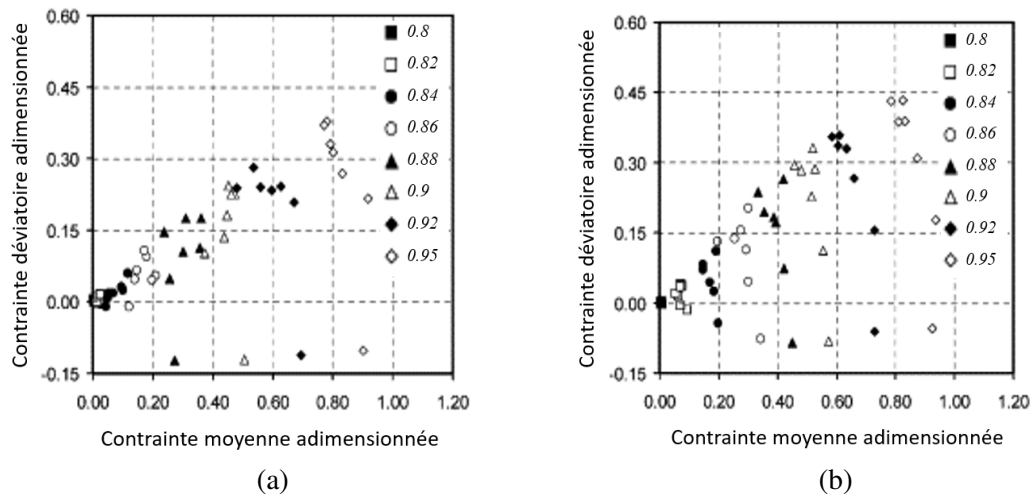


FIGURE 1.22 – Évolution des surfaces de charge avec la densité, pour un coefficient de frottement de Coulomb (a) nul et (b) égal à 0.1 [89].

Les avancées technologiques en termes de puissance de calcul ont ensuite permis le développement et l'utilisation de la MPFEM dans le cadre d'assemblages tridimensionnels (3D). Chen et al. [90] ont validé le principe de la MPFEM en 3D à l'échelle particulaire, à l'aide d'expériences réalisées sur des billes de plomb. Ils ont pour cela tout d'abord caractérisé mécaniquement le plomb utilisé afin d'introduire une loi de comportement calibrée expérimentalement dans le logiciel éléments finis *Abaqus*. Une particule isolée ainsi qu'un assemblage cubique centré ont ensuite été comprimés expérimentalement et numériquement (jusqu'à une densité relative de 0.97). La comparaison entre les résultats expérimentaux et les prédictions numériques présentée figure 1.23 a révélé une excellente correspondance en termes de forces appliquées et de microstructures. Cette étude a également soulevé l'importance de la modélisation des interactions de contact et l'impact du frottement sur les prédictions MPFEM. Chen [91] a ensuite effectué cette même comparaison numérique/expérimentale sur un assemblage polydisperse constitué de 150 particules, en veillant à la similarité géométrique des échantillons expérimentaux et numériques initiaux.

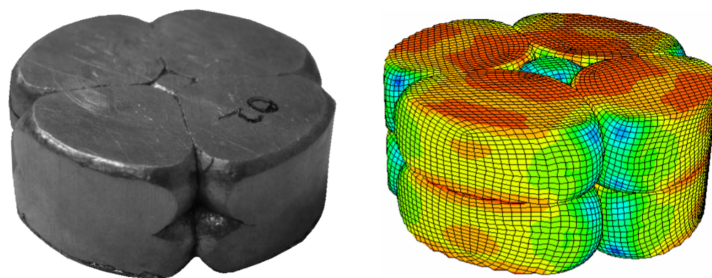


FIGURE 1.23 – Compression expérimentale et numérique d'un assemblage cubique centré de 8 particules de plomb. Simulation réalisée par Chen et al. [90].

Frenning [92] a ensuite contribué au développement de la modélisation en éléments finis multi-particules d'assemblages 3D ; en proposant, entre autres, un schéma de résolution explicite de type prédicteur/correcteur, un algorithme de détection des contacts à deux étapes de type maître/esclave intervertis ; ainsi qu'une parallélisation directe des calculs. Ces différentes techniques numériques ont permis l'analyse numérique d'assemblages 3D allant jusqu'à 1000 particules hyperélastiques. Frenning a également suggéré l'importance de la technique numérique de mise à l'échelle de la masse (*Mass scaling*)⁷, notamment pour la modélisation de particules plus rigides. Il a ensuite [93] utilisé son modèle numérique dans l'optique de relier les propriétés micromécaniques des particules aux comportements mésoscopiques de l'assemblage de 1000 particules modélisé, décrit à l'aide de l'équation de Kawakita permettant de relier la déformation du milieu granulaire à la pression appliquée dans le cadre de la compression de poudres.

Différents auteurs ont par la suite contribué au développement de la MPFEM, ainsi qu'à l'étude de milieux granulaires à l'aide de cette technique numérique. Lee et al. [94] l'ont utilisée pour l'étude de l'impact de la taille des particules et de la vitesse de compression sur la densification de poudres d'aluminium. Zhang [95] a, quant à lui, étudié la compression en matrice d'assemblages 2D de mélanges de particules ductiles et rigides. Il a, entre autres, montré que la contrainte de compression augmente avec le frottement inter-particules et avec la fraction volumique de particules rigides, ce qu'il explique par le fait que le frottement ainsi que la présence de particules rigides entravent le réagencement particulaire en début de compression, venant ainsi rigidifier le système granulaire.

Harthong et al. [96] ont proposé une étude traitant de la relation entre les propriétés mésoscopiques de l'assemblage modélisé et les évolutions microstructurales, ce pour des échantillons numériques de petites tailles (15 particules élasto-plastiques). Ils ont pour cela comparé l'évolution de la microstructure à l'évolution des surfaces de charge présentées figure 1.24, obtenues pour des chargements jusqu'à de hautes densités relatives. Ils ont mis en évidence l'existence de mécanismes d'écrouissage isotrope (augmentation de la taille des surfaces de charge avec la densité) et rotatif (rotation des surfaces de charge). L'asymétrie de la forme des surfaces de charge a pu être reliée à l'anisotropie structurelle du milieu granulaire modélisé. Par ailleurs, l'écrouissage rotationnel a été relié à une réorganisation des particules et de l'orientation des contacts au sein

7. Cette technique correspondant à une augmentation artificielle de la masse des particules dans la simulation numérique, ayant pour objectif d'augmenter le pas de temps critique de la simulation et donc de réduire la durée de la simulation. La forte non-linéarité induite par les conditions de contact complexes dans le cas de la modélisation aux éléments finis multi-particules impose en effet un schéma de résolution numérique explicite. Ce schéma de résolution est instable au delà d'un certain pas de temps critique augmentant avec la masse du système. Dans le cas de simulations quasi-statiques pour lesquelles le comportement des matériaux constitutifs est indépendant de la vitesse, une augmentation de la masse du système ne changera pas sa réponse et permettra une réduction significative du temps de calcul. Il reste toutefois nécessaire de s'assurer que les changements de masse n'induisent que des augmentations des forces d'inertie suffisamment faibles pour rester dans l'hypothèse quasi-statique.

de l'assemblage lors des changements de direction de chargement. Il a également été observé que l'importance relative de l'écroutissage isotrope et rotationnel dépendait de la densité relative du milieu granulaire, et donc de la capacité des grains à se réorganiser.

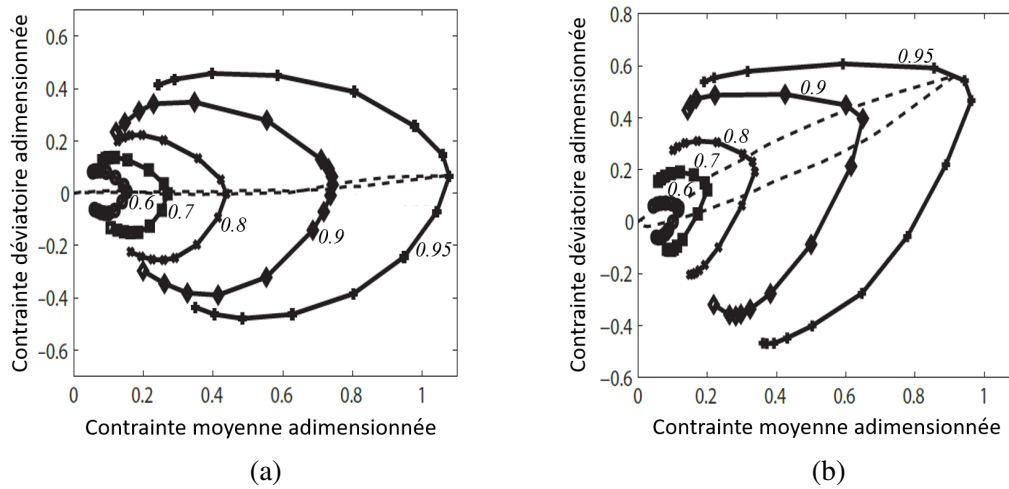


FIGURE 1.24 – Évolution des surfaces de charge avec la densité pour un chargement (a) monotone isotrope et (b) en matrice. [96].

De manière assez similaire, Schmidt et al. [97-99] ont également étudié la compression de poudres élastoplastiques en cherchant à prédire les surfaces de charge à l'aide d'une méthode d'homogénéisation numérique basée sur la théorie de l'homogénéisation [100, 101] en combinaison avec la méthode des éléments finis [99]. Ils ont, entre autres, constaté [97] un écart entre les surfaces de charge prédites à l'aide de la MPFEM et celles des modèles en éléments discrets et continus couramment utilisés dans le domaine de la compression de poudres (figure 1.25). Schmidt

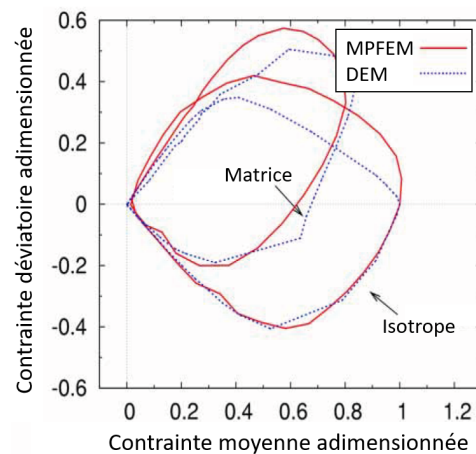


FIGURE 1.25 – Comparaison entre les surfaces de charge obtenues par Schmidt [98] à l'aide de la MPFEM et de la DEM, pour des chargements isotropes et en matrice.

et al. [98] ont également mis en évidence le développement d'une anisotropie induite pas le chargement. Dans leurs études, Schmidt et al. ont introduit des conditions aux limites périodiques (CLP) adaptées à la MPFEM dans l'optique de réduire les effets de bords et la taille requise au volume élémentaire représentatif (VER) pour obtenir des résultats homogénéisés représentatifs du milieu granulaire. Comme expliqué en détail section 2.5, ces conditions aux limites permettent de réduire drastiquement la taille des échantillons modélisés. Elles nécessitent toutefois l'utilisation d'un grand nombre d'équations de couplage venant augmenter le coût numérique. C'est sous ces

observations que Loidolt et al. [102, 103] ont récemment proposé des conditions aux limites périodiques approximatives, également décrites section 2.5, permettant de réduire le nombre d'équations de couplage et par là même le coût des simulations. Ils ont également introduit une loi de contact adhésif, à l'aide d'une contrainte de cohésion attractive dépendant linéairement de la distance entre les surfaces en contact. La prise en compte de l'adhésion leur a permis l'investigation des surfaces de charge pour des chemins de chargement fortement déviatoires (figure 1.26).

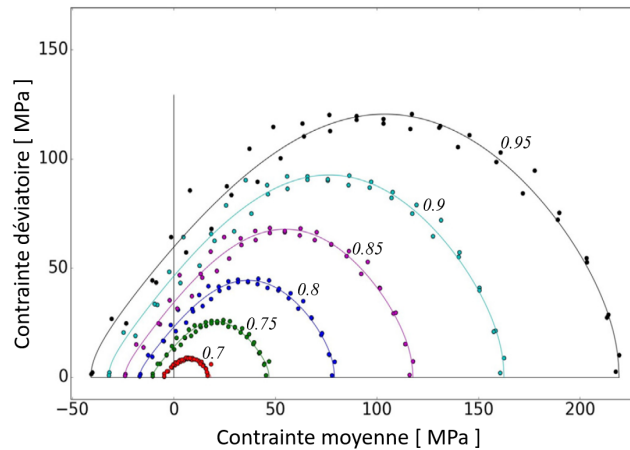


FIGURE 1.26 – Surfaces de charge obtenues par Loidolt et al. [102] en fonction de la densité pour un chargement monotone isotrope et une contrainte d'adhésion constante.

Gustafsson et al. [104] ont utilisé cette méthode pour prédire la fracturation possible d'assemblages constitués de particules en minerai de fer de tailles, formes et propriétés matériaux statistiquement distribuées. Güner et al. se sont eux intéressés à la modélisation de poudres de cuivre, en étudiant l'impact du coefficient de frottement [105], ainsi que l'impact de la température et de la vitesse de déformation [106], sur les prédictions MPFEM en termes de distribution de contrainte et de profil de déformation. Abdelmoula et al. [36] se sont ensuite intéressés à l'écoulement plastique et à l'étude de l'unicité de la direction d'écoulement plastique pour des matériaux granulaires constitués de particules ductiles. Ils ont montré l'unicité de la direction d'écoulement loin du point de chargement et la perte d'unicité proche de ce point. Plus récemment, Schmidt et al. [107] se sont également intéressés à l'écoulement plastique en utilisant leur modèle basé sur des conditions aux limites entièrement périodiques.

Teil [6] a quand à lui cherché à introduire au sein d'un modèle éléments finis des topologies réalistes de particules, obtenues à l'aide de microtomographies à rayon X (RX). Des essais de compression triaxiale in situ ont été effectués dans l'optique d'obtenir l'évolution microstructurale du milieu granulaire au cours de la compression. Les particules ont ensuite été identifiées individuellement par analyse d'image 3D, maillées, puis introduite dans le modèle MPFEM tel que présenté figure 1.27. Le déplacement calculé par la corrélation de volumes au niveau des particules périphériques de l'échantillon en compression in situ a été imposé à ces mêmes particules modélisées en éléments finis pour l'application des conditions aux limites. Une technique d'homogénéisation du champ de contrainte et de déformation a ensuite été développée par Teil afin de déterminer les propriétés mésoscopiques associées au milieu granulaire. Cette méthode, qui se base sur une minimisation en moindres carrés pour le calcul des déformations et sur la formule de Love-Weber [108, 109] pour le calcul des contraintes, est utilisée dans cette thèse et décrite en détail section 2.3.

L'équipe de recherche de l'université du Nord-Est de Shenyang a utilisé la MPFEM pour l'étude de différents types de poudres : Huang et al. [110] ont étudié à l'aide de simulations 2D la compression de poudres composites binaires Al/SiC , ce pour différents rapports granulométriques et différentes compositions. Zou et al. [111] ont étudié en 3D la compression isostatique à chaud

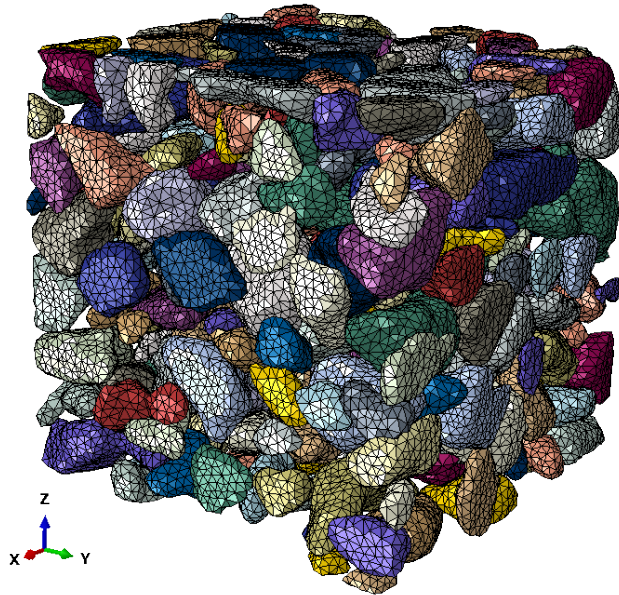


FIGURE 1.27 – Assemblage initial de 253 particules obtenu par microtomographies RX, incorporées par analyse d’image 3D au code éléments finis. Simulation réalisée par Teil [6].

en matrice de poudres de tungstène, en s’intéressant, entre autres, aux effets de la pression, de la température et du rapport granulométrique sur la densification. Wang et al. [112] se sont intéressés à ce même procédé pour l’étude de poudres composites $TiC - 316L$. Ils ont montré que le processus de compression à chaud permettait de réduire la pression de compression, mais également la concentration de contrainte au sein des assemblages compactés. Li et al. [113] se sont eux penchés sur la compression isostatique à chaud de poudres de $Ti6Al4V$ à l’aide d’études 2D.

Demirtas et Klinzing [114] se sont enfin intéressés à la compression de particules creuses, couramment rencontrées dans l’industrie pharmaceutique. Ils ont pour cela proposé une étude MPFEM 3D modélisant des particules creuses, et ont étudié numériquement et expérimentalement l’impact de l’épaisseur des parois des particules. Ils ont, entre autres, conclu sur l’impact de l’épaisseur des parois sur le comportement en compression des poudres étudiées.

Des développements analogues à ceux de la MPFEM ont été réalisés dans le cadre de la modélisation numérique de matériaux composites à renforts fibreux tissés, parmi eux Gatouillat et al. [115], Nguyen et al. [116], Charmetant et al. [117]. Ces études se basent sur une méthodologie similaire à celle utilisée dans cette thèse, en s’intéressant à la compression d’un milieu divisé discrétisé.

1.3.2.3 Limites de la méthode

L’inconvénient principal de la MPFEM étant la puissance de calcul requise, son application reste aujourd’hui limitée au cadre académique pour la simulation de petits échantillons (jusqu’à des échantillons 3D constitués d’un millier de particules). Les avancées technologiques récentes en matière de puissance de calcul et de mémoire numérique et ces nombreux avantages sur les approches classiques vouent la MPFEM à être de plus en plus utilisée dans le futur pour l’analyse de la compression de milieux granulaires.

Comme illustré plus haut, la MPFEM nécessite l’utilisation de géométries, lois de comportement, lois de contact, conditions aux limites très précises pour garantir la validité des prédictions numériques. Bien loin d’être une limite de la méthode, cette complexité peut toutefois entraîner des difficultés dans la modélisation de milieux granulaires.

1.4 Problèmes liés à la rupture dans les milieux granulaires confinés

Les différents auteurs cités sous-section 1.3.2 (à l'exception de Loidolt et al. [102, 103]) ont développé la MPFEM en utilisant des lois de contact non-adhésif associées à des lois de frottement de type Coulomb. Cependant, en pratique, la cohésion des pièces obtenues par compression de poudre est une caractéristique essentielle, directement liée au développement de l'adhésion aux contacts entre les particules. La prise en compte de ces forces d'adhésion devient primordiale pour la prédiction numérique de phénomènes de rupture liés à des chargements fortement déviatoires.

Comme il sera détaillé section 3.2, un grand nombre d'auteurs [57, 58, 118-128] a cherché à introduire des modèles de contact adhésif dans des simulations DEM. Ces modèles, souvent basés sur des énergies de surface, permettent de relier la force normale de contact entre deux éléments discrets à la distance les séparant. Le problème devient différent dans le cadre des éléments finis, nécessitant une description locale (en chaque nœud) du contact.

Des lois de contact adhésif ont donc été introduites dans les modèles éléments finis par Olsson et Larsson [128] et plus récemment dans les simulations MPFEM par Loidolt et al. [102]. Ces lois permettent le calcul des vecteurs contraintes exprimés en chaque nœud de surface du maillage éléments finis : en utilisant une description multi-linéaire du problème de contact, la composante normale de chaque vecteur contrainte est reliée à la distance de séparation numérique entre les surfaces en contact et à un paramètre correspondant à une contrainte d'adhésion. Plus de détails à ce sujet seront donnés au chapitre 3.

Loidolt et al. [102] ont utilisé cette loi de contact sur des assemblages de particules pour la prédiction des surfaces de rupture sous chargement fortement déviatoire. Ils ont, entre autres, réalisé une étude portant sur l'influence des différents paramètres de leur modèle de contact et ont proposé un modèle analytique permettant la prédiction des surfaces de charge spécifiques à ce type de matériau (figure 1.26). Le développement d'un nouveau modèle de contact adhésif, différent de celui proposé par Olsson et Larsson [128] et utilisé dans le cadre de la MPFEM par Loidolt et al. [102], est proposé dans cette thèse (chapitre 3) pour des raisons qui transparaîtront plus tard. Ce modèle servira de base pour l'étude de la plasticité et de l'endommagement des milieux granulaires constitués de particules ductiles (chapitre 4). Avant cela, dans l'optique d'obtenir des résultats mésoscopiques représentatifs du milieu granulaire, et ce pour un nombre de particules restant limité, un intérêt tout particulier devra être apporté à l'application des conditions aux limites et à leur impact. Le chapitre 2 est consacré à cette problématique.

2

Influence des conditions aux limites sur la modélisation MPFEM

Ce chapitre présente une étude de l'impact des conditions aux limites sur la modélisation en éléments finis multi-particules, en termes de temps de calcul et de taille d'échantillons numériques requise pour obtenir des résultats stabilisés. Ces résultats ont fait l'objet d'une publication dans la revue Powder Technology [129].

Sommaire

2.1	Introduction	36
2.2	Protocole de la simulation numérique	38
2.2.1	Génération d'un milieu granulaire idéalisé	38
2.2.2	Modèle numérique	39
2.3	Calcul des grandeurs mésoscopiques	42
2.3.1	Détermination du tenseur des déformations de Hencky mésoscopique d'un milieu granulaire par un ajustement aux moindres carrés	42
2.3.2	Détermination de la densité d'un milieu granulaire	42
2.3.3	Détermination du tenseur des contraintes mésoscopique d'un milieu granulaire en fonction des efforts de contact	43
2.4	Méthode de comparaison entre les différents types de conditions aux limites	44
2.4.1	Principe de comparaison	44
2.4.2	Décomposition du tenseur des déformations et des contraintes mésoscopiques	45
2.5	Conditions aux limites adaptées à la MPFEM	47
2.5.1	Conditions aux limites à gradient de déplacement homogène	47
2.5.2	Conditions aux limites à gradient de déplacement imposé aux frontières	49
2.5.3	Conditions aux limites périodiques	50
2.5.4	Conditions aux limites périodiques simplifiées	54
2.6	Vérification de l'implémentation des fonctions de post-traitement	56
2.7	Comparaison des différents types de conditions aux limites	60
2.8	Étude de l'influence du nombre de particules	65
2.9	Discussions et conclusions	67

2.1 Introduction

Dans le cadre de la modélisation numérique discrète, et de ce que Schmidt [99] désigne comme "homogénéisation numérique" ¹, se pose la question sous-jacente de l'application des CL à la frontière de l'échantillon numérique. Les premiers développements de la MPFEM ont utilisé des plans rigides, en contact avec les particules périphériques aux bords de l'échantillon, pour l'application des CL. Cette technique introduit des effets de bord significatifs, limitant le réagencement possible des particules. Procopio et Zavaliangos [89], ainsi qu'Abdelmoula et al. [36] ont étudié l'impact du nombre de particules sur la convergence des surfaces de charge avec ce type de CL. Ils ont notamment montré que la limite d'élasticité diminuait avec le nombre de particules. La grande puissance de calcul requise par la MPFEM et les moyens limités de l'époque ont empêché les auteurs de ces études d'exécuter des simulations avec suffisamment de particules pour atteindre la convergence de leurs résultats.

Afin de pallier ces effets de bords importants, et dans l'optique d'obtenir des résultats stabilisés à l'aide d'échantillons numériques de taille inférieure, Schmidt et al. [97, 98] ont introduit des conditions aux limites périodiques (CLP) adaptées à la MPFEM, décrites en détail dans la sous-section 2.5.3. Plus tard, Loidolt et al. [102, 103] ont proposé une approche simplifiée d'implémentation de CLP approximatives (sous-section 2.5.4), conduisant à une amélioration de l'efficacité des simulations. En utilisant ces deux approches, Loidolt et al. [102] et Schmidt et al. [107] ont conclu que des échantillons numériques 3D, constitués respectivement de 50 et 70 particules, étaient suffisants pour obtenir des résultats stabilisés. Cette taille d'échantillon numérique est significativement plus faible que celle obtenue dans le cas de simulations en éléments discrets. Ceci s'explique en remarquant que, dans le cadre de la DEM, tout mouvement implique une taille caractéristique supérieure à la taille des particules (les particules étant rigides – ou quasi-rigides, le seul mode de déformation autorisé est le réagencement). A contrario, dans le cadre de la MPFEM, l'assemblage peut s'adapter aux déformations à des échelles de longueur bien inférieures à la taille des particules, par déformation des particules.

La question de l'impact des CL dans le cadre de l'homogénéisation numérique de matériaux hétérogènes est déjà largement débattue depuis un certain temps, comme rappelé par exemple dans les introductions des travaux de Schneider et al. [130] ou encore de Loidolt et al. [102]. Au même titre que la DEM, les problèmes MPFEM ont la particularité d'inclure des phénomènes de réagencement. Cependant, les mécanismes sous-jacents associés à la MPFEM diffèrent considérablement de ceux rencontrés en éléments discrets, en particulier en termes d'échelles de longueur caractéristiques. Le problème des CL appliquées dans le cadre de la MPFEM est techniquement plus difficile à résoudre, car il nécessite à la fois la prise en compte du déplacement et de la déformation des particules. Les études précédentes citées ci-dessus ont proposé différentes solutions correspondant à différents degrés de précision et de complexité. Cependant, aucune comparaison n'a jamais été faite entre ces techniques, et la compréhension de l'influence des CL dans un tel problème d'homogénéisation numérique reste aujourd'hui limitée. Par ailleurs, la question des échelles de longueur entrant en jeu dans les problèmes MPFEM est actuellement largement ouverte. La présente étude propose d'aborder ces trois points.

Dans ce présent chapitre, différents types de CL adaptés à la MPFEM sont étudiés sur un même échantillon numérique, afin d'étudier leur influence sur la contrainte et la déformation moyennes associées au continuum de Cauchy équivalent, ainsi que sur le coût numérique engendré par les simulations. Comme expliqué dans la sous-section 2.2.1, l'échantillon numérique est généré de manière à être périodiquement stable, ceci afin de permettre l'application des CLP. Les CL historiques utilisant des plans rigides évoquées ci-dessus ne sont par conséquent pas incluses dans l'étude, l'échantillon n'étant pas initialement stable vis-à-vis de ce type de CL.

1. Calcul du tenseur des contraintes et des déformations mésoscopiques moyens, associés au milieu continu de Cauchy équivalent à l'échantillon numérique, constitué d'une microstructure discrète.

Le calcul des contraintes, et plus particulièrement des déformations mésoscopiques homogénéisées, est ici effectué d'une manière différente à celui des études antérieures susnommées. Dans le cas présent, et comme détaillé [section 2.3](#), la déformation est calculée à l'aide d'un ajustement en moindres carrés du déplacement réel des particules modélisées; les études précédentes calculant quant à elles la déformation à partir des déplacements imposés. Cette méthodologie a révélé une différence entre les déplacements souhaités (imposés) et les déplacements réels (simulés) des particules, ce qui a permis de comparer l'impact des différents types de CL sur la contrainte et la déformation moyennes sous une lumière différente de celle utilisée dans les études antérieures.

2.2 Protocole de la simulation numérique

2.2.1 Génération d'un milieu granulaire idéalisé

Un volume élémentaire périodique (VEP) constitué de N particules α initialement sphériques, tel que représenté figure 2.1, est utilisé comme échantillon de référence. Il convient de noter que ce VEP est ici utilisé à des fins de comparaison entre différents types de CL, et n'est pas destiné à être représentatif d'un quelconque matériau réel.

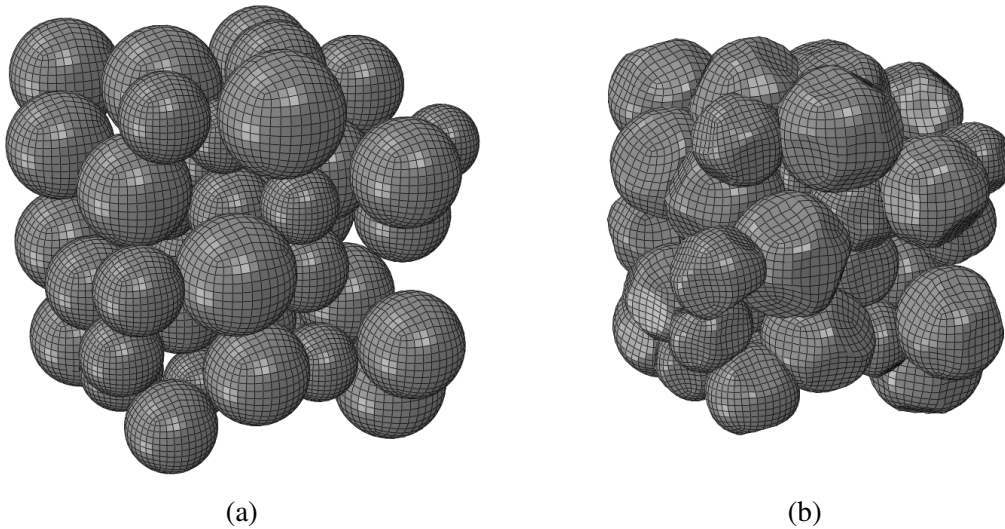


FIGURE 2.1 – Volume élémentaire périodique constitué de 50 particules initialement sphériques dans (a) la configuration de référence et (b) la configuration déformée, suite à un chargement isotrope. Les particules périphériques utilisées pour l'application des CL (comme expliqué ci-dessous) ne sont pas représentées.

Le VEP est généré à l'aide du logiciel d'éléments discrets *Yade* [131] dans l'optique d'obtenir une topologie périodique stable. Le principe de la génération de l'échantillon est le suivant : N particules α suivant une distribution de taille donnée (dans le cas présent, un rapport de taille proche de 2) sont tout d'abord générées au sein d'une cellule cubique. Une simulation en éléments discrets dans laquelle les dimensions de la cellule sont progressivement réduites est ensuite exécutée. La périodicité topologique de l'échantillon est assurée par le fait que la recherche de contact, lors de la simulation DEM, prend en compte la périodicité. En d'autres termes, soit (d_x, d_y, d_z) les dimensions de la cellule parallélépipédique et $(x^\alpha, y^\alpha, z^\alpha)$ les coordonnées de la particule α . La recherche de contact et le calcul des forces de contact sont effectués en considérant que la particule α est également localisée en $(x^\alpha + d_x, y^\alpha, z^\alpha)$, $(x^\alpha, y^\alpha + d_y, z^\alpha)$ et $(x^\alpha, y^\alpha, z^\alpha + d_z)$. Réduire la taille de la cellule équivaut à diminuer les valeurs de d_x , d_y et d_z . Cette réduction est alors poursuivie jusqu'à ce que l'échantillon se stabilise à un état de contrainte donné. La stabilité de l'échantillon est atteinte lorsque la "unbalanced force", correspondant au rapport de la somme des forces sur la moyenne de la norme des forces appliquées aux éléments discrets, devient inférieure à un seuil donné. Il convient de noter que, en raison de la procédure de génération utilisée, les dimensions d_x , d_y et d_z ne sont pas parfaitement égales. Aucun frottement n'est considéré entre les particules durant cette phase de génération. Ceci amène à une densité en fin de procédure de génération proche de 0,55, quel que soit le nombre de particules utilisé. Par la suite, les notations (d_x, d_y, d_z) seront utilisées pour définir la taille de cellule en fin de procédure DEM décrite ci-dessus. Ces dimensions correspondront donc à la taille de la cellule initiale relative à la simulation MPFEM.

Les particules ainsi générées sont ensuite introduites dans l'assemblage du logiciel d'éléments finis commercial *Abaqus* [45]. Le rayon r^α de chaque particule est préalablement légèrement réduit, afin de minimiser les interpénétrations lors de la création de l'assemblage éléments

finis. Pour chaque particule α de coordonnées x^α , y^α et z^α située suffisamment proche de la limite extérieure du VEP, une particule associée $\tilde{\alpha}$ (qui sera par la suite appelée particule "dupliquée") est dupliquée sur la face opposée du VEP, puis ajoutée à l'assemblage éléments finis afin de permettre l'application des CL. Les particules peuvent être dupliquées suivant les trois directions de l'espace. Par exemple, si une particule α est dupliquée suivant la direction x , les coordonnées de la particule $\tilde{\alpha}$ seront alors soit $x^{\tilde{\alpha}} = x^\alpha + d_x$, $y^{\tilde{\alpha}} = y^\alpha$ et $z^{\tilde{\alpha}} = z^\alpha$, soit $x^{\tilde{\alpha}} = x^\alpha - d_x$, $y^{\tilde{\alpha}} = y^\alpha$ et $z^{\tilde{\alpha}} = z^\alpha$, en fonction de la position initiale de la particule α . Dans le cas où la particule α est dupliquée suivant la direction y ou z , une procédure similaire est appliquée. Plus précisément, et comme représenté sur la [figure 2.2](#), une particule α est dupliquée selon la direction x lorsque la position de son centre est située à une distance inférieure à une distance seuil d_{bc} du plan d'équation $x = x_{max}$ ou $x = x_{min}$, x_{max} et x_{min} correspondant aux coordonnées suivant l'axe x du centre de la particule la plus excentrée (dans la direction $+x$ ou $-x$ respectivement, comme illustré [figure 2.2](#)). En pratique, ces plans se sont montrés plus appropriés que les bordures de la cellule périodique pour maintenir le nombre de particules dupliquées aussi faible que possible. Des particules supplémentaires sont également dupliquées dans les coins du VEP, en appliquant le même critère aux particules déjà dupliquées $\tilde{\alpha}$ ².

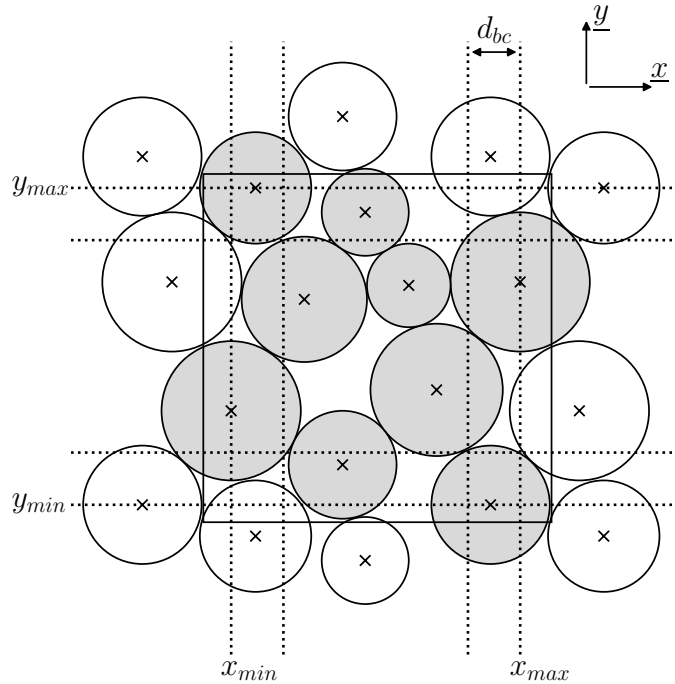


FIGURE 2.2 – Représentation schématique d'un assemblage constitué d'un VEP de 9 particules (en sombre) et de 10 particules dupliquées (en clair).

2.2.2 Modèle numérique

Les simulations numériques sont alors effectuées sur l'échantillon numérique, constitué du VEP et des particules dupliquées. Dans la présente étude, des VEP constitués de 50, 150, 350 et 1000 particules ([figure 2.3](#)) sont utilisés.

2. Les particules sont tout d'abord dupliquées suivant la direction x , puis selon la direction y en appliquant le critère à toutes les particules (y compris celle déjà dupliquées suivant la direction x), et ainsi de suite – cf. [figure 2.2](#).

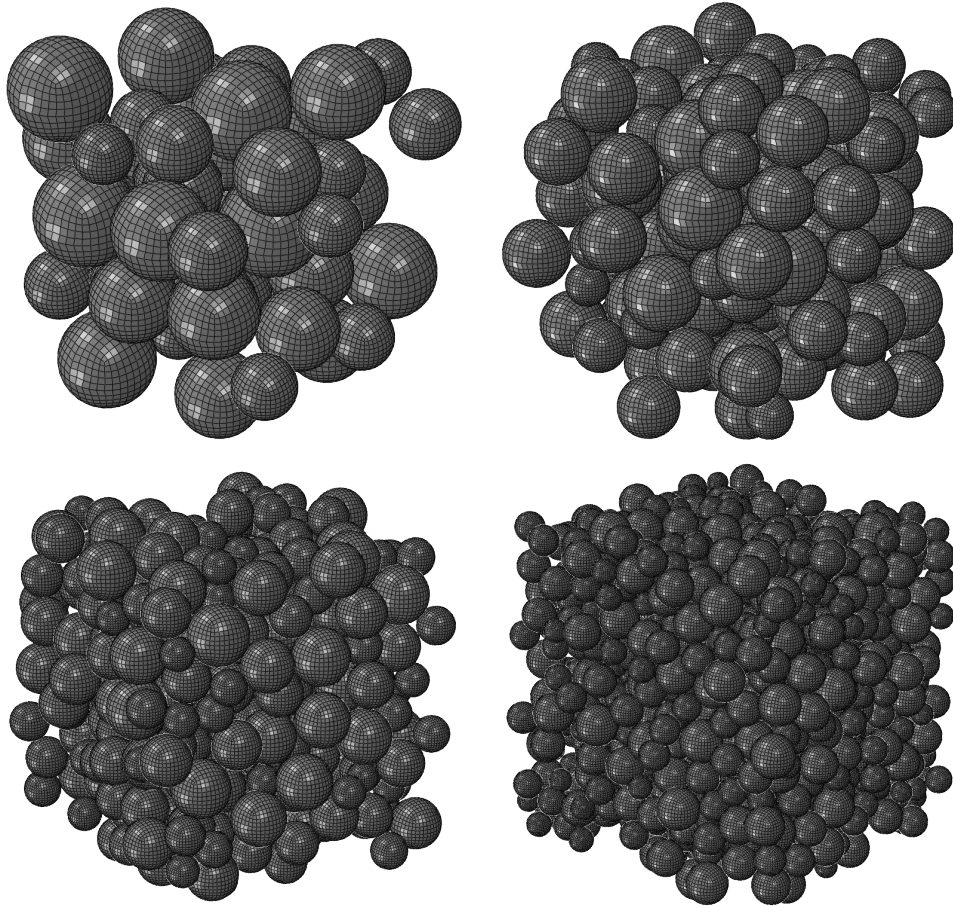


FIGURE 2.3 – VEP initiaux constitués de 50, 150, 350 et 1000 particules.

2.2.2.1 Loi de comportement des particules

Le comportement constitutif des particules de l'assemblage éléments finis est modélisé à l'aide d'une loi de comportement élasto-plastique. Cette loi intègre de l'élasticité linéaire isotrope et de la plasticité de Mises écouissable en loi de puissance isotrope :

$$\sigma_y = \sigma_0 + KE_{pl}^n \quad (2.1)$$

où σ_y correspond à la limite d'élasticité courante du matériau, σ_0 à la limite d'élasticité initiale et $E_{pl} = \int_0^t D_{pl} dt$ à la déformation plastique équivalente, définie à partir de D_{pl} , le second invariant principal associé à la partie déviatoire du tenseur des vitesses de déformation plastique. Le module de Young est défini par E , le coefficient de Poisson par ν , et les paramètres d'écrouissage par K et n . Les valeurs des paramètres utilisés sont récapitulées dans le [tableau 2.1](#). Elles correspondent à un alliage de plomb, ignorant la dépendance à la vitesse de déformation, de manière similaire à l'étude proposée par Chen et al. [90].

Paramètre	E	ν	K	n	σ_0
Unité	MPa	-	MPa	-	MPa
Valeur	10 000	0,435	15,5	0,35	5,0

TABEAU 2.1 – Valeurs des paramètres matériaux utilisés dans la simulation MPFEM.

2.2.2.2 Paramètres de la simulation

Une loi de frottement simple de type Coulomb et de coefficient de frottement $\mu = 0,1$ est implémentée comme loi de contact entre les particules du modèle. Bien qu'un problème quasi-statique soit étudié, le solveur *Abaqus/Explicit* basé sur l'algorithme d'Euler est ici utilisé afin de permettre la gestion du grand nombre de contacts entrant en jeu dans la simulation éléments finis. Une mise à l'échelle de la masse (*Mass Scaling*) semi-automatique est appliquée à l'ensemble du modèle afin d'augmenter le pas de temps critique de la simulation explicite.

Les particules du modèle sont maillées à l'aide d'éléments hexaédriques linéaires de type C3D8R (figure 2.1) avec 562 nœuds par particule. D'après les études MPFEM antérieures de la littérature (en particulier [1, 36, 91, 102, 107]), un tel maillage est suffisamment précis dans le cas présent pour deux raisons : (i) les imprécisions sur le calcul des forces de contact induites par la discrétisation se compensent grâce au grand nombre de contacts modélisés et (ii) les surfaces de contact sont suffisamment grandes pour être discrétisées à l'aide d'un nombre relativement faible d'éléments.

2.3 Calcul des grandeurs mésoscopiques

2.3.1 Détermination du tenseur des déformations de Hencky mésoscopique d'un milieu granulaire par un ajustement aux moindres carrés

La déformation mésoscopique associée au VEP est calculée, dans le cadre des grandes déformations, par la méthode des moindres carrés appliquée aux vecteurs déplacement des centres de masse des N particules le constituant. Cette méthode, développée par Teil [6], est décrite plus en détail [annexe C](#). Elle permet l'obtention du tenseur gradient des déplacements $\underline{\underline{H}}$, défini par l'équation 2.2, avec \underline{u} le vecteur déplacement associé aux points matériels du milieu, \underline{x} le vecteur position dans la configuration de référence et $\underline{u}^0 = (u_1^0 \ u_2^0 \ u_3^0)$ le vecteur déplacement moyen associé au mouvement de translation de corps rigide.

$$\underline{u} = \underline{\underline{H}} \cdot \underline{x} + \underline{u}^0 \quad (2.2)$$

Le tenseur des déformations de Hencky $\underline{\underline{h}}$ est alors directement obtenu (équation 2.3)³ grâce au calcul du tenseur gradient de la transformation $\underline{\underline{F}}$, défini à partir du tenseur gradient des déplacements introduit précédemment par la relation $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{H}} + \underline{\underline{I}}$, où $\underline{\underline{I}}$ correspond au tenseur identité. Comme détaillé plus loin ([sous-section 2.4.2](#)), le tenseur de Hencky (gauche) a été choisi pour caractériser la déformation, car sa décomposition en partie sphérique/déviatoire décrit de manière objective, dans le cadre des grandes déformations, la dilatation sphérique et la distorsion [132, 133].

$$\underline{\underline{h}} = \frac{1}{2} \ln (\underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^T) \quad (2.3)$$

L'utilisation d'une telle méthode a l'avantage de définir la déformation mésoscopique sur n'importe quel sous-ensemble de l'échantillon numérique. Dans le cas présent, la déformation mésoscopique est calculée sur les particules du VEP uniquement, en excluant les particules dupliquées du calcul de la déformation. À l'exception des CL de type GDH décrites [sous-section 2.5.1](#), le déplacement des particules du VEP n'est pas directement imposé. Les particules modélisées sont donc libres de se réagencer et de se déformer. Pour ces deux raisons, la déformation mésoscopique obtenue à partir de la procédure d'ajustement ne correspond pas exactement au tenseur cible $\underline{\underline{F}}^0$ utilisé lors de la définition des déplacements imposés aux particules dupliquées.

2.3.2 Détermination de la densité d'un milieu granulaire

La densité ρ du milieu granulaire est alors déterminée par le ratio du volume occupé par les particules V_p sur le volume associé au VEP, noté V_{VEP} (équation 2.4).

$$\rho = \frac{V_p}{V_{VEP}} \quad (2.4)$$

Le volume du VEP dans la configuration déformée $V_{VEP} = V_{VEP}^0 \times \det \underline{\underline{F}}$ est calculé grâce à la connaissance du volume initial $V_{VEP}^0 = d_x d_y d_z$ associé au VEP et du tenseur gradient de la transformation $\underline{\underline{F}}$. En négligeant les variations de volume des particules causées par la compressibilité élastique, le volume occupé par les particules V_p est quant à lui déterminé grâce à la connaissance du volume initial des particules :

$$V_p = \frac{4}{3} \pi \sum_{\alpha=0}^N r^{\alpha 3} \quad (2.5)$$

3. La notion de logarithme est ici généralisée aux tenseurs d'ordre 2. Soit un tenseur $\underline{\underline{A}}$ diagonalisable (comme c'est le cas de $\underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^T$). Son logarithme est calculé par la relation $\ln (\underline{\underline{A}}) = \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1}$, avec $\underline{\underline{P}}$ la matrice de passage de la base associée à $\underline{\underline{A}}$ à la base principale, et $\underline{\underline{L}}$ la matrice diagonale composée des logarithmes des valeurs principales de $\underline{\underline{A}}$.

avec r^α le rayon initial de la particule α .

2.3.3 Détermination du tenseur des contraintes mésoscopique d'un milieu granulaire en fonction des efforts de contact

Le tenseur des contraintes mésoscopique du milieu granulaire $\underline{\underline{\sigma}}$ est quant à lui défini comme une moyenne volumique des contraintes au sein du VEP. Il est calculé au moyen de l'équation de Love-Weber [108, 109] :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V_{VEP}} \sum_{k=1}^n f_i^k l_j^k \quad (2.6)$$

où n correspond au nombre de contacts entre deux particules α et β , f^k au vecteur force du contact k associé à l'action de la particule β sur la particule α et l^k à un vecteur inter-granulaire (appelé vecteur branche) connectant un point de la particule α à un point de la particule β . En supposant l'équilibre statique, les points associés à chaque particule peuvent être choisis arbitrairement, mais doivent toutefois être définis de manière unique pour la gestion de l'ensemble des contacts. Par simplicité, le vecteur branche est pris égal au vecteur connectant les centres de masse des particules en contact. La convention de signe de la mécanique des sols, pour laquelle une contrainte de compression est prise positive, est ici utilisée. Dans le cas présent, les particules dupliquées⁴ ont été explicitement incluses dans le modèle numérique. Ceci soulève la question de savoir quels contacts ont contribué à la contrainte moyenne du VEP et doivent donc être inclus dans la somme de l'équation 2.6. L'annexe C apporte quelques précisions à ce sujet.

Une fois ces précautions prises, le calcul des contraintes mésoscopiques utilisant l'équation 2.6 a l'avantage, dans le contexte présent, de définir un tenseur de contrainte mésoscopique associé à un VEP donné, sans pour autant avoir besoin de définir des surfaces limites au VEP. Aucune restriction quant à la forme du VEP ne sera à considérer et des particules additionnelles pourront être dupliquées (pour l'application des CL) sans qu'il ne soit nécessaire de définir de volume associé. Seul le volume V_{VEP} est nécessaire et peut être calculé à partir de la connaissance des dimensions initiales de la cellule périodique et du déterminant de $\underline{\underline{F}}$. Les vecteurs branches sont déterminés à l'aide des coordonnées de centres de masses des particules, obtenues grâce à la variable de sortie *COORDCOM* du logiciel *Abaqus*, tandis que la variable *CFT* du logiciel *Abaqus* est utilisée pour le calcul des vecteurs forces⁵.

4. Ne faisant pas partie du VEP.

5. L'export de la force de contact entre deux surfaces n'étant pas directement réalisable dans *Abaqus CAE*, il est effectué par une écriture direct dans le fichier d'entrée généré par *Abaqus*.

2.4 Méthode de comparaison entre les différents types de conditions aux limites

2.4.1 Principe de comparaison

Les différents types de CL, présentés [section 2.5](#), sont étudiés à partir d'un même VEP constitué de 50 particules⁶. Le même maillage est utilisé lors des différentes études. Des particules dupliquées sont ensuite générées, comme expliqué [sous-section 2.2.1](#), pour permettre l'application des CL. L'influence du paramètre d_{bc} est tout d'abord étudié, afin d'estimer le nombre de particules dupliquées devant être ajouté au modèle. Cette étude permet de déterminer, pour chaque type de CL, la plus petite valeur de d_{bc} permettant l'obtention de résultats mésoscopiques stabilisés (où la contrainte et la déformation mésoscopiques ne dépendent plus du paramètre d_{bc}). Cette valeur du paramètre d_{bc} offre une estimation de l'importance des effets de bord et de l'imperfection des CL appliquées.

Dans un second temps, les prédictions des résultats stabilisés associés aux différents types de CL sont comparées entre elles, en termes de contrainte et de déformation mésoscopiques. Un accent est également mis sur le nombre de degrés de liberté associés aux différents modèles, ainsi que sur la durée des simulations. Pour une meilleure comparaison (notamment afin de s'affranchir de certains problèmes liés à la parallélisation de la résolution des équations de couplage), toutes les simulations présentées dans ce chapitre ne sont exécutées que sur un seul processeur (CPU).

La contrainte et la déformation mésoscopiques sont calculées comme expliqué [section 2.3](#). Ces grandeurs ne sont associées qu'aux particules appartenant au VEP, identiques dans toute l'étude (seule les particules dupliquées pouvant différer entre les différents types de CL). Deux chemins de chargement mécanique sont imposés aux échantillons numériques : une déformation uniaxiale (similaire à une compression en matrice, sans frottement paroi/particule - par souci de simplicité, ce chargement sera appelé "chargement en matrice" dans la suite) et une déformation isotrope. L'amplitude des déplacements imposés aux particules est définie dans l'optique d'atteindre une densité relative finale cible $\rho_f = 0,95$ en fin de compression. Les déplacements sont pour cela estimés sur la base de la réduction des dimensions de la cellule périodique permettant d'atteindre la densité relative finale, en supposant que les particules initialement situées dans la cellule périodique demeurent entièrement à l'intérieur de la cellule périodique une fois déformée. Ceci n'est pas possible lorsque la déformation des particules aux limites n'est pas entièrement prise en compte. En effet, les particules aux limites ne sont pas (ou peu) contraintes sur leurs frontières externes, permettant au matériau de ces particules de s'écouler à l'extérieur de la cellule périodique. Comme il sera vu par la suite, cet effet a eu pour conséquence que les échantillons numériques n'ont pas abouti à une densité relative finale d'exactly $\rho_f = 0,95$ en fin de compression. Ceci, cependant, n'est pas un problème pour la comparaison des différents types de CL sur les chemins de contrainte et de déformation.

Une mise à l'échelle de la masse plus importante en cas du chargement en matrice est effectuée afin de conserver un modèle quasi-statique sans effet inertiel, l'amplitude de déplacement étant plus élevée. L'augmentation de la masse est calculée automatiquement pour atteindre un incrément de temps de $4,5 \times 10^{-6}$ secondes pour le chargement isotrope, et de $3,0 \times 10^{-6}$ secondes pour le chargement en matrice (pour une durée de simulation de 1 seconde).

Des vérifications microstructurales ont été effectuées pour valider le choix des paramètres de contact⁷. Afin d'optimiser l'efficacité de la simulation et de réduire le coût de calcul, seules les sphères initialement séparées d'une distance inférieure à $3,0r_{max}$ (dans le cas d'un chargement

6. Comme expliqué par la suite, des simulations ont également été exécutées sur d'autres VEP, notamment afin d'étudier l'impact du nombre de particules sur les résultats homogénéisés.

7. Notamment pour chercher à réduire au maximum le temps nécessaire à la gestion des contact, tout en évitant le chevauchement des particules.

isotrope) et $4,5r_{max}$ (dans le cas d'un chargement en matrice) sont considérées comme pouvant potentiellement entrer en contact, avec r_{max} le rayon de la plus grosse particule modélisée. La raison de cette différence est une fois encore due à l'amplitude des déplacements plus élevée dans le cas d'une compression en matrice. La [figure 2.4](#) montre des coupes de la microstructure déformée, obtenues dans le cas de périodicité simplifiée présentée ci-dessous, permettant de valider la gestion des contacts.

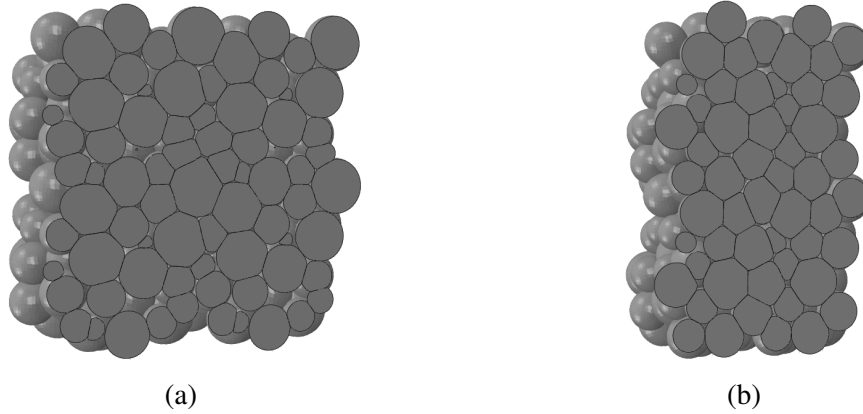


FIGURE 2.4 – Coupe d'un milieu granulaire déformé (incluant les particules périphériques), constitué d'un VEP de 50 particules (a) pour un chargement isotrope avec $d_{bc}/r_{max} = 3,0$ et (b) pour un chargement en matrice avec $d_{bc}/r_{max} = 4,5$.

2.4.2 Décomposition du tenseur des déformations et des contraintes mésoscopiques

Afin de ne pas comparer une à une toutes les composantes des tenseurs de contrainte et de déformation, une décomposition sphérique/déviatoire est utilisée dans l'optique de représenter les états de contrainte et de déformation sous forme de chemins de chargement.

De façon tout à fait générale, toute déformation peut être interprétée de manière unique comme la composition commutative d'une déformation sphérique et d'une déformation isochore. Dans le cadre des grandes transformations, et comme expliqué par Garrigues [133] et Sidoroff [132], seuls les tenseurs de Hencky sont en mesure d'exprimer cette décomposition de manière additive ([équation 2.7](#)), comme la somme d'une déformation sphérique $\underline{\underline{h}}_v$ et d'une déformation isochore déviatoire $\underline{\underline{h}}_d$.

$$\underline{\underline{h}} = \underbrace{\frac{\text{Tr}\underline{\underline{h}}}{3}\underline{\underline{I}}}_{\underline{\underline{h}}_v} + \underbrace{\underline{\underline{h}} - \frac{\text{Tr}\underline{\underline{h}}}{3}\underline{\underline{I}}}_{\underline{\underline{h}}_d} \quad (2.7)$$

Les déformations sont alors contrôlées à l'aide du premier invariant du tenseur de Hencky et du deuxième invariant de son déviateur : la déformation volumique h_v ([équation 2.8](#)) et la déformation déviatoire h_d ([équation 2.9](#)), toutes deux définies dans le cadre des grandes déformations. Les contraintes moyenne σ_m ([équation 2.10](#)) et déviatoire σ_d ([équation 2.11](#)) sont ensuite calculées afin de permettre la représentation plane des chemins de chargement.

$$h_v = \text{Tr}\underline{\underline{h}} \quad (2.8)$$

$$h_d = \sqrt{\frac{2}{3}\text{Tr}\underline{\underline{h}}_d^2} \text{ avec } \underline{\underline{h}}_d = \underline{\underline{h}} - \frac{h_v}{3}\underline{\underline{I}} \quad (2.9)$$

$$\sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr} \underline{\underline{\sigma}} \quad (2.10)$$

$$\sigma_d = \sqrt{\frac{3}{2} \text{Tr} \underline{\underline{\sigma}}_d^2} \text{ avec } \underline{\underline{\sigma}}_d = \underline{\underline{\sigma}} - \sigma_m \underline{\underline{I}} \quad (2.11)$$

2.5 Conditions aux limites adaptées à la MPFEM

Différents types de CL adaptées à la MPFEM sont implémentés afin d'étudier l'impact des CL sur les grandeurs mésoscopiques ainsi que sur le temps de calcul. Les résultats mésoscopiques présentés ci-dessous sont obtenus par une procédure de minimisation par la méthode des moindres carrés pour les déformations et par la formule de Love-Weber [108, 109] pour les contraintes. Des études préliminaires sont réalisées sur des VEP constitués de 50 particules, afin déterminer la taille de maillage ainsi que la valeur appropriée du paramètre d_{bc} permettant d'obtenir des résultats stabilisés en un minimum de temps, pour les différents types de CL étudiés (présentés sous-section 2.5.1 à sous-section 2.5.4).

2.5.1 Conditions aux limites à gradient de déplacement homogène (GDH)

2.5.1.1 Description

Le premier type de CL étudié consiste à imposer un déplacement à chaque particule modélisée (figure 2.5). A strictement parler, ce type de chargement ne correspond pas à des conditions aux "limites". Pour des raisons de simplicité, il sera toutefois référé comme "CL" par la suite. Évidemment, ce type de chargement, qui n'est pas réaliste, sur-contraint le mouvement des particules en empêchant tous types de réagencement. Il a été introduit dans la présente étude à des fins de comparaison, dans l'optique de relever et d'étudier les effets de bord uniquement causés par la déformation des particules.

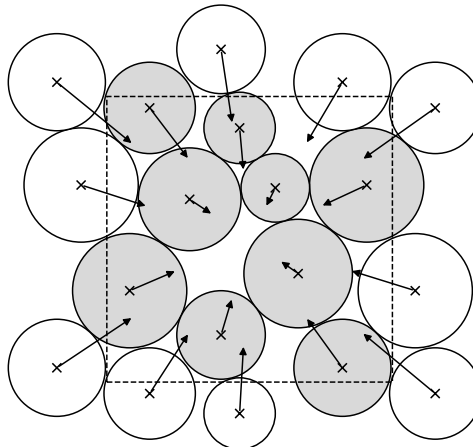


FIGURE 2.5 – Représentation schématique des CL à gradient de déplacement homogène.

Dans cette approche, chaque particule α est associée à un point de référence initialement en son centre, situé à la position \underline{X}^α dans la configuration de référence. Ces points de référence sont couplés aux particules via un couplage de distribution. Ce couplage permet une répartition des efforts et moments appliqués au point de référence sur tous les nœuds appartenant à la zone centrale de la particule (située à une distance inférieure à $0,5r^\alpha$ de son centre \underline{X}^α , où r^α est le rayon de la sphère considérée). Un profil de distribution polynomial cubique par rapport à la distance au point de référence \underline{X}^α est utilisé afin d'augmenter l'importance des nœuds proches du point de référence. Ce type de couplage autorise le mouvement des nœuds contraints par rapport au point de référence, sans pour autant les laisser libres, ce qui permet ainsi de limiter les concentrations de contraintes (cf. [6, 45] pour plus de détails).

Une fois ce couplage de distribution effectué, le mouvement des points de référence associés aux particules est directement imposé à partir de la connaissance du tenseur gradient de la transformation cible \underline{F}^0 (équation 2.12), où \underline{u}^0 représente les déplacements de translation de corps rigide et est choisi (équation 2.13) pour maintenir le centre du VEP stationnaire. Malgré l'absence de

réagencement, l'ajout de particules dupliquées reste nécessaire pour obtenir une déformation réaliste en bordure de VEP. Ce nombre de particules dupliquées est contrôlé par l'intermédiaire du paramètre d_{bc} .

$$\underline{u}^\alpha = (\underline{F}^0 - \underline{I}) \cdot \underline{X}^\alpha + \underline{u}^0 \quad (2.12)$$

$$\underline{u}^0 = -\frac{1}{2} (\underline{F}^0 - \underline{I}) \cdot \begin{pmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

2.5.1.2 Étude de la convergence

Dans le cas de CL à gradient de déplacement homogène imposées à toutes les particules du système, la [figure 2.6](#) montre que des particules dupliquées jusqu'à une distance $d_{bc} \geq 2r_{max}$ sont nécessaires pour obtenir des résultats stabilisés.

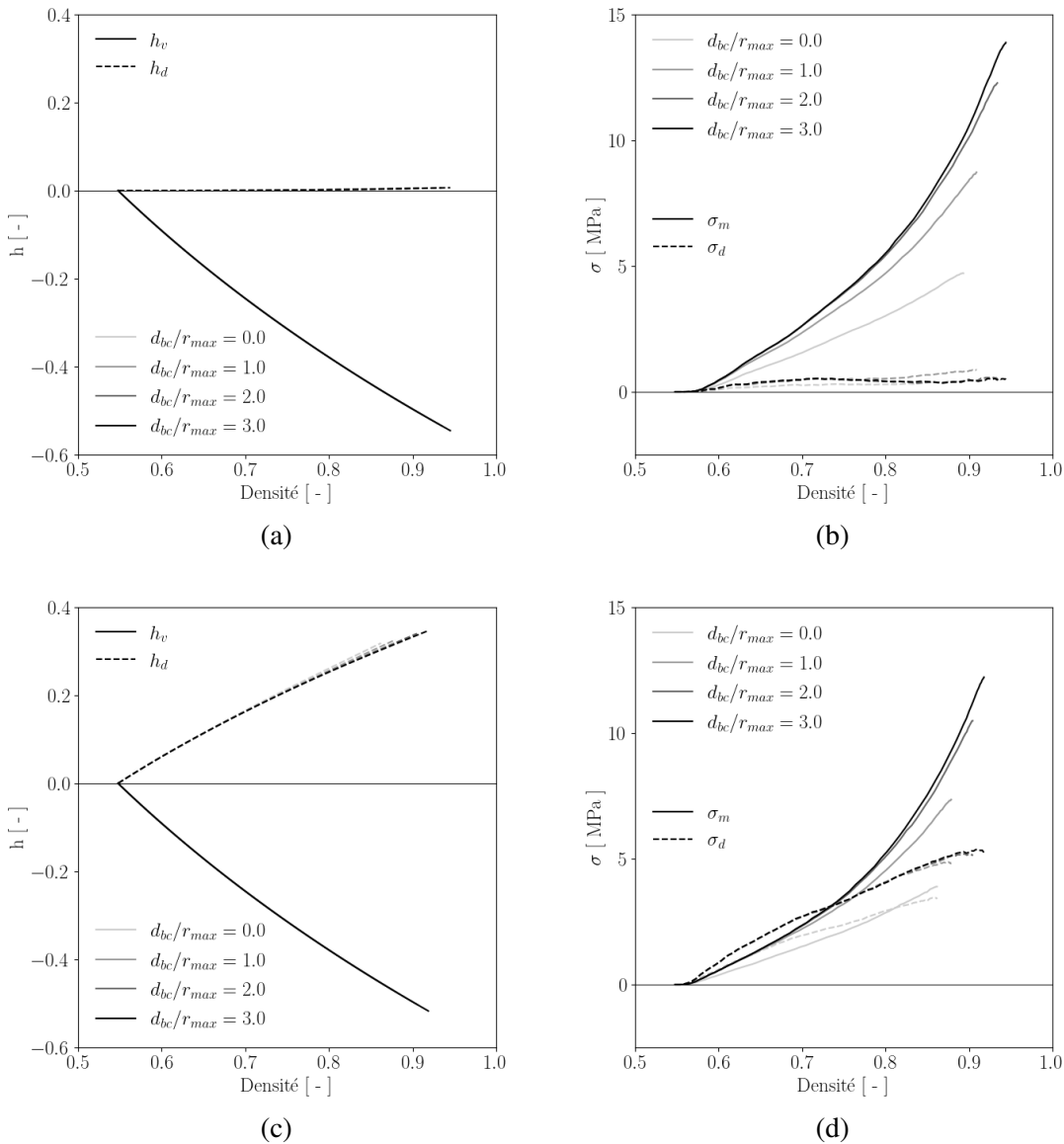


FIGURE 2.6 – (a,c) déformation et (b,d) contrainte en fonction de la densité relative pour un chargement (a,b) isotrope et (c,d) en matrice, dans le cas de CL à gradient de déplacement homogène.

Il est également observé que les simulations n'ont pas atteint la densité cible $\rho_f = 0,95$ en fin de compression, même pour $d_{bc} = 3r_{max}$. Ceci provient du fait que les particules en limite de VEP ne se sont pas déformées comme si elles étaient situées dans la masse lorsque la distance d_{bc} est trop faible. Ces particules ont en effet plus d'espace autour d'elles pour que la matière puisse s'écouler vers l'extérieur. Par conséquent, les forces de contact et les mouvements de leurs centres de masse en sont affectés. Des observations similaires sont faites en l'absence de particules dupliquées dans les coins du VEP. Une différence est également observée entre l'état de déformation imposé (décrit par \underline{F}^0) et celui simulé (décrit par \underline{F}).

La figure 2.6 montre également une contrainte déviatoire s'écartant légèrement de zéro lors de l'essai de compression isotrope. Comme vu plus loin (section 2.8), ce résultat provient du faible nombre de particules modélisées (et donc du faible nombre de contacts pris en compte dans le calcul de la contrainte mésoscopique (équation 2.6).

2.5.2 Conditions aux limites à gradient de déplacement imposé aux frontières (GDF)

2.5.2.1 Description

Le deuxième type de CL étudié est similaire à la méthode précédente, en imposant cette fois, à partir du même tenseur prédéfini \underline{F}^0 , uniquement le mouvement des points de référence associés aux particules dupliquées (situées à la bordure du VEP comme le montre la figure 2.2) tel que présenté figure 2.7. Un réagencement des particules appartenant au VEP devient alors possible.

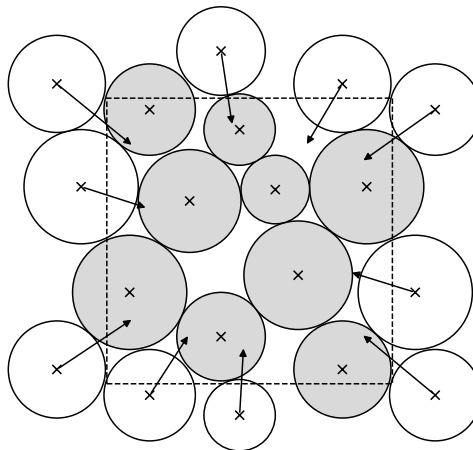


FIGURE 2.7 – Représentation schématique des CL à gradient de déplacement imposé aux frontières.

2.5.2.2 Étude de la convergence

Dans le cas de CL en déplacement imposé uniquement aux particules dupliquées, suffisamment de particules pilotées (et donc de particules dupliquées) deviennent nécessaires, afin d'éviter que les particules du VEP ne s'échappent. Ce nombre de particules minimal correspond à une distance minimale $d_{bc} = 1,5r_{max}$. Les résultats commencent à se stabiliser pour $d_{bc} = 2,0r_{max}$ (figure 2.8). La densité finale, en revanche, ne se stabilise quant à elle pas complètement, en continuant d'augmenter (même pour des rapports $d_{bc}/r_{max} \geq 2,5$). La densité relative finale n'atteint une nouvelle fois pas ρ_f (du moins pour le chargement en matrice) pour la même raison que pour les CL de type GDH : la déformation des particules aux limites n'a pas été correctement prise en compte.

La figure 2.8a montre que la déformation déviatoire de l'essai isotrope diffère de l'origine durant la compression (environ 6 à 9 % de la déformation volumique). Ceci provient certainement

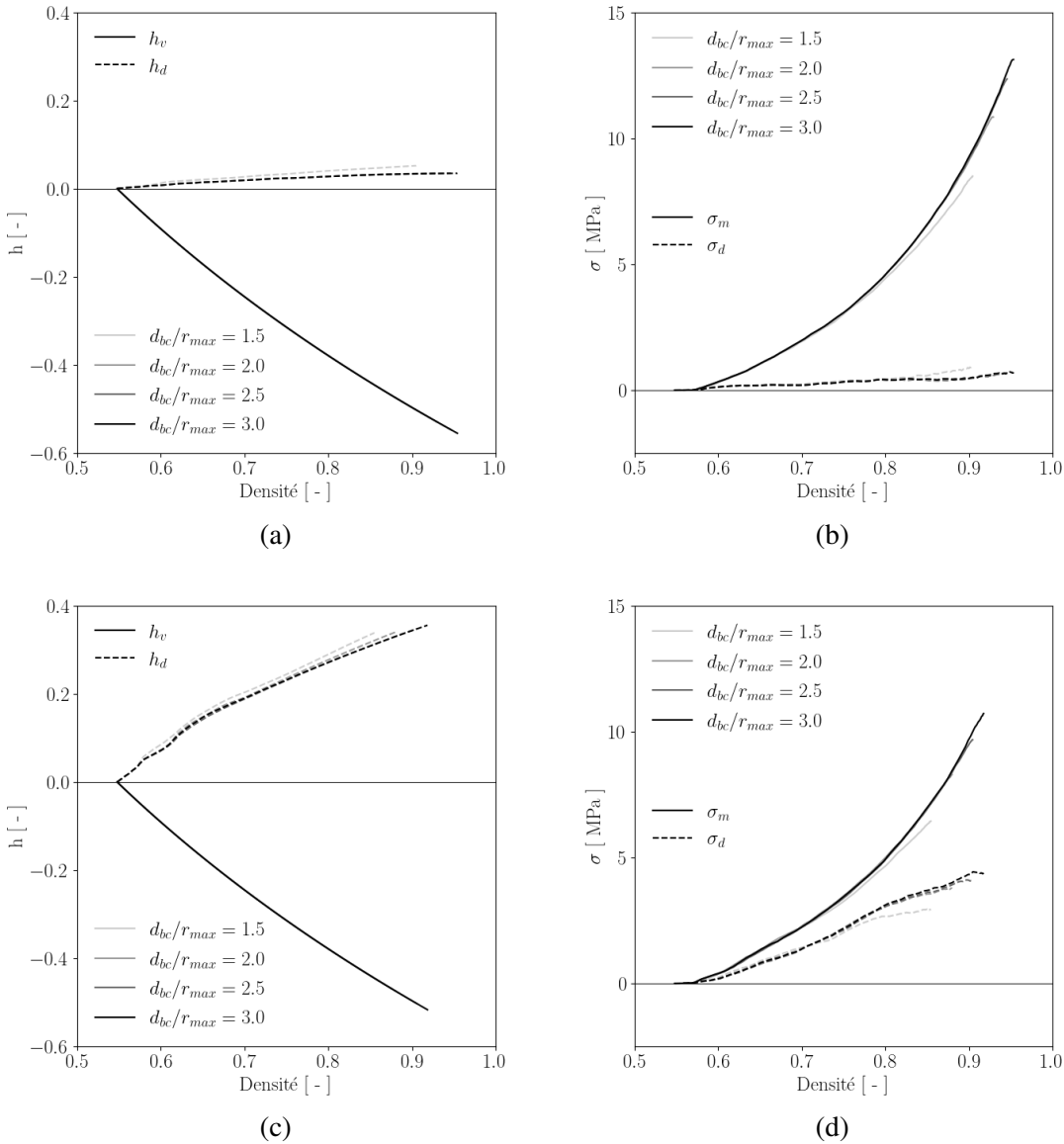


FIGURE 2.8 – (a,c) déformation et (b,d) contrainte en fonction de la densité relative pour un chargement (a,b) isotrope et (c,d) en matrice, dans le cas de CL à gradient de déplacement imposé aux frontières.

de l'anisotropie initiale de l'échantillon numérique. Comme illustré plus loin (section 2.8), cet effet est visible pour tous les types de CL, à l'exception des CL à gradient de déplacement homogène imposées à toutes les particules du système.

2.5.3 Conditions aux limites périodiques (CLP)

2.5.3.1 Description

Le troisième type de CL étudié correspond à des CLP, adaptées à la MPFEM, développées par Schmidt et al. [97, 98, 107] dans le cadre des matériaux granulaires dans l'optique de générer un milieu complètement périodique. Des développements de nature identique ont été effectués dans le cas des matériaux fibreux tissés [134]. Dans cette approche, chaque particule dupliquée est pour

cela insérée dans le modèle numérique sous la forme d'une coquille⁸, de sorte que le maillage surfacique soit identique entre la particule principale et dupliquée (tel que représenté figure 2.9).

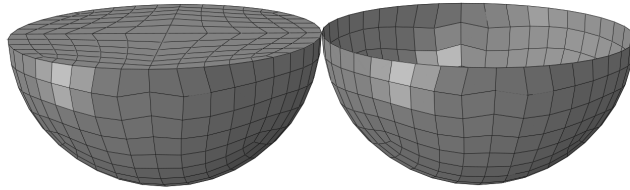


FIGURE 2.9 – Maillage volumique d'une particule principale à 896 éléments hexaédriques linéaires de type C3D8R et maillage surfacique converti de sa particule périodique dupliquée à 384 éléments quadrilatéraux linéaires de type SFM3D4R.

Afin de ne pas sur-contraindre le système, les particules dupliquées ne sont générées que sur la moitié des faces du VEP. La figure 2.10 ci-dessous illustre la différence, en termes d'assemblage modélisé, entre ce type de CL et les autres types.

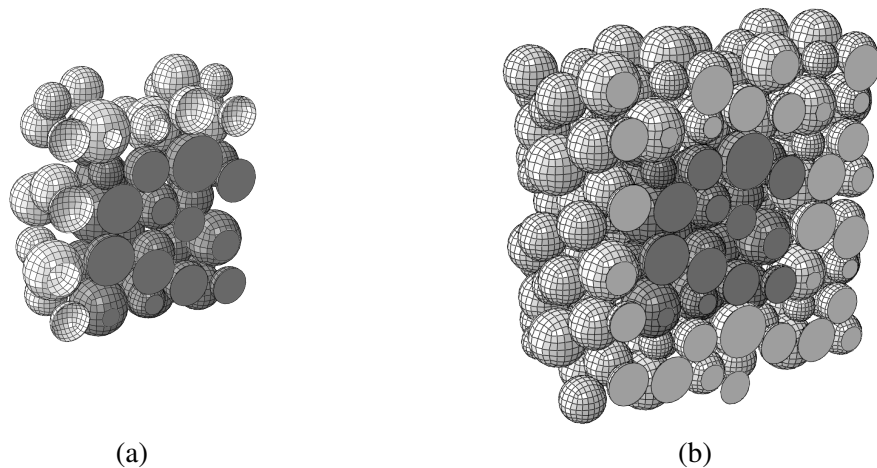


FIGURE 2.10 – Assemblages constitués d'un VEP de 50 particules (en sombre) et de particules dupliquées (en claire), dans le cas (a) de périodicité totale avec $d_{bc} = 1, 8$ et (b) des autres types de CL avec $d_{bc} = 2, 5$.

Trois nœuds de contrôle supplémentaires X_i^{aux} (qui seront appelés nœuds auxiliaires par la suite) sont introduits dans le modèle afin de pouvoir imposer des déformations au VEP. Les 3 composantes des 3 nœuds auxiliaires étant directement liées aux 9 composantes du tenseur \underline{F}^0 (cf. [99] pour plus de détails), il est alors possible d'appliquer une déformation quelconque au VEP, incluant la distorsion. Dans la présente étude, où aucune distorsion n'est modélisée, le déplacement de ces nœuds auxiliaires correspond à l'allongement ou à la contraction de la cellule périodique selon la direction i .

Chacune des paires périodiques de nœuds est pour cela cinématiquement contrainte à l'un de ces nœuds auxiliaires (en fonction de la position des particules dans le VEP). Le déplacement u_i^{aux} du nœud auxiliaire associé à la direction i induit alors un déplacement relatif ($u_i^{n\alpha+}$ et $u_i^{n\alpha-}$) des nœuds n de la particule α et de sa particule dupliquée suivant la direction i , selon l'équation 2.14 et tel que présenté figure 2.11 et figure 2.12.

8. A l'aide d'éléments surfaciques de type SFM3D4R sans rigidité mécanique ni masse.

$$\underline{u_i^{n\alpha^+}} - \underline{u_i^{n\alpha^-}} + \underline{u_i^{aux}} = \underline{0} \quad (2.14)$$

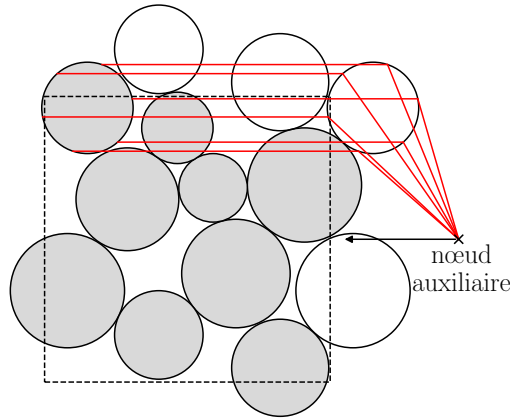


FIGURE 2.11 – Représentation schématique des CLP.

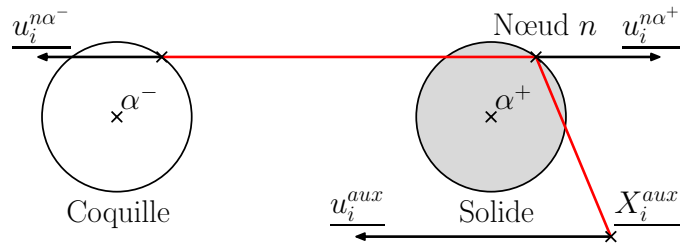


FIGURE 2.12 – Représentation des couplages introduits en cas de périodicité totale, basée sur le travaux de Schmidt et al.

Bien que les particules périodiques générées pour l'application des CL ne soit affectées à aucun matériau, une répartition des forces de contact entre les paires de particules principales et les paires périodiques existe en raison de l'utilisation d'équations de couplage. Ces forces entre particules coquilles dupliquées sans rigidité mécanique sont en fait associées aux contacts périodiques entre particules solides du VEP. Comme expliqué [annexe C](#), elles ont donc également dû être prises en compte pour le calcul de la contrainte mésoscopique (équation 2.6). Les coordonnées et les déplacements des centres de masse de ces particules dupliquées, nécessaires pour le calcul des contraintes, ne sont pas directement définis et ne peuvent donc pas être exportés. La position initiale des centres de masse des particules périodiques a donc été obtenue par translation des positions associées à la sphère principale connaissant les dimensions du VEP. Leurs déplacements ont eux été calculés à l'aide de l'équation 2.14 en exportant le déplacement des trois nœuds auxiliaires.

2.5.3.2 Étude de la convergence

Dans le cas de CLP, telles que développées par Schmidt et al., la [figure 2.13](#) montre qu'un nombre nettement inférieur de particules dupliquées est nécessaire pour l'application des CL. La déformation complète des particules dupliquées étant prise en compte avec ce type de CL, il semble logique qu'une valeur inférieure de d_{bc} soit alors suffisante. La valeur minimale de d_{bc}/r_{max} permettant d'empêcher les particules de s'échapper du VEP est de 1,6, en laissant qui plus est la moitié des facettes du VEP sans particule dupliquée ([figure 2.10](#)). La [figure 2.13](#) montre

qu'une valeur légèrement supérieure ($d_{bc}/r_{max} = 1,8$) est suffisante pour permettre la stabilisation des résultats. Ceci provient probablement du fait de l'apparition de nouveaux contacts au cours de la compression, qui ne peuvent pas être pris en compte sans avoir dupliqué suffisamment de particules. En plus de dupliquer un nombre inférieur de particules, le nombre de degrés de liberté du modèle est également réduit par l'utilisation de particules coquilles réduisant drastiquement le nombre de nœuds dans le modèle numérique. Une fois encore, la contrainte déviatoire s'éloigne de zéro pour le chargement isotrope, mais se stabilise toutefois à un plateau débutant à une déformation volumique de $h_v = -0,17$, confirmant l'idée d'une anisotropie initiale de l'échantillon numérique qui semble disparaître au cours du chargement.

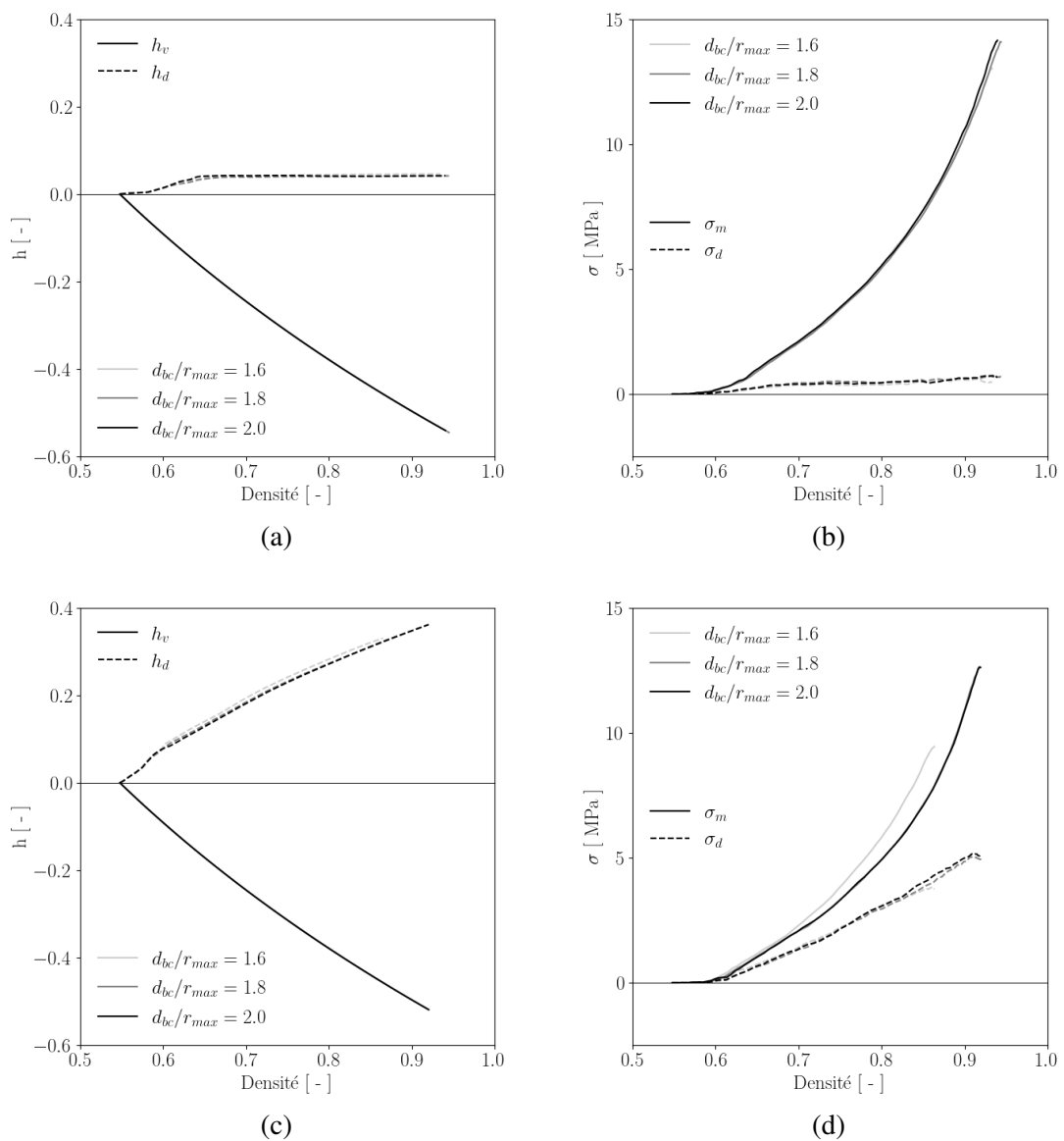


FIGURE 2.13 – (a,c) déformation et (b,d) contrainte en fonction de la densité relative pour un chargement (a,b) isotrope et (c,d) en matrice, dans le cas de CLP.

2.5.4 Conditions aux limites périodiques simplifiées (CLPS)

2.5.4.1 Description

Enfin, le quatrième type de CL étudié correspond à une approche de CLP simplifiées, telles que proposées par Loidolt et al. [102]. Cette méthode consiste à ne coupler les particules opposées que par l'intermédiaire de leurs nœuds de référence, eux-mêmes couplés aux particules via un couplage de distribution tel que représenté figure 2.14 et figure 2.15.

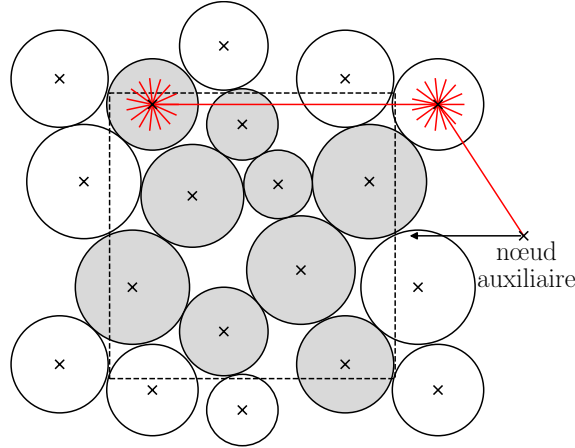


FIGURE 2.14 – Représentation schématique des conditions aux limites périodiques simplifiées.

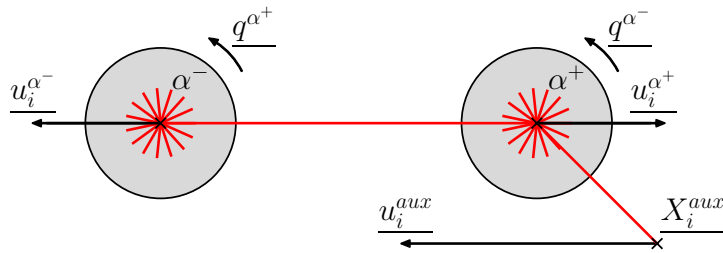


FIGURE 2.15 – Représentation des couplages introduits en périodicité simplifiée, basée sur les travaux de Loidolt et al.

Contrairement à la méthode introduite par Schmidt et al. [97, 98, 107], cette approche de couplage par points de référence a l'avantage de ne nécessiter qu'un nombre relativement faible d'équations de couplage pour l'application des CL, simplifiant la construction du modèle numérique. Les nœuds de référence sont couplés à l'aide d'une équation de couplage similaire à celle utilisée en périodicité totale (équation 2.14) :

$$\underline{u}_i^{\alpha^+} - \underline{u}_i^{\alpha^-} + \underline{u}_i^{aux} = \underline{0} \quad (2.15)$$

où $\underline{u}_i^{\alpha^+}$ et $\underline{u}_i^{\alpha^-}$ correspondent aux déplacements des points de référence de la particule α et de sa particule dupliquée dans la direction i , et \underline{u}_i^{aux} au déplacement du nœud auxiliaire associé à la direction i . Afin d'obtenir un empilement périodique, la rotation des points de référence des particules couplées (\underline{q}^{α^+} et \underline{q}^{α^-}) est également contrôlée selon l'équation 2.16 conjointement à l'équation 2.15.

$$\underline{q}^{\alpha^+} - \underline{q}^{\alpha^-} = \underline{0} \quad (2.16)$$

2.5.4.2 Étude de la convergence

Dans le cas de périodicité simplifiée, les résultats présentés [figure 2.16](#) commencent à se superposer pour $d_{bc} = 1,5r_{max}$. La densité finale devient proche de ρ_f pour $d_{bc} = 2,5r_{max}$, bien que la déformation des particules périphériques n'ait pas été entièrement prise en considération. Une explication possible de cette observation pourrait résider dans la liberté de réagencement accrue laissée aux particules, pouvant améliorer la densification. Toutes les valeurs de ρ_f fournies ci-dessus correspondent à un chargement en matrice ; une tendance comparable est observée dans le cas du chargement isotrope. Avec un VEP constitué de 50 particules, les dimensions de la cellule périodique sont de l'ordre de $6r_{max}$. Un ratio d_{bc}/r_{max} supérieur à 2,5 induit donc la création simultanée de particules dupliquées (et donc d'équations de couplage) sur les deux facettes opposées du VEP, sur-contraignant le système.

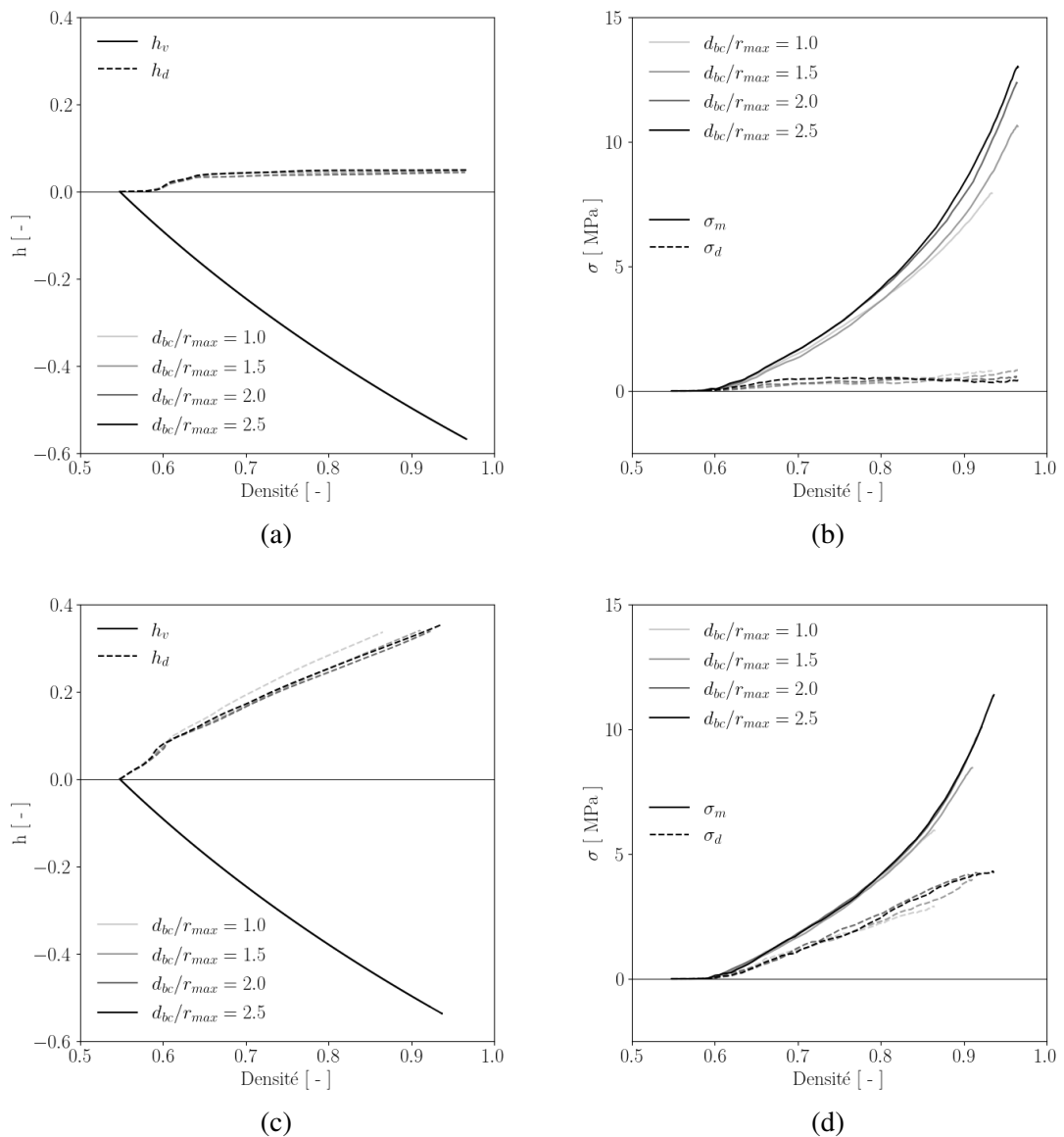


FIGURE 2.16 – (a,c) déformation et (b,d) contrainte en fonction de la densité relative pour un chargement (a,b) isotrope et (c,d) en matrice, dans le cas de CLP simplifiées.

2.6 Vérification de l'implémentation des fonctions de post-traitement

Un empilement périodique cubique simple, constitué de 8 particules principales et de 12 particules dupliquées en éléments coquilles (figure 2.17), est utilisé afin de valider l'implémentation des différentes fonctions de post-traitement, dans le cas d'une compression isotrope et en matrice. Des CLP sont pour cela utilisées. L'empilement cubique simple étant parfaitement ordonné, aucune particule n'a été dupliquée dans les coins du VEP. La densité ρ est calculée par le ratio du volume occupé par les particules V_p sur le volume associé au VEP V_{VEP} (équation 2.17). Les déplacements appliqués aux trois nœuds auxiliaires sont calculés afin d'atteindre une densité finale $\rho_f = 0,95$ en fin de compression.

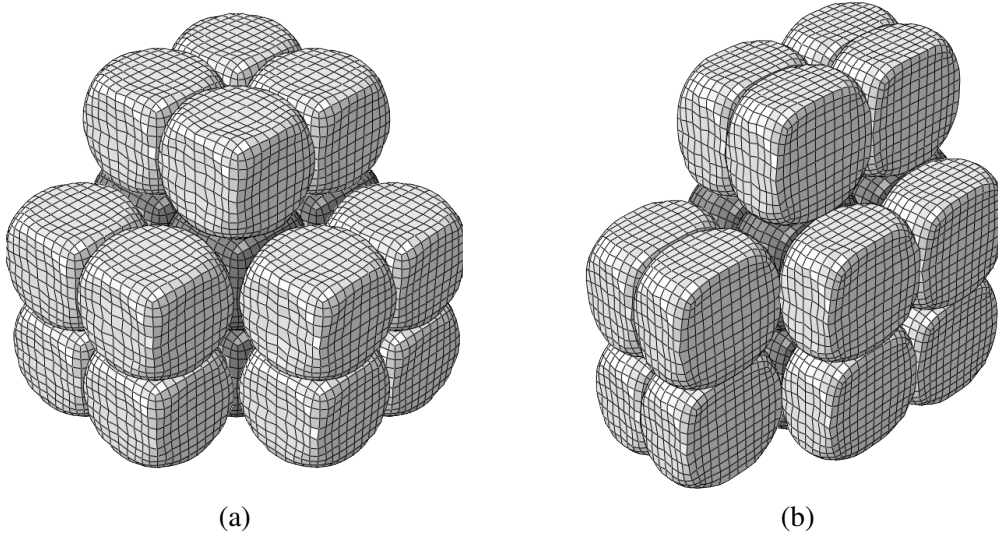


FIGURE 2.17 – Géométrie dans la configuration déformée d'un empilement cubique simple, constitué de 8 particules principales initialement sphériques (en sombre) et de 12 particules périodiques (en claire), soumis à un chargement (a) isotrope et (b) en matrice.

$$\rho = \frac{V_p}{V_{VEP}} = \frac{\pi}{6 \det \underline{\underline{F}}} \quad (2.17)$$

Dans le cas d'un tel assemblage parfaitement ordonné, l'absence totale de réagencement induit un déplacement homogène des particules. Il est dès lors possible de déduire le tenseur gradient des déplacements directement du déplacement $\underline{\underline{u}}$ aux nœuds auxiliaires et ainsi de calculer le tenseur des déformations de Hencky à l'aide de l'équation 2.18.

$$\underline{\underline{h}} = \frac{1}{2} \ln \left(\underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{\nabla}}^T \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{u}} \cdot \underline{\underline{\nabla}}^T \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{I}} \right) \quad (2.18)$$

La figure 2.18 montre que la compacité d'un empilement cubique simple est bien retrouvée en début de compression et que celle-ci atteint bien une densité relative $\rho_f = 0,95$ en fin de simulation. La superposition parfaite des courbes obtenues pour l'essai isotrope et celui en matrice justifie la pertinence de l'utilisation de l'invariant h_v pour représenter la variation relative du volume des échantillons dans le cadre des grandes transformations⁹.

Le calcul du tenseur de Hencky est validé en comparant les déformations calculées par l'ajustement aux moindres carrés (méthode décrite annexe C) aux déformations $\tilde{\underline{\underline{h}}}$ calculées dans le

9. Il est d'ailleurs possible de remarquer qu'il n'en va pas de même avec l'invariant ε_v , défini de manière similaire à partir du tenseur des déformations de Green-Lagrange.

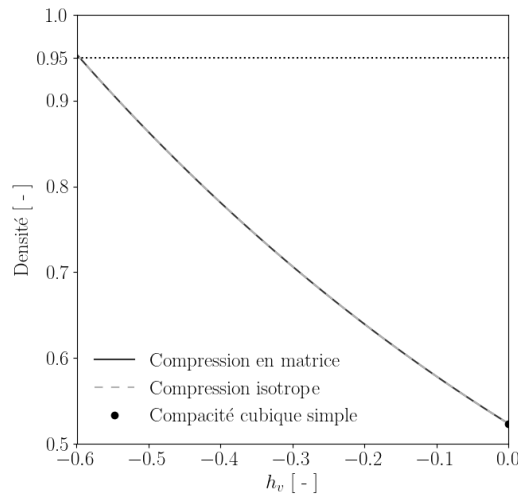


FIGURE 2.18 – Évolution de la densité, calculée à partir du tenseur gradient de la transformation, en fonction de la déformation sphérique, pour un chargement isotrope et en matrice.

cadre des grandes déformations à partir du déplacement des nœuds auxiliaires (équation 2.18). La figure 2.19 illustre la parfaite superposition des prédictions de ces deux méthodes.

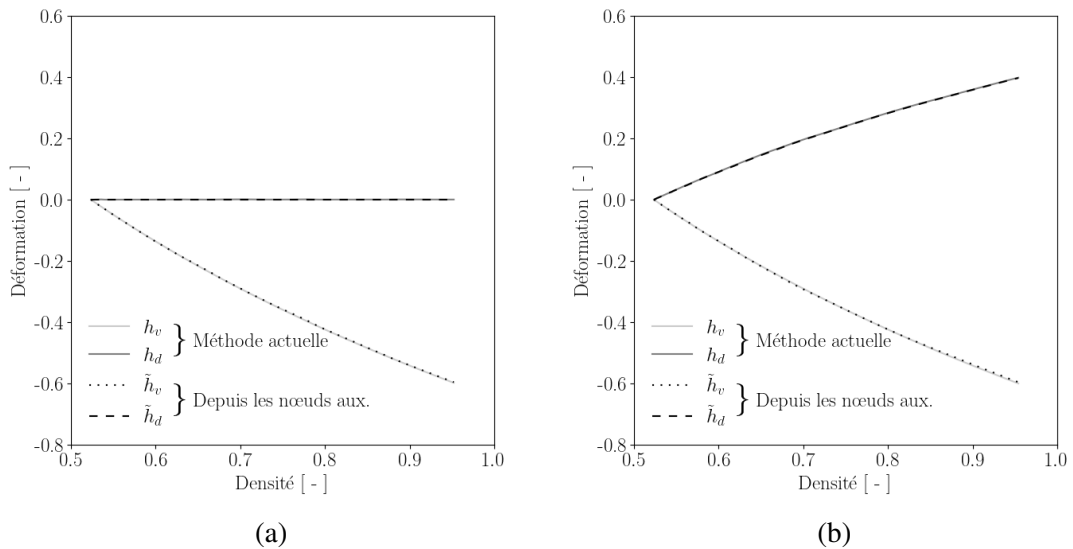


FIGURE 2.19 – Comparaison entre le calcul des déformations effectué par la méthode de minimisation en moindres carrés et à partir du déplacement des nœuds de pilotage, pour un empilement cubique simple et un chargement (a) isotrope et (b) en matrice.

Le calcul des contraintes par la méthode de Love-Weber [108, 109] (décrit annexe C) est quant à lui validé en comparant les résultats obtenus par cette méthode aux contraintes $\tilde{\sigma}$ calculées à partir des forces de réaction aux nœuds auxiliaires. Pour la même raison (absence de réagencement au sein de la cellule cubique simple), la géométrie déformée de la cellule périodique peut être directement déduite du déplacement des nœuds auxiliaires. Il est alors possible d'obtenir le tenseur des contraintes mésoscopiques de Cauchy par un simple rapport entre la force de réaction aux nœuds auxiliaires (grâce à la variable RF d'*Abaqus*) et la surface associée, déterminée grâce à la connaissance des déplacements des nœuds de pilotage. Une nouvelle fois (figure 2.20), une

correspondance parfaite entre les deux méthodes est observée.

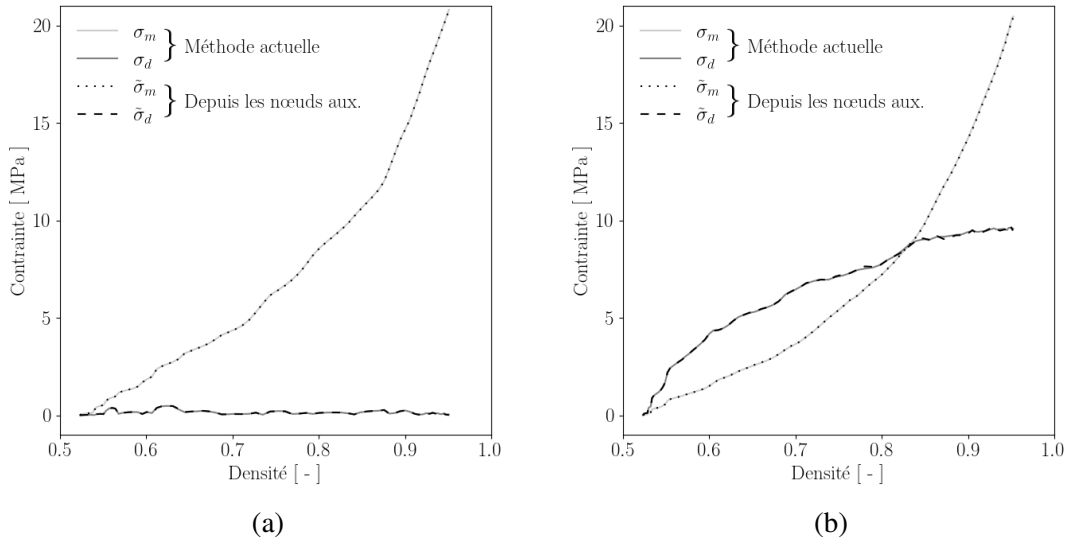


FIGURE 2.20 – Comparaison entre le calcul des contraintes effectué par la méthode de Love-Weber décrite ci-dessus et le calcul direct grâce à la connaissance des forces de réaction et déplacements des nœuds de pilotage, pour un empilement cubique simple et un chargement (a) isotrope et (b) en matrice.

Une seconde validation du calcul des contraintes utilisant la formule de Love-Weber [108, 109] est par ailleurs effectuée sur un empilement de 50 particules avec des CLP. Schmidt [99] a en effet observé que les composantes des forces de réaction aux nœuds auxiliaires, divisées par les surfaces initiales associées (connues à partir de la cellule périodique initiale), étaient égales aux composantes du premier tenseur des contraintes mésoscopique de Piola-Kirchhoff $\underline{\underline{P}}$. Plus précisément, soit A_j l'aire de la face de normale \underline{x}_j ($j = 1, 2, 3$) d'une cellule périodique initialement parallélépipédique. Si F_i^j désigne la $i^{\text{ème}}$ composante de la force de réaction au nœud auxiliaire X_j^{aux} , alors $P_{ij} = F_i^j / A_j$. Le tenseur des contraintes mésoscopique de Cauchy est alors déduit de la relation :

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \frac{1}{\det \underline{\underline{F}}} \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{F}}^T \quad (2.19)$$

Cette méthode de calcul des contraintes convient dans le cas de la périodicité totale (CLP), mais n'est cependant pas adaptée aux autres méthodes dans lesquelles d'autres particules solides sont ajoutées. En effet, les forces de réaction aux nœuds auxiliaires résultent de l'ensemble des contacts du modèle numérique ; et pas uniquement de ceux impliquant des particules du VEP. Il est toutefois possible de comparer, dans le cas de périodicité totale, les calculs des contraintes effectués à l'aide de la formule de Love-Weber et à l'aide de la méthode proposée par Schmidt [99]. Comme le montre figure 2.21, les prédictions offertes par ces deux méthodes sont quasiment identiques.

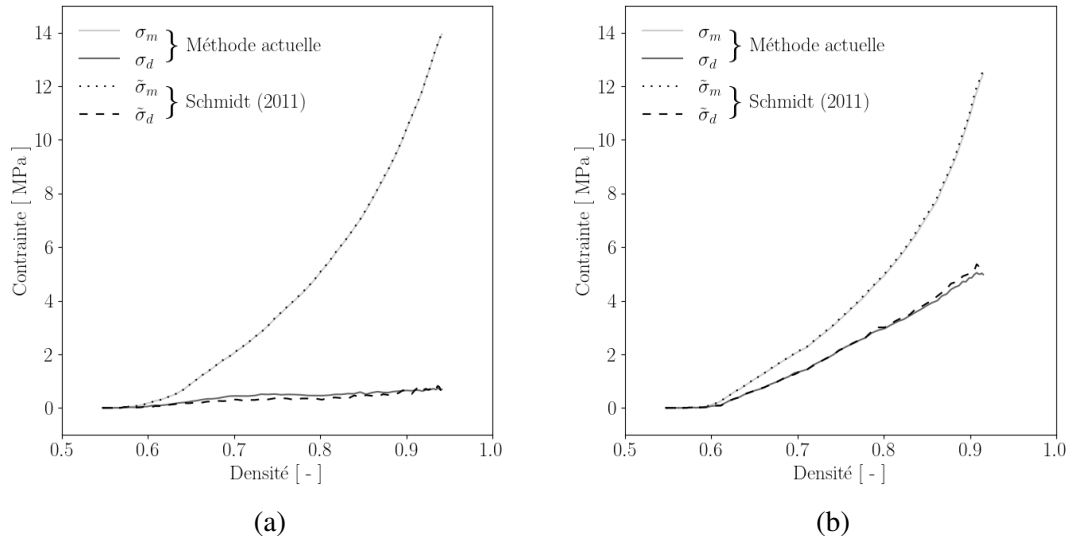


FIGURE 2.21 – Comparaison entre le calcul des contraintes effectué par la méthode de Love-Weber décrite ci-dessus et par la méthode proposée par Schmidt [99], dans le cas de CLP et sur un VEP constitué de 50 particules, pour un chargement (a) isotrope et (b) en matrice.

2.7 Comparaison des différents types de conditions aux limites

Les différents types de CL utilisés dans cette étude sont rappelés dans le [tableau 2.2](#). Ils seront dénommés dans la suite par leurs acronymes.

Acronyme	Type de CL	Description
GDH	Gradient de déplacement homogène	Déplacement imposé à toutes les particules suivant un tenseur \underline{F} (ou \underline{h}) donné.
GDF	Gradient de déplacement imposé aux frontières	Déplacement imposé aux particules extérieures suivant un tenseur \underline{F} (ou \underline{h}) donné, particules du VEP laissées libres.
CLPS	Conditions aux limites périodiques simplifiées	Périodicité imposée aux points de références des paires de particules périodiques.
CLP	Conditions aux limites périodiques	Périodicité complète, imposée à tous les noeuds des paires de particules périodiques.

TABLEAU 2.2 – Récapitulatif des différents types de CL utilisés dans la présente étude.

Le [tableau 2.3](#) récapitule, pour les différents types de CL étudiés, les valeurs de d_{bc}/r_{max} permettant d’obtenir des résultats stabilisés, dans le cas d’un VEP constitué de 50 particules.

Conditions aux limites	d_{bc}/r_{max}	Particules	Nœuds
CLP	1,8	121	44 000
Autres CL	2,5	346	194 000

TABLEAU 2.3 – d_{bc}/r_{max} , nombre de particules et nombre de nœuds nécessaire pour obtenir des résultats stabilisés, avec les différents types de CL étudié, pour un VEP de 50 particules.

À l’exception des CLP, les trois autres types de CL nécessitent l’utilisation d’un ratio $d_{bc}/r_{max} \geq 2,5$ pour atteindre la stabilisation des résultats. Ce ratio correspond en quelque sorte à une estimation de l’échelle typique des effets de bord. Ces trois types de CL ont comme point commun que les particules en bordure d’échantillon ne sont pas chargées par des contacts externes (en d’autres termes, ces particules ne sont pas entièrement confinées). Cet effet devient particulièrement frappant dans le cas de CL de type GDH, ce type de CL pouvant en effet être exécuté avec $d_{bc} = 0$, auquel cas il conduit à des contraintes significativement différentes ([figure 2.6](#)). Au vu de ces observations, il semble raisonnable de supposer que 2 à 3 rangées de particules soient nécessaires pour retrouver des forces de contact réalistes en bordure de VEP.

La [figure 2.22](#) représente le nombre de particules et de nœuds dans le modèle numérique en fonction de d_{bc}/r_{max} . Le ratio de particules dupliquées est défini comme le rapport du nombre total de particules incluses dans l’échantillon numérique (particules principales appartenant au VEP + particules dupliquées) sur le nombre de particules constituant le VEP, ayant varié entre 50 et 1000. Dans le cas de la périodicité totale, seul un modèle à 50 particules a été étudié, pour des raisons qui apparaîtront plus clairement par la suite. Pour une distance donnée d_{bc} , le nombre de nœuds est inférieur dans le cas d’une périodicité totale ([figure 2.22b](#)) pour deux raisons : (i) les particules dupliquées ne sont créées que sur la moitié des faces du VEP ([figure 2.10a](#)) et (ii) les particules dupliquées sont des éléments coquilles composées d’un nombre réduit de nœuds comparé à des particules solides. La périodicité totale a donc un net avantage sur le nombre de degrés de liberté associé au modèle numérique.

La [figure 2.23](#) présente une comparaison du temps de calcul requis par les différentes méthodes présentées ci-dessus, dans le cas du VEP de 50 particules. Comme énoncé ci-dessus, une augmentation du paramètre d_{bc} amène à une augmentation du nombre de nœuds et par conséquent

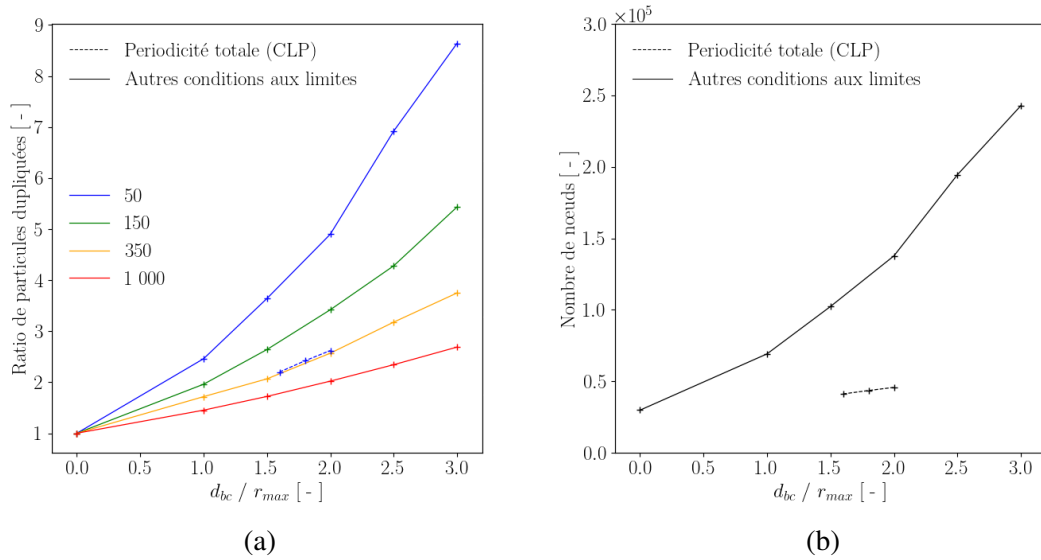


FIGURE 2.22 – (a) Ratio de particules dupliquées en fonction de d_{bc}/r_{max} et (b) nombre de nœuds en fonction de d_{bc}/r_{max} , pour un VEP constitué de 50 particules, pour les différents types de CL.

du temps de calcul. Il convient de rappeler que pour cette étude, l'intégralité des simulations a été exécutée avec un seul CPU dans l'optique de s'affranchir d'éventuelles différences liées à la gestion des équations de couplage dans le contexte d'une parallélisation des calculs. Comme le montre la figure 2.23, les CLP nécessitent un temps de calcul entre 4,5 et 10 fois plus long que les autres types de CL, bien que le nombre de degrés de liberté associé soit 4,5 fois inférieur. Cette différence est causée par la gestion du grand nombre d'équations de couplage par le logiciel *Abaqus*, ralentissant drastiquement la simulation.

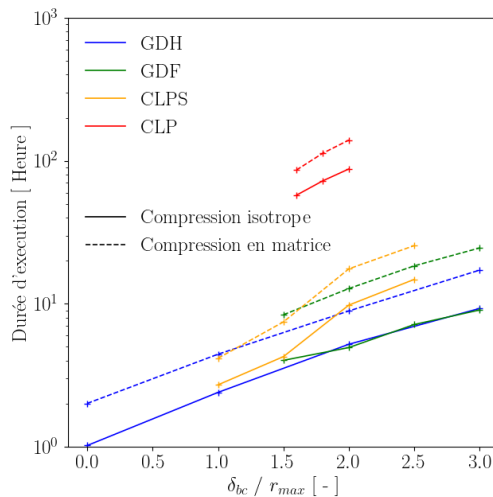


FIGURE 2.23 – Temps de calcul en fonction de d_{bc}/r_{max} , pour un VEP de 50 particules, avec les différents types de CL. Les simulations sont exécutées sur un seul CPU.

La figure 2.24 compare les résultats stabilisés obtenus à l'aide des différents types de CL, dans le cas du VEP de 50 particules. Le ratio d_{bc}/r_{max} a été fixé à 1,8 pour les CLP et à 2,5 pour les autres types de CL. Dans cette comparaison, les CLP sont considérées comme référence, ces CL prenant intégralement en compte la déformation des particules en bordure d'échantillon et étant

ainsi plus réalistes.

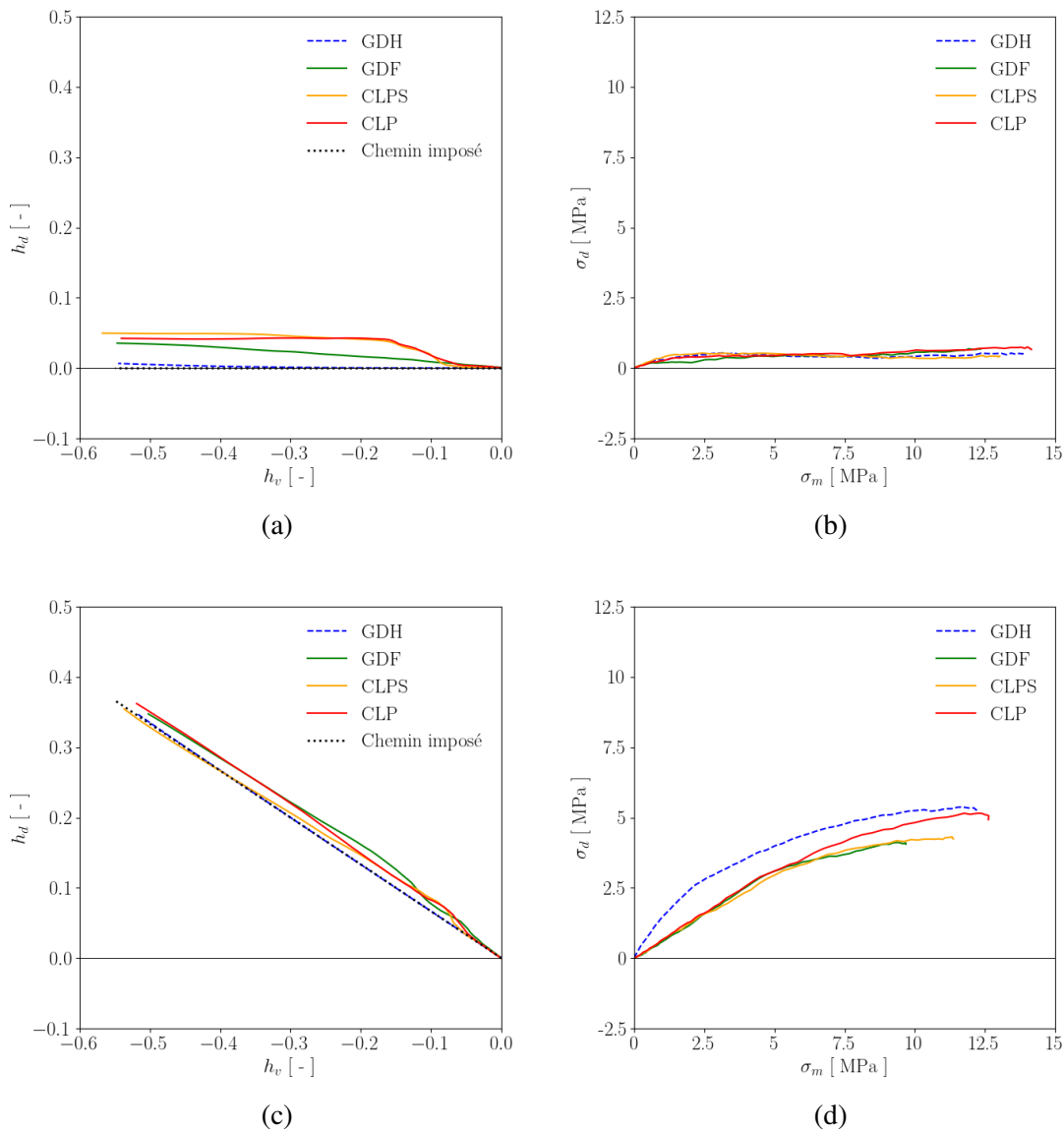


FIGURE 2.24 – (a,c) Déformations et (b,d) contraintes dans le plan isotrope/déviatoire, pour un chargement (a,b) isotrope et (c,d) en matrice, pour un VEP de 50 particules.

Comme illustré figure 2.24, les chemins de contrainte et de déformation ne sont que peu affectés par le type de CL utilisé. La figure 2.24a montre que la déformation déviatoire diffère de l'origine dans le cas du chargement isotrope, hormis dans le cas des CL de type GDH pour lequel le déplacement est imposé à toutes les particules du système. Les CLP et CLPS prédisent une valeur de h_d se stabilisant après une réduction de volume d'environ 15 % ($h_v = \ln(V/V_0) \simeq -0,17$). En imposant le déplacement aux particules dupliquées, h_d augmente en revanche progressivement. De façon similaire, dans le cas d'une compression en matrice (figure 2.24c), la courbe représentant la déformation déviatoire h_d en fonction de la déformation volumique h_v pour les CLP devient parallèle au chemin de déformation imposé (très proche du chemin de déformation obtenu avec les CL de type GDH) pour $h_v \simeq -0,11$. Ce comportement est attribué à une anisotropie initiale du VEP, celui-ci étant devenu plus isotrope suite à une phase de réagencement. Seuls les CLP et, dans une moindre mesure, les CLPS capturent ce comportement. Une telle observation est cohérente avec le fait que les deux types de CL périodiques offrent plus de liberté aux mouvements

des particules que les deux autres types de CL, du moins pour des chargements modérés. De tels résultats n'avaient pas pu être observés lors des études antérieures telles que celles de Harthong et al. [96] ou de Schmidt et al. [107], dans lesquelles la déformation imposée était assimilée à la déformation mésoscopique. Dans le présent travail, la déformation a été ajustée à partir des données de post-traitement ; et il a été constaté que celle-ci différait en réalité de la déformation imposée.

Les chemins de chargement (figure 2.24b et figure 2.24d) observés sont similaires pour les différents CL étudiés, à l'exception des CL de type GDH dans le cas du chargement en matrice, pour lequel la contrainte déviatoire observée est supérieure pour une même pression hydrostatique. La contrainte moyenne en fin de simulation est toutefois significativement différente, principalement pour les CL de type GDF, pour lesquelles elle atteint seulement 9,7 MPa dans le cas de la compression en matrice (contre environ 12,6 MPa pour les CLP et 11,3 MPa pour les CLPS). Dans le cas de la compression isotrope, une tendance similaire est observée.

La figure 2.25 représente la contrainte moyenne en fonction de la déformation volumique pour les différents types de CL étudiés, pour des chargements isotropes et en matrice. Dans les deux cas, les courbes σ_m vs. h_v obtenues à partir des CLP et des CLPS se superposent pour des valeurs de déformation faibles. Cette observation s'explique en considérant que la déformation des particules en bordure d'échantillon est négligeable en début du chargement, supprimant ainsi la différence entre ces deux types de CL. Pour cette plage de déformation, la contrainte moyenne est inférieure pour les CLP et les CLPS que pour les CL non-périodiques (GDH et GDF). Cette réponse plus rigide obtenue pour les CL non-périodiques pour des faibles valeurs de h_v s'explique en remarquant que le fait d'imposer le déplacement aux particules dupliquées (et, sans surprise, à toutes les particules) conduit à sur-contraindre le VEP.

Dans le cas de CLP, la contrainte moyenne est devenue, pour des valeurs plus élevées de h_v , supérieure à celles prédites par les autres types de CL. En particulier, pour un essai de compression isotrope (figure 2.25a), les résultats obtenus en périodicité totale et simplifiée commencent à différer des autres types de CL pour $h_v = -0,17$, ce qui correspond au début du plateau observé figure 2.24a. Il est alors raisonnable de supposer que cette valeur correspond à la fin d'une certaine phase de réagencement, après laquelle la déformation des particules devient prépondérante. Pour la compression en matrice (figure 2.25b), une valeur plus petite (environ $-0,11$) est observée. Cette valeur semble cohérente avec celle pouvant être observée figure 2.24c. La réponse plus rigide des CLP pour de grandes valeurs de h_v peut être interprétée comme le fruit de la meilleure précision offerte par cette méthode. Contrairement aux autres types de CL, les CLP prennent en effet intégralement en compte la déformation des particules en bordure d'échantillon. Par conséquent, les CL autres que les CLP amènent à sous-estimer l'état de contrainte, ceci même en augmentant la valeur du paramètre d_{bc} . Il convient toutefois de remarquer que cet écart reste limité (inférieur à 20 %).

En considérant les CLP comme référence, les résultats obtenus indiquent que l'utilisation de CL plus simples amène à une sous-estimation de la rigidité apparente du système. Une interprétation possible de ce phénomène est que les forces appliquées par les particules dupliquées sur les particules du VEP sont sous-estimées, leurs déformations n'étant pas complètement capturées. Aucune autre différence significative n'a été observée, ce qui suggère que le nombre de particules incluses dans l'échantillon numérique était suffisant pour tous les types de CL testés, en gardant à l'esprit que la distance d_{bc} a été augmentée jusqu'à ce que la contrainte et la déformation se soient stabilisées, ce qui explique probablement ce résultat. En outre, Loidolt et al. [102] et Schmidt et al. [107] avaient tous deux conclu que l'augmentation du nombre de particules au-delà de 50/70 (respectivement) n'affectait pas beaucoup le calcul de la contrainte moyenne. Ce résultat semble être retrouvé dans la présente étude.

Au vu des résultats présentés figure 2.23 et figure 2.24 (qui comparent les résultats stabilisés obtenus à partir des différents types de CL), la gestion non-optimale des équations de couplage par le logiciel *Abaqus* conduit à une explosion de la durée des simulations dans le cas de l'utilisation de CLP. L'intérêt de cette méthode, réduisant drastiquement le nombre de particules et de nœuds

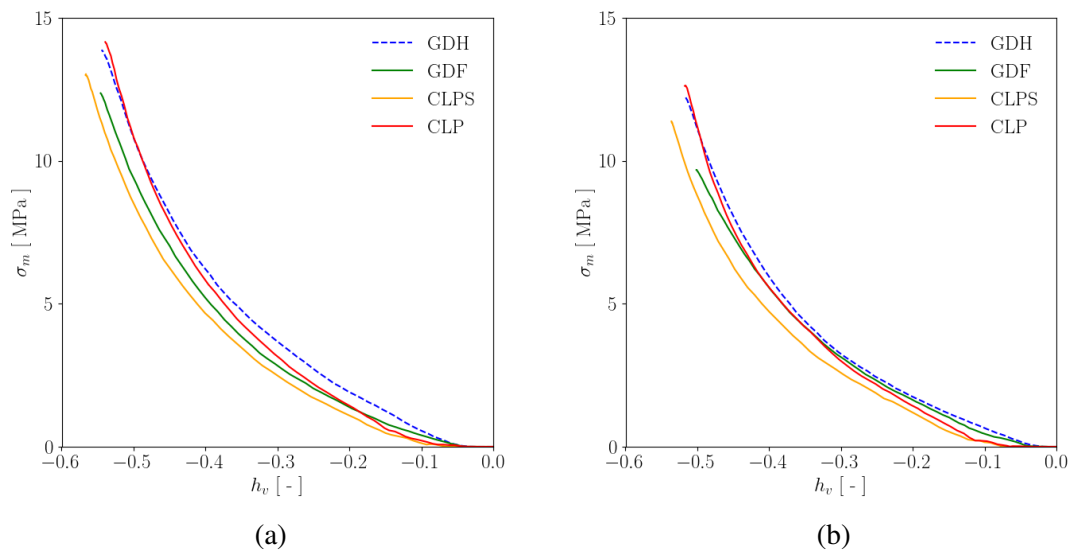


FIGURE 2.25 – Courbes contrainte moyenne-déformation volumique associées aux chargements (a) isotropes et (b) en matrice, pour un VEP de 50 particules.

nécessaires comme observé [figure 2.22](#) et étant intrinsèquement la meilleure (et pouvant ainsi être utilisée comme référence), s'avère peu propice à une application pratique. Les CLPS, contenant également un certain nombre d'équations de couplage et autant de degrés de liberté que les CL de type GDF, nécessitent un coût de calcul plus élevé sans pour autant améliorer sensiblement les résultats.

A ce stade, et sans considérer le cas des CL de type GDH vues comme irréalistes, qui ne présentent pas d'intérêt autre que de vérifier, dans la présente comparaison, l'effet de la déformabilité des particules et du réagencement, il est donc possible de résumer les résultats actuels de la manière suivante :

1. Les CLP permettent la réduction du paramètre d_{bc} et ainsi du nombre de particules devant être incluses dans le modèle numérique.
2. Avec l'utilisation du logiciel *Abaqus*, et en comparaison avec les autres méthodes étudiées, les CLP requièrent un coût de calcul très élevé.
3. Les CLPS et CL de type GDF prédisent des chemins de contrainte et de déformation très similaires, proches de ceux obtenus à l'aide des CLP.
4. La principale différence entre les différents types de CL réside dans la valeur finale atteinte par la contrainte moyenne, significativement plus grande dans le cas de CLP. La rigidité apparente est ainsi sous-estimée avec l'utilisation de CLPS et de CL de type GDF.
5. Les CLPS et les CL de type GDF induisent des coûts de calcul du même ordre de grandeur (légèrement supérieurs dans le cas des CLPS).

2.8 Étude de l'influence du nombre de particules

Des simulations ont ensuite été effectuées dans l'optique d'étendre les résultats de cette étude aux cas de VEP de taille supérieure. Les CL de type GDF ont pour cela été retenues. La figure 2.26 représente les invariants de contrainte et de déformation en fonction de la densité relative, ce pour quatre tailles de VEP différentes, variant entre 50 et 1 000 particules. Les résultats présentés sont obtenus pour un chargement isotrope, dans le cas de CL de type GDF, avec $d_{bc}/r_{max} = 2,5$.

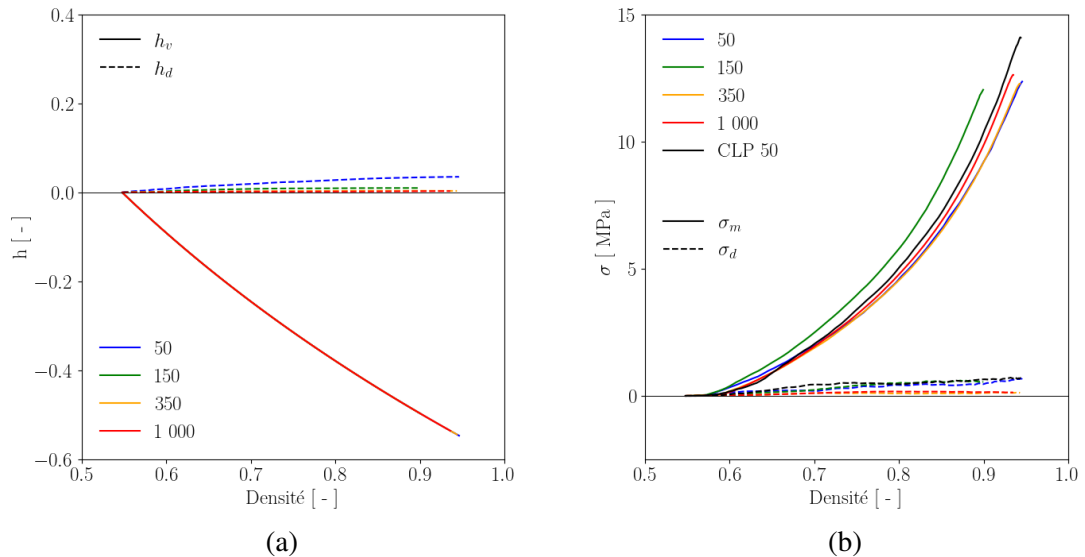


FIGURE 2.26 – Impact du nombre de particules au sein du VEP sur les prédictions de (a) la déformation mésoscopique et (b) la contrainte mésoscopique pour une compression isotrope, dans le cas de CL de type GDF, avec $d_{bc}/r_{max} = 2,5$. Le chemin de chargement obtenu à l'aide d'un VEP de 50 particules et de CLP avec $d_{bc}/r_{max} = 1,8$ est également représenté (en noir) en tant que référence.

Les différences résultant d'une augmentation du nombre de particules sont modérées¹⁰, ce qui est en accord avec les observations de Loidolt et al. [102] et Schmidt et al. [107], indiquant qu'un VEP 3D de respectivement 50 et 70 particules était suffisant pour obtenir des résultats stabilisés. Il est toutefois constaté que la contrainte déviatoire et la déformation déviatoire diminuent avec le nombre de particules, indiquant que le VEP devient de plus en plus isotrope. Ces observations amènent à penser que le faible nombre d'éléments entrant en jeu dans les sommes du calcul des contraintes et des déformations induit des imprécisions sur le calcul des grandeurs mésoscopiques et qu'un VEP de taille supérieure serait à utiliser pour plus de précision.

Il est également observé que les courbes représentant l'évolution de la contrainte moyenne en fonction de la densité relative convergent vers la courbe obtenue dans le cas de périodicité totale lorsque le nombre de particules dans le VEP augmente. Ce constat souligne une fois encore la pertinence des CLP. Dans le cas présent, aucune comparaison rigoureuse n'a été effectuée en termes de temps de calcul (nécessitant en effet de réaliser les simulations sur les mêmes machines, etc.), mais il est estimé que le temps de calcul requis pour un VEP de 50 particules dans le cas de CLP est sensiblement le même que celui d'un VEP de 350 particules dans le cas des CL de type GDF.

10. Ces observations se réfèrent à un chargement isotrope. Il est probable que les tailles caractéristiques entrant en jeu soient plus grandes pour des chargements induisant des taux de cisaillements supérieurs, en raison du glissement au niveau des contacts.

Les limites du logiciel *Abaqus* pour la gestion des équations de couplage ont empêché la comparaison des différents types de CL pour des échantillons de taille supérieure. Des échantillons de taille supérieure à 50 particules principales n'ont en effet pas pu être modélisés avec des CLP. Concernant la périodicité simplifiée (faisant également intervenir des équations de couplage dans une moindre mesure), il a été possible d'augmenter la taille des VEP jusqu'à 150 particules. Les résultats obtenus pour ce nombre de particules (avec les différentes CL à l'exception des CLP) sont très similaires à ceux présentés [figure 2.24](#).

2.9 Discussions et conclusions

Ce chapitre a proposé une étude portant sur l'impact de différents types de CL pouvant être appliquées aux frontières d'un échantillon granulaire numérique, vu comme un volume élémentaire dans le cadre de la MPFEM. En particulier, l'utilisation de CLP a ici été étudiée. Quatre types de CL, pourvues d'une précision (*a priori*) croissante, ont été testés : des CL de type GDH appliquées à toutes les particules, des CL de type GDF appliquées aux frontières de l'échantillon, des CLPS développées par Loidolt et al. [102] ainsi que des CLP introduites par Schmidt et al. [97]. Un même empilement initial (appelé VEP) périodiquement stable, constitué de 50 particules, a été utilisé dans ces quatre cas étudiés. Des particules supplémentaires ont été dupliquées autour de la frontière du VEP puis ajoutées au modèle pour permettre l'application des CL. Un nombre suffisant de particules dupliquées a été créé afin de s'assurer que les propriétés mésoscopiques associées au VEP (contrainte et déformation moyennes) ne dépendent plus du nombre de particules dupliquées. Les résultats du présent chapitre sont de deux types différents.

Premièrement, d'un point de vue purement pratique, les résultats obtenus ont montré que les CLP proposées par Schmidt et al. [97] permettent une réduction significative du nombre de particules (et donc de nœuds) devant être inclus dans le modèle MPFEM pour obtenir des résultats stabilisés. Malheureusement, ce net avantage en termes de degrés de liberté est contrebalancé par une augmentation drastique de la durée des simulations, attribuée aux difficultés associées au traitement des équations de couplage par le logiciel *Abaqus*. Les CL plus simples étudiées, nécessitant la modélisation d'un nombre supérieur de particules, conduisent toutefois à des simulations nettement plus rapides que celles avec les CLP. Une fois le nombre de particules ajusté pour obtenir la convergence des contraintes et déformations mésoscopiques, les chemins de déformation et de contrainte calculés à l'aide des différents types de CL étudiés restent très proches les uns des autres. Quelques différences mettant en lumière les limites des CL non périodiques sont toutefois observées ; la plus visible étant que la densité relative finale n'atteint pas la densité cible dans le cas de CL de type GDH et GDF. Les raisons expliquant ce constat ont été discutées ci-dessus. Par ailleurs, en comparaison avec les CL plus simples, les CLP prédisent, pour un même état de déformation, des valeurs de contraintes moyennes légèrement supérieures.

Il convient toutefois de rappeler que ces conclusions, concernant le coût numérique des CLP, restent limitées à l'utilisation du logiciel commercial *Abaqus*. En principe, la gestion des équations de couplage doit pouvoir être optimisée, de sorte que l'utilisation de CLP réduirait effectivement le temps de simulation tout en améliorant la précision des résultats. De tels résultats peuvent sembler quelque peu inattendus. Cependant, il convient d'insister sur le fait qu'il existe bel et bien une différence notable entre les CLP, CLPS et CL non-périodiques, portant sur le nombre de particules modélisées. Dans la présente étude, cette différence a été volontairement dissimulée en augmentant le nombre de particules modélisées dans le cas des CL moins précises. La conclusion de ce chapitre peut ainsi être reformulée de la manière suivante : tous les types de CL étudiés convergent vers des résultats comparables en termes de contraintes et de déformations mésoscopiques dès lors que suffisamment de particules sont introduites dans le modèle. L'utilisation de CLP permet d'atteindre la convergence des résultats à l'aide d'un nombre inférieur de particules, mais leur mise en œuvre entraînent des difficultés supplémentaires conduisant finalement à un coût de calcul prohibitif. D'autres auteurs (Schneider et al.[130]) ont abouti à des conclusions similaires en étudiant l'influence des conditions aux limites sur un volume élémentaire hétérogène modélisé en éléments finis.

Deuxièmement, la présente étude a permis de mettre en évidence et d'interpréter les différences entre les différents types de CL étudiés. Les résultats des deux études précédentes [102, 107], affirmant que des VEP d'environ 50 particules étaient suffisants pour obtenir des prédictions des contraintes moyennes et déviatoires acceptables, ont été confirmés (dans le cas présent, entre 50 et 350 particules sont nécessaires, en prenant ou non en compte les particules dupliquées dans cette estimation). Un empilement de 50 particules correspond approximativement à 3-4 rangées

de particules par direction, tandis qu'un empilement de 350 est composé d'environ 7 rangées de particules. Cette échelle correspond à la longueur nécessaire au calcul de la contrainte moyenne pour les chemins de chargement explorés ici, en gardant toutefois à l'esprit que des chargements plus déviatoires induiront certainement des effets de bords plus conséquents.

Les CL de type GDH, dans lesquelles le déplacement de chaque particule du modèle était imposé, n'ont été introduites qu'à des fins de comparaison. Cette méthode de chargement (qui ne peut pas être vue comme une vraie condition aux "limites") n'a pas été considérée comme physiquement acceptable puisqu'elle interdisait tout type de réagencement. Bien qu'elles ne soient que peu physiques, les CL de type GDH ont permis de souligner l'influence de la déformation des particules sur la réponse mécanique mésoscopique associée au VEP. Il a en effet été montré que la déformation des particules joue un rôle majeur à la fois sur la contrainte moyenne et sur la déformation moyenne. Par conséquent, dès lors que la déformation des particules aux limites ne pouvait pas correctement être prise en compte (seul les CLP y parvenaient), 2 à 3 rangées de particules dupliquées ont dû être ajoutées pour compenser cette limite. La déformation des particules a également affecté la contrainte moyenne pour des densités relatives de modérées à élevées. Un tel comportement est relié à l'incompressibilité plastique des particules (liée au matériau de Mises choisi) opposant une rigidité très élevée aux charges de compression et entraînant des différences de contrainte moyenne notables pour des différences relativement faibles de déformation ou de densité relative.

La comparaison présentée ci-dessus s'est focalisée sur le calcul de la contrainte et de la déformation mésoscopique. La [figure 2.27](#) représente la géométrie déformée et le champ de contrainte de von Mises au sein d'une particule située à proximité du centre du PEV, suite à un chargement en matrice imposé à l'aide des quatre types de CL étudiés. La [figure 2.27](#) montre une géométrie déformée différente dans chacun des cas. Les CL de type GDH, CLPS et CLP semblent comparables et diffèrent significativement du cas GDF. En particulier une contrainte de von Mises nettement supérieure est observée dans le cas GDF en raison de la présence d'un contact avec une autre particule en arrière ayant fortement indenté la particule. Cette observation microstructurale a révélé que la configuration de contact sur une particule donnée est significativement influencée par le type de CL utilisé. De manière très probable, les CL semblent affecter la cinématique des particules, en particulier leur réagencement se produisant principalement à chargements modérés et densités relatives faibles. Au cours de la densification, le réagencement se ralentit ensuite, laissant place à la déformation des particules. La géométrie des particules observées [figure 2.27](#) montre qu'à la fin de l'étape de réagencement, la structure des contacts au sein du VEP était différente entre les différents types de CL. L'influence des CL est donc liée par nature à la physique incluse dans le cadre du modèle MPFEM, dans lequel à la fois le mouvement de corps rigides et la déformation des particules ont une signification. La présente étude a révélé l'influence de ces deux phénomènes.

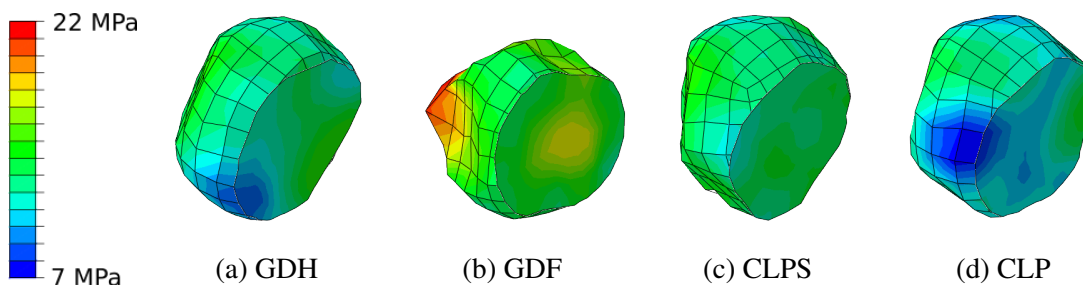


FIGURE 2.27 – Comparaison entre le champ de contraintes de von Mises et les géométries déformées au sein d'une particule localisé proche du centre du PEV, soumise à un chargement en matrice dans le cas de CL de type (a) GDH (b) GDF (c) CLPS et (d) CLP.

L'étude microstructurale présentée amène à se demander si ces résultats invalident une partie

des CL testées. Cette question reste ouverte. Cependant, il convient de noter que pour chacun des types de CL étudiés (sauf peut être les CL de type GDH), les phénomènes physique entrant en jeu¹¹ ont été pris en compte de manière réaliste par la MPFEM. Tous ces types de CL permettent ainsi d'étudier l'influence de ces phénomènes sur les propriétés mésoscopiques du VEP. En ce sens, les présents résultats montrent que n'importe quel type de CL pourrait être utilisé pour l'étude de la contrainte et de la déformation mésoscopiques, à moins que les différences microstructurales évoquées ci-dessus n'importent pour une quelconque raison. Chaque phénomène physique a sa propre échelle de longueur et sa propre taille VER. Il est ainsi tentant de supposer que les CLP devrait être conservées. Cependant, il n'y a aucune preuve réelle que ce soit le cas. En particulier, il est possible d'imaginer que d'autres paramètres, tels que la forme des particules, les propriétés de surface ou le frottement aient plus d'effet sur le réagencement que les méthodes d'applications des CL. Le choix approprié de CL doit donc être laissé à l'utilisateur, en fonction de l'application recherchée.

Une étude portant sur l'influence du nombre de particules a également été menée. Les résultats ont montré qu'une augmentation de la taille du VEP améliorerait légèrement la précision des résultats obtenus. Cependant, en raison des limites en termes d'équations de couplage induites par le logiciel *Abaqus*, les conclusions principales de cette étude sont restées limitées au cas d'un VEP constitué de 50 particules. Pour cette petite taille d'échantillon numérique, le nombre de particules dupliquées pour l'application des CL n'est pas du tout négligeable et a donc un impact énorme sur la durée des simulations. Une augmentation de la taille du VEP a pour conséquence directe de réduire l'impact relatif du nombre de particules dupliquées (figure 2.22). Il en résulte qu'il sera, en relatif, moins pénalisant d'augmenter la valeur du paramètre d_{bc} pour des échantillons de taille supérieure, et les bénéfices associés aux CLP diminueront. De façon similaire, et ce grâce à l'utilisation de particules dupliquées en éléments coquilles, la périodicité totale permet de réduire le nombre de nœuds et d'éléments utilisés dans la simulation permettant d'atteindre la stabilisation des résultats. Cependant, cet avantage devient relatif en augmentant la taille du VEP et est compensé négativement par le temps nécessaire pour le traitement du grand nombre d'équations de couplage requises par cette méthode.

Comme le montre les résultats sur la taille du VEP présentés figure 2.26, il semble ainsi plus judicieux de chercher à modéliser des VEP de taille légèrement supérieure (350 particules) que d'utiliser des CLP. En effet, pour des CL de type GDF, un temps de calcul de 7,1 h dans le cas d'un VEP de 50 particules et de 29,3 h dans le cas d'un VEP de 350 particules sont nécessaires pour obtenir des résultats stabilisés avec un unique CPU, tandis qu'une simulation de 72,4 h est requise pour les CLP dans le cas d'un VEP de 50 particules et que la gestion des équations de couplage par *Abaqus* empêche l'étude de VEP de taille supérieure.

11. A savoir la déformation et le réagencement des particules.

3

Loi de contact adhésive adaptée à la MPFEM

Ce chapitre présente le développement d'un modèle de contact adhésif multi-échelles adapté à la modélisation en éléments finis, son implémentation dans le logiciel éléments finis Abaqus, ainsi que sa validation théorique et expérimentale.

Sommaire

3.1	Introduction sur le phénomène d'adhésion	72
3.2	État de l'art sur les modèles de contact existant	73
3.2.1	Modèles de contact entre surfaces parfaites	73
3.2.2	Modèles de contact adaptés aux surfaces réelles	75
3.3	Formulation de la loi de contact adhésive	78
3.3.1	Principe physique de la loi de contact	78
3.3.2	Changement d'échelle et adaptation de la loi de contact à la simulation en éléments finis	78
3.3.3	Formulation de la partie tangentielle de la loi de contact	81
3.4	Validation de la loi de contact adhésive	83
3.4.1	Vérification de l'implémentation dans le logiciel éléments finis	83
3.4.2	Validation de la loi de contact dans sa forme simplifiée : comparaison avec les modèles de la littérature	84
3.5	Validation expérimentale de la loi de contact dans sa forme globale	89
3.5.1	Principe du dispositif expérimental	89
3.5.2	Description du protocole expérimental	92
3.5.3	Résultats expérimentaux	93
3.6	Conclusion	97

3.1 Introduction sur le phénomène d'adhésion

L'adhésion est un phénomène physique correspondant à l'attraction pouvant survenir lors de l'interaction entre deux surfaces en contact. Différents mécanismes physiques complexes peuvent être à l'origine de ces forces attractives :

- **des liaisons chimiques**, causées par des interactions inter-atomiques entre les deux surfaces en contact. Ces interactions peuvent être dues à des interactions électrostatiques de type van der Waals, mais également à des interactions ioniques ou covalentes, correspondant à des liaisons plus fortes que celles de van der Waals. Les liaisons chimiques sont directement liées à la composition chimique des surfaces en contact ;
- **des liaisons électrostatiques**, causées par des interactions dipolaires dues à la charge électrostatique des surfaces. Les liaisons électrostatiques surviennent dans le cas de surfaces polarisées ;
- **des liaisons capillaires**, causées par des forces interfaciales dans les liquides. Elles sont liées aux propriétés physiques des liquides pouvant être présents à l'interface entre les surfaces en contact, telles que leur tension superficielle ;
- **des enchevêtrements géométriques**, causés par la rugosité de surface. Dans le cadre du contact entre surfaces rugueuses, les aspérités en contact peuvent s'entrelacer entre elles, développant ainsi une adhésion mécanique.

L'adhésion inter-particulaire joue un rôle crucial dans le comportement mécanique des matériaux granulaires. Les forces adhésives entre les particules contribuent en effet au maintien de la cohésion du milieu granulaire. Elles sont donc directement liées aux mécanismes de fissuration et de rupture des matériaux granulaires. L'étude de l'adhésion inter-particulaire est donc un domaine d'importance cruciale pour la compréhension du comportement mécanique des matériaux granulaires soumis à des chargements mécaniques.

3.2 État de l'art sur les modèles de contact existant

Afin de construire un outil numérique capable de prédire les mécanismes de fissuration dans les milieux granulaires ductiles, il est nécessaire de développer des modèles de comportement permettant de décrire précisément les interactions entre particules, en prenant notamment en compte les phénomènes d'adhésion responsables de la fissuration. Une étude bibliographique axée sur les modèles de contact est ainsi présentée.

3.2.1 Modèles de contact entre surfaces parfaites

3.2.1.1 Modèles élastiques

En 1881, Heinrich Hertz [135], considéré comme le pionnier de la mécanique du contact, s'intéressa au contact entre deux solides élastiques de surfaces supposées continues et non-conformes¹, en résolvant le problème d'élasticité entre ces deux solides constitués de matériaux élastiques linéaires isotropes et homogènes soumis à un chargement purement normal à la surface de contact, sans friction ni adhésion. Hertz permit ainsi de prédire l'évolution de la surface de contact, le profil de pression dans la zone de contact, le profil de déflexion des surfaces, ainsi que les contraintes principales suivant l'axe normal au plan de contact, en fonction de la force extérieure F leur étant appliquée. Sous ces hypothèses et dans le cas de contacts entre sphères, Hertz arriva aux résultats suivants concernant l'évolution de la surface de contact (équation 3.1) :

$$a_H^3 = \frac{Fr}{E^*} \quad (3.1)$$

avec a_H le rayon du disque de contact, $r = r_1 r_2 / (r_1 + r_2)$ le rayon équivalent des sphères en contact et E^* le module de Young équivalent, défini par l'équation 3.2, où E représente le module de Young et ν le coefficient de Poisson du matériau. Les indices 1 et 2 font référence aux matériaux constitutifs de chacune des deux surfaces en contact.

$$E^* = \frac{4}{3} \left(\frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right)^{-1} \quad (3.2)$$

Motivées par des mesures expérimentales montrant que la surface de contact entre deux sphères était, dans de nombreux cas, supérieure à celle prédite par Hertz pour de faibles chargements, et qu'elle était non nulle pour un chargement extérieur nul, deux nouvelles théories restreintes au cas du contact entre sphères ont ensuite vu le jour sous ces mêmes hypothèses, en considérant en plus une force surfacique attractive d'adhésion dans la description de la surface de contact [136, 137] :

- la théorie de Johnson, Kendall et Roberts (*JKR*) [118], considérant une interaction énergétique entre les deux surfaces en postulant un équilibre entre l'énergie élastique stockée et la réduction d'énergie surfacique (énergie de Dupré², notée γ) causée par la mise en contact des deux corps. Cet équilibre énergétique entraîne une déformation élastique des sphères et, ainsi, augmente le rayon de la zone de contact a_{JKR} au-delà de la prédiction de Hertz (équation 3.3).

$$a_{JKR}^3 = \frac{r}{E^*} \left(F + 3\gamma\pi r + \sqrt{6\gamma\pi r F + (3\gamma\pi r)^2} \right) \quad (3.3)$$

- la théorie de Derjaguin, Muller et Toporov (*DMT*) [119, 120], postulant l'existence d'une force d'adhésion attractive (Théorie de Bradley) agissant en dehors de la zone de contact. Avec ce modèle, le profil du contact reste donc Hertzien, mais avec une charge globale plus

1. Définis localement par leurs rayons de courbure.

2. Il s'agit du travail d'adhésion, correspondant à l'énergie surfacique nécessaire à la création d'une surface.

élevée en raison de la présence de cette force attractive venant augmenter le rayon de contact a_{DMT} (équation 3.4).

$$a_{DMT}^3 = \frac{r}{E^*} (F + 2\pi\gamma r) \quad (3.4)$$

Ces deux modèles permettent de prédire une surface de contact non nulle à chargement nul, en accord avec les observations expérimentales. Ils n'offrent cependant pas les mêmes prédictions et ont pour cela longtemps été considérés comme antagonistes. Ce n'est qu'avec les travaux de Tabor [138] et de Muller et al. [121] qu'il fut montré qu'en réalité ces deux théories n'étaient pas contradictoires mais simplement des cas limites opposés, adaptés à des hypothèses différentes : le modèle *JKR* étant adapté aux sphères fortement déformables possédant des forces d'adhésion fortes et de courte portée devant le rayon des sphères ; le modèle *DMT* étant quant à lui valide pour des sphères rigides ayant des forces d'adhésion faibles et de portée non négligeable devant le rayon des sphères. Le paramètre de Tabor adimensionné μ_T a permis de définir les domaines d'application de ces deux modèles : Le modèle *JKR* étant valide pour $\mu_T \gg 1$, celui de *DMT* pour $\mu_T \ll 1$ [137].

$$\mu_T = \left(\frac{16r\gamma^2}{9E^*2z_0^3} \right)^{1/3} \quad (3.5)$$

Dans cette équation 3.5, z_0 représente la distance d'équilibre entre les surfaces pour un chargement extérieur nul, donnée par le potentiel de Lennard-Jones. Plusieurs approches ont par la suite été proposées dans le but d'unifier ces modèles pionniers et de proposer une description plus générale valide entre ces deux cas extrêmes. C'est notamment le cas du modèle de contact élastique proposé par Muller, Yushchenko et Derjaguin (MYD) [121, 122], basé sur un potentiel d'interaction moléculaire de Lennard-Jones écrit sous forme de force surfacique σ :

$$\sigma(z) = \frac{8\gamma}{3z_0} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^3 - \left(\frac{z_0}{z} \right)^9 \right] \quad (3.6)$$

avec z la distance de séparation entre les deux surfaces et $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12}$ l'énergie de Dupré, où $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_{12}$ représentent les tensions superficielles des deux solides et de l'interface ; ou encore du modèle de Maugis [123], ayant proposé un potentiel analytique simplifié, basé sur une approximation de Dugdale (en puits carré). Les travaux de Argento et Jagota [139, 140] ont par la suite généralisé le principe de ces lois de contact, en introduisant la notion de tenseur des contraintes inter-surfaces permettant de formuler les interactions moléculaires entre deux corps sous forme d'un tenseur des contraintes. Le paramètre z_0 du potentiel de Lennard Jones a également été relié à la distance entre plus proches atomes voisins r_n , grandeur caractéristique du matériau considéré (équation 3.7) [141] :

$$z_0 = 15^{-1/6} r_n \quad (3.7)$$

3.2.1.2 Modèles élastoplastiques

Tous ces modèles étant limités au contact entre sphères parfaitement élastiques, Storåkers et al. [57, 58] ont alors élaboré un modèle basé sur les propriétés d'auto-similarité du problème de contact adapté aux matériaux inélastiques, valable pour le contact entre deux sphères inélastiques à plasticité écrouissable en loi puissance de même exposant de durcissement. Skrinjar et al. [126, 127] ont ensuite levé cette limitation en proposant une forme approximative permettant l'étude du contact entre sphères inélastiques de coefficients de durcissement différents. Ces derniers modèles sont efficaces pour modéliser le contact entre matériaux ductiles mais rencontre des difficultés avec les matériaux ayant une limite élastique plus élevée, pour lesquels il n'est pas possible de négliger les déformations élastiques. Ils ne permettent par ailleurs pas de prendre en compte de phénomènes d'adhésion.

Au vu de ces limites, Mesarovic et Johnson [124, 125] ont alors élaboré une nouvelle théorie adhésive adaptée aux matériaux élastoplastiques, à l'aide de la méthode de décomposition par poinçon rigide. Le rayon de contact et le profil de distribution de pression dans la zone de contact entre les sphères ont été liés au degré de plastification en supposant une décharge purement élastique et une distribution de pression homogène dans la zone de contact au début de la décharge. Deux approches sont pour cela étudiées : (i) la solution singulière, équivalente à la théorie *JKR* et basée sur la mécanique de la fracture élastique et (ii) la solution de zone cohésive, équivalente à la théorie *DMT* et considérant une cohésion uniforme en dehors de la zone de contact jusqu'à une certaine distance limite. Une carte de décohésion a finalement été proposée afin de connaître les domaines d'applicabilité de ces modèles en fonction des mécanismes physiques gouvernant la décohésion. Leur modèle a été appliqué avec succès à la modélisation en éléments discrets par Martin [68, 69]. L'équation 3.8 présente le lien proposé par la solution singulière de Mesarovic et Johnson entre le rayon de contact a et la force F appliquée lors d'une décharge adhésive. Il se base pour cela sur le rayon de contact en début de décharge a_0 et la pression dans la zone de contact en début de décharge p_0 (supposée constante et proche de $p_0 = 3\sigma_y$).

$$F = 2p_0a_0^2 \left[\arcsin \left(\frac{a}{a_0} \right) - \frac{a}{a_0} \sqrt{1 - \left(\frac{a}{a_0} \right)^2} \right] - 2a\sqrt{2\pi a\gamma E^*} \quad (3.8)$$

Le profil de distribution de pression n'étant pas parfaitement homogène en fin de compression, notamment pour des matériaux à plasticité écrouissable, Olsson et Larsson [128] ont récemment proposé une amélioration du modèle de Mesarovic et Johnson en proposant un modèle de charge permettant de considérer une pression non uniforme dans la zone de contact. La démarche de Mesarovic et Johnson a ensuite été conservée en utilisant ce profil non uniforme pour la construction du modèle de décohésion.

3.2.2 Modèles de contact adaptés aux surfaces réelles

Les derniers modèles présentés sous-section 3.2.1 sont cohérents avec les modèles *JKR* et *DMT* dans leurs plages de validité, mais restent toutefois limités aux contacts élastiques (ou élastoplastiques) entre sphères parfaitement lisses. Afin de pouvoir prédire les interactions de contact entre corps réels, il est intéressant de pouvoir prendre en compte l'état de surface des solides considérés. La rugosité des surfaces diminuera en effet drastiquement la surface de contact effective (intime) et par là même la valeur de l'adhésion. En outre, celle-ci augmentera avec le chargement par déformation élastique et par plastification des aspérités étant en contact.

Greenwood et Williamson [142] ont été les premiers à traiter le problème du contact élastique entre deux surfaces rugueuses isotropes nominalement planes (sans adhésion dans ce cas). Ils ont proposé une idéalisation de la rugosité de surface en considérant que les aspérités avaient une forme sphérique proche de leur sommet, ayant toutes le même rayon et une hauteur variant selon une distribution statistique (Gaussienne, exponentielle, ou Weibull). En faisant l'hypothèse qu'il n'y ait ni d'interaction entre les aspérités, ni de déformation dans le "bulk" (seules les aspérités se déforment pendant le contact), Greenwood et Williamson ont ainsi réussi à se ramener au cas du contact entre sphères parfaites présenté sous-section 3.2.1 et ont utilisé leur modèle de rugosité en association avec la solution de contact hertzien pour prédire les propriétés de la surface de contact. Greenwood et Tripp [143] ont également montré que l'étude du contact entre deux surfaces rugueuses était équivalente à celle entre une surface rugueuse et un plan rigide. Cette même méthode a ensuite été utilisée par Fuller et Tabor [144] qui utilisèrent le modèle de rugosité de Greenwood et Williamson en conjonction avec le modèle *JKR* [118] afin de pouvoir prédire le comportement d'un contact adhésif entre surfaces rugueuses élastiques.

Des avancées ultérieures ont été faites par différents auteurs (Chang et al. [145, 146], Zhao et Chang [147], Abdo et Farhang [148] ou encore Sahoo et Banerjee [149]) prédisant de manière

plus précise la surface effective de contact entre surfaces rugueuses. Ces auteurs se sont notamment intéressés à la conservation du volume des aspérités (assurée par une augmentation du rayon des aspérités tronquées) ainsi qu'à la plastification du sommet des aspérités lors de la mise en contact, venant augmenter la surface effective de contact.

Ces modèles restent toutefois limités à des déformations plastiques localisées au voisinage des sommets des aspérités. Pullen et Williamson [150] ont ainsi proposé un modèle de rugosité plus adapté aux forts chargements extérieurs et donc à une application de type compression de poudres. Comme précisé dans l'article de Williamson et Hunt [151], les aspérités de surface subsistent lorsque le matériau subit une plastification complète. Pullen et Williamson proposent une interprétation de ce phénomène en développant un modèle dans lequel la conservation du volume est cette fois assurée par une élévation uniforme de la surface rugueuse n'étant pas encore en contact telle que représentée figure 3.1.

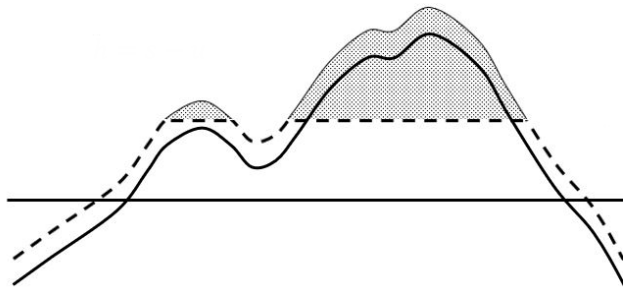


FIGURE 3.1 – Illustration de l'hypothèse de conservation du volume des aspérités assurée par une montée uniforme des zones n'étant pas en contact.

Leur modèle a été soigneusement validé sur une expérience de compression confinée d'un échantillon d'aluminium, complétée par des mesures de rugosité pour différentes charges (figure 3.2). Le confinement de l'échantillon a assuré la possibilité d'aplanir complètement les aspérités de surface. Par conséquent, le modèle de Pullen et Williamson décrit le développement de la zone de contact effective pour des surfaces rugueuses allant d'un contact nul à un contact quasi-complet.

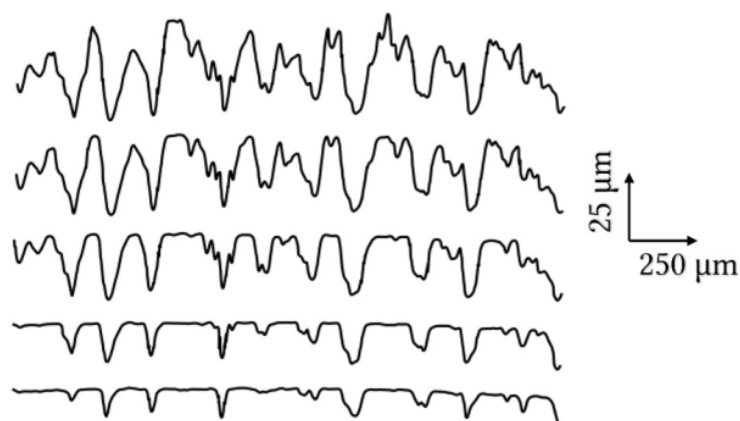


FIGURE 3.2 – Profil de rugosité d'un échantillon d'aluminium au cours d'un essai de compression en matrice, réalisé par Pullen et Williamson [150]. Pression nominale de haut en bas : 0, 12, 62, 235, 373 MPa

Pullen et Williamson ont proposé un lien entre le degré de contact α , défini comme le rapport de la surface effective de contact sur la surface apparente de contact et la contrainte nominale σ_n appliquée à la surface rugueuse. Ce lien se simplifie à l'équation 3.9 dans le cas particulier

d'aspérités parfaitement plastiques. Dans ce cas, la pression de contact sur la surface des aspérités notée p_0 est en principe homogène.

$$\sigma_n = p_0 \frac{\alpha}{1 - \alpha} \quad (3.9)$$

Dans cette équation, le paramètre p_0 correspond également à la dureté par indentation, qui est généralement prise égale à $3\sigma_y$ (comme par exemple par Storåkers et Larsson [57]) ou $2,8\sigma_y$ (par Tabor [152]) pour les matériaux élastoplastiques, σ_y étant la limite d'élasticité.

3.3 Formulation de la loi de contact adhésive

3.3.1 Principe physique de la loi de contact

Les modèles sphère-sphère présentés sous-section 3.2.1 sont d'une importance historique, mais ne sont pas directement applicables au cadre de la MPFEM qui, contrairement à la DEM, nécessite une description locale du problème de contact, à l'échelle du point matériel³. Ces modèles soulignent toutefois d'une part que le problème d'adhésion est plus efficacement décrit par l'utilisation de l'énergie de surface (travail nécessaire pour créer une surface libre unitaire), et d'autre part que le calcul d'une contrainte d'adhésion à partir d'un potentiel inter-atomique tel que celui de Lennard-Jones est pertinent. Une telle formulation (tenseur des contraintes inter-surfaces [140]) convient à la modélisation MPFEM en supposant la courbure des surfaces négligeables au voisinage du nœud de surface dans le maillage d'éléments finis⁴. Dans le présent travail, un modèle de contact adhésif entre surfaces rugueuses a été développé afin d'être utilisé à l'échelle des nœuds éléments finis, dans l'optique d'être implémenté dans le cadre de la MPFEM.

Dans le cadre de la compression des poudres, les particules sont comprimées dans des conditions confinées jusqu'à des pressions moyennes très élevées, de sorte que la contrainte nominale de contact puisse atteindre des valeurs bien au-delà de la limite d'élasticité des aspérités, exactement comme dans l'expérience et la théorie développée par Pullen et Williamson [150]. Pour ces raisons, le modèle de Pullen et Williamson [150] est choisi pour déterminer la surface de contact effective et pondérer la contrainte d'adhésion, comme détaillé dans la section suivante. Les précédents modèles d'adhésion comparables, tels que développés par Olsson et Larsson [128] ou encore Loidolt [102], ne tiennent pas compte de la surface de contact effective et supposent que l'interface peut résister à une contrainte de traction dès lors que le contact entre deux points matériels est établi.

L'introduction de l'aire de contact effective implique de supposer que la contrainte adhésive maximale de l'interface dépend de l'historique de chargement. En effet, le degré de contact, défini comme le rapport de la surface de contact effective sur la surface apparente, augmente au cours de la compression, augmentant par la même occasion la contrainte d'adhésion à l'interface. Dans chaque approche (avec et sans le degré de contact), le paramètre d'énergie de surface n'a pas exactement la même interprétation physique : dans le modèle d'Olsson et Larsson [128], l'énergie de surface doit en fait inclure l'effet d'un contact imparfait, alors que dans l'approche actuelle, elle correspond à l'énergie d'adhésion d'un vrai contact intime tel qu'imaginé théoriquement dans les approches des potentiels atomiques de type Lennard-Jones. La pertinence des deux approches doit être discutée en ce qui concerne la technique utilisée pour mesurer ou estimer réellement l'énergie de surface.

3.3.2 Changement d'échelle et adaptation de la loi de contact à la simulation en éléments finis

Abaqus permet une gestion des contacts par l'intermédiaire d'un vecteur contrainte $\underline{T}(M, \underline{x}_1, t)$ exprimé en chaque nœud M de la surface du maillage de normale \underline{x}_1 à l'itération t . La composante $T_1 = \underline{T} \cdot \underline{x}_1$ correspondant à la contrainte normale à la surface (précédemment notée σ_n) est calculée à l'aide du modèle d'adhésion décrit ci-dessous. Les composantes T_2 et T_3 (figure 3.3) représentent, quant à elles, les contraintes dans le plan tangent à la surface suivant les deux directions orthogonales \underline{x}_2 et \underline{x}_3 .

Dans le cadre de la discrétisation par éléments finis, le comportement mécanique des interfaces doit être décrit à l'aide d'une relation contrainte-déplacement. Cependant, l'échelle des rugosités

3. Ou, plus exactement, à l'échelle du nœud éléments finis.

4. D'ailleurs, cette hypothèse est très raisonnable s'il est tenu pour acquis que le maillage est suffisamment fin pour assurer la convergence correcte de la simulation.

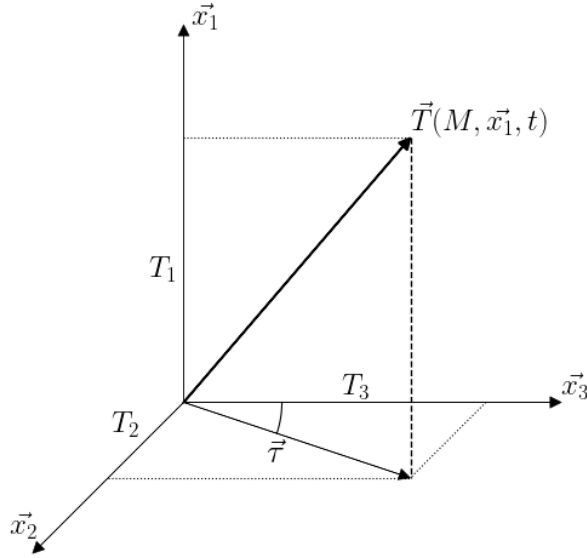


FIGURE 3.3 – Représentation du vecteur contrainte dans le repère affecté à la surface au nœud M . La direction \underline{x}_1 étant normale à la surface et les directions \underline{x}_2 et \underline{x}_3 tangentes.

et la distance d'interaction du potentiel inter-atomique sont inaccessibles numériquement à cause de la discrétisation temporelle induisant une discrétisation spatiale (l'incrément de déplacement correspondant à la distance parcourue pendant un incrément de temps). Elles ne peuvent donc pas être décrites explicitement à l'échelle de la méthode numérique (tableau 3.1).

Lennard Jones	Rugosité	Maillage	Particule	VER
10^{-9}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-2}

TABLEAU 3.1 – Ordre de grandeur des longueurs caractéristiques (en mètre) des différentes échelles du problème considéré.

En d'autres termes, considérons la relation contrainte-déplacement de Lennard-Jones (équation 3.10) introduite par Muller et al. [122] :

$$T_1(z) = \frac{8\gamma}{3z_0} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^3 - \left(\frac{z_0}{z} \right)^9 \right] \quad (3.10)$$

où z est la distance entre les surfaces en interaction, z_0 la distance d'équilibre, et γ l'énergie de surface définie sous-section 3.2.1. Les déplacements des nœuds de surface au cours d'un pas de temps étant de plusieurs ordres de grandeur au-delà de la valeur de z_0 , l'équation 3.10 ne peut pas être directement implémentée dans une modélisation MPFEM. Par conséquent, un changement d'échelle doit artificiellement être effectué, de sorte que l'évolution de la contrainte au cours d'un pas de temps soit suffisamment lente afin d'éviter tous problèmes liés à la discrétisation. Lors de cette mise à l'échelle, la contrainte de contact adhésive est réduite de sorte à pouvoir augmenter la distance d'interaction de la loi de contact, tout en maintenant la valeur de l'énergie de surface (correspondant au travail d'adhésion). Olsson et Larsson [128] ont validé cette approche pour des contacts sphériques et ont montré que la force d'adhésion dépendait uniquement de l'énergie de surface et non de la contrainte de traction maximale, à condition que la contrainte de traction maximale soit plus grande qu'une valeur minimale qu'ils ont trouvée proche de $0,5\sigma_y$. Pour ces raisons, la relation contrainte-déplacement utilisée dans le présent travail est un modèle multi-

linéaire simple représenté figure 3.4, où δ représente la distance de séparation numérique entre le nœud considéré et la facette de la surface entrant en contact avec ce nœud⁵.

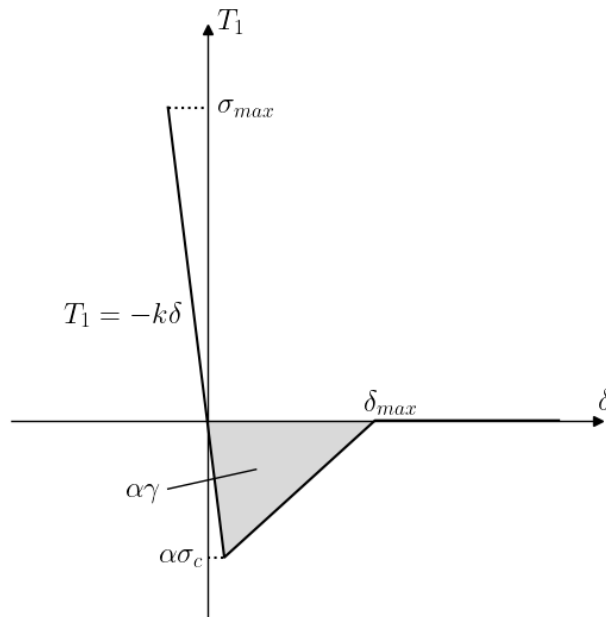


FIGURE 3.4 – Représentation de la loi de contact adhésive implémentée dans la subroutine Abaqus VUINTERACTION.

Une raideur de pénalité k est utilisée dans le but d'introduire une contrainte répulsive s'opposant à l'interpénétration des surfaces, comme dans toute procédure classique de gestion des contacts en éléments finis. Le travail d'adhésion utilisé dans la loi de contact représentée figure 3.4 est pondéré par le degré de contact α afin de tenir compte de l'hypothèse que les forces d'adhésion n'apparaissent qu'aux contacts intimes entre aspérités⁶. La valeur δ_{max} à laquelle les forces de contact disparaissent est maintenue fixe afin qu'elle puisse être liée aux exigences numériques induites par la discrétisation, et la contrainte maximale est pondérée par α . Pullen et Williamson [150] introduisent la relation suivante entre la contrainte nominale (apparente) T_1 et le degré de contact α :

$$T_1 = p_0 \frac{\alpha}{1 - \alpha} \quad (3.11)$$

L'équation 3.11 n'est valable que pour un chargement de compression monotone (α est censé rester constant lors du déchargement), et peut être facilement inversé pour obtenir α en fonction de la contrainte de compression.

Pour résumer le comportement du modèle d'interaction de contact, considérons la séquence de chargement-déchargement suivante au contact entre un nœud et la facette opposée du maillage d'éléments finis. Tout d'abord, les surfaces se rapprochent les unes des autres. À un moment donné, la distance δ devient négative (les surfaces se chevauchent). Ce recouvrement induit une contrainte répulsive normale $T_1 = -k\delta$, k étant la raideur de contact. Cette contrainte est positive en compression au vu de la convention de signe choisie. T_1 augmente pendant la compression ; par là même, le degré de contact augmente selon l'équation 3.11. α est mis à jour tant que la contrainte

5. Plus précisément, il s'agit de la distance séparant le nœud de la surface esclave au point de proximité de la surface maître. Le lecteur pourra se référer à l'annexe B ou à la documentation du logiciel Abaqus [45] pour plus de détails.

6. Ce qui implique que la hauteur des aspérités soit bien supérieure à δ_0 .

de contact en compression augmente. Soit σ_{max} la valeur maximale de T_1 en fin de compression ; selon l'équation 3.11 la valeur de α est alors :

$$\alpha = \frac{\sigma_{max}}{p_0 + \sigma_{max}} = \frac{\sigma_{max}}{3\sigma_y + \sigma_{max}} \quad (3.12)$$

Lors de la décharge, le degré de contact α est maintenu constant. Le travail d'adhésion nécessaire pour séparer la portion de surface en contact effectif est $\alpha\gamma$. La contrainte normale T_1 diminue donc jusqu'à zéro avant de devenir négative (traction). La contrainte de traction maximale pouvant être supportée est $\alpha\sigma_c$, σ_c étant donnée par :

$$\sigma_c = \frac{-2\gamma}{\delta_{max}} \quad (3.13)$$

Au fur et à mesure que la décharge se poursuit, les surfaces sont progressivement séparées et la contrainte de traction diminue linéairement pour atteindre zéro à $\delta = \delta_{max}$. Si le contact est rechargé avant d'atteindre $\delta = \delta_{max}$, on considère que les surfaces restent en partie collées ; donc les zones de contact préalablement séparées se recollent ; du fait que les surfaces n'ont pas bougé l'une par rapport à l'autre, les aspérités aplaties ou déformées restent face à face et l'adhésion est retrouvée. La contrainte de traction augmente à nouveau jusqu'à σ_c et suit la même courbe. Si δ devient supérieur à δ_{max} , α est remis à zéro et la mémoire est effacée. Dans le cas où ces mêmes surfaces viennent à entrer de nouveau en contact, il est considéré qu'il est impossible de retrouver ce contact intime à l'échelle des aspérités, les deux surfaces ayant nécessairement un mouvement indépendant lorsqu'elles sont séparées. Dans ce cas, le lien intime entre les aspérités ne se retrouve pas dans le nouveau contact et l'interaction est traitée comme une interaction initiale, avec $\alpha = 0$.

3.3.3 Formulation de la partie tangentielle de la loi de contact

Une loi de frottement de Coulomb simple, basée sur un seul coefficient de frottement μ , est implémentée dans la subroutine *Abaqus*. Cette loi de frottement est activée en cas de contraintes normales compressives. Dans le cas d'une contrainte de traction, la contrainte de cisaillement est maintenue nulle. L'implémentation d'une adhésion tangentielle en cisaillement est laissée pour une prochaine phase de développement.

3.3.3.1 Principe du modèle de frottement

Lorsque les surfaces en contact sont dans un état de traction à l'itération t ($T_1 \geq 0$), aucune friction n'est considérée ($T_2 = T_3 = 0$). Dans le cas contraire, des contraintes tests T_2^t et T_3^t sont calculées à l'itération t à l'aide des résultats de l'itération $t - \Delta t$ (équation 3.14), avec k la raideur de pénalité du contact et δ_2 (respectivement δ_3) l'incrément de position relative des points de proximité par rapport aux surfaces principales associées pendant l'incrément de temps Δt suivant la direction x_2 (respectivement x_3). La contrainte de cisaillement test τ^t est alors calculée à l'aide de ces contraintes tests (équation 3.15).

$$T_i^t = T_i(t - \Delta t) - k\delta_i, \quad i = \{2; 3\} \quad (3.14)$$

$$\tau^t = \sqrt{T_2^{t2} + T_3^{t2}} \quad (3.15)$$

Ces contraintes tests sont ensuite utilisées pour déterminer la valeur des contraintes tangentes à l'itération t . Si la contrainte de cisaillement test τ^t vérifie le critère d'adhésion de Coulomb (équation 3.16), les contraintes tests sont affectées aux composantes tangentes du vecteur contrainte ($T_2(t) = T_2^t$ et $T_3(t) = T_3^t$).

$$\tau^t \leq \mu|T_1(t)| \quad (3.16)$$

Dans le cas contraire, la contrainte de cisaillement est fixée à $\tau(t) = \mu T_1(t)$. Afin de maintenir la direction du cisaillement inchangée en cas de glissement, les composantes $T_2(t)$ et $T_3(t)$ sont alors calculées par projection du vecteur $\underline{\tau}^t = (0 \ T_2^t \ T_3^t)$ à l'aide de la relation ci-dessous (équation 3.17), ce qui amène finalement à la loi de contact tangente telle que représentée figure 3.5.

$$T_i(t) = \mu |T_1(t)| \frac{T_i^t}{\tau^t}, \quad i = \{2;3\} \quad (3.17)$$

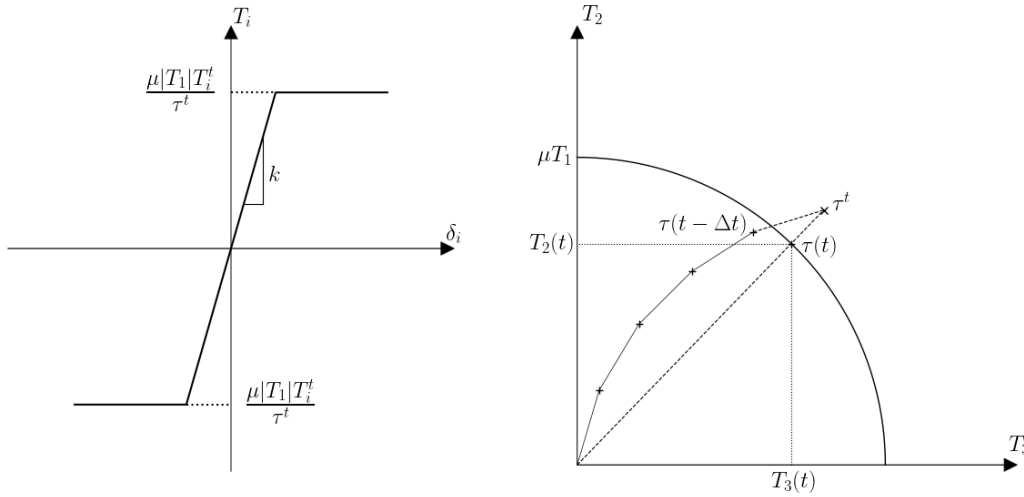


FIGURE 3.5 – Schéma de la loi de Coulomb implémentée pour la gestion des contraintes de contact tangentes T_i , $i = \{2;3\}$.

3.3.3.2 Calcul de l'énergie de frottement

Un calcul de l'incrément d'énergie surfacique dissipée par frottement ΔW_f est effectué dans la subroutine, en chaque point de proximité et à chaque itération, afin de pouvoir par la suite utiliser l'énergie de frottement pour le développement d'un critère de rupture.

Cette énergie surfacique est calculée dans le cas de glissement ($\tau^t > \mu T_1$) à partir de la relation ci-dessous (équation 3.18), où δ_2^f (resp. δ_3^f) représente l'incrément de déplacement privé de sa composante réversible "élastique" suivant la direction \underline{x}_2 (resp. \underline{x}_3) et est calculé grâce à l'équation 3.19.

$$\Delta W_f = -T_2 \delta_2^f - T_3 \delta_3^f \quad (3.18)$$

$$\delta_i^f = \delta_i - \delta_i^e = \delta_i - \frac{T_i(t) - T_i(t - \Delta t)}{k}, \quad i = \{2;3\} \quad (3.19)$$

3.4 Validation de la loi de contact adhésive

3.4.1 Vérification de l'implémentation dans le logiciel éléments finis

Un modèle numérique de contact plan entre deux parallélépipèdes rectangulaires représenté [figure 3.6](#) est utilisé afin de vérifier l'implémentation de la loi de contact adhésive développée dans le logiciel éléments finis *Abaqus* à l'aide de la subroutine *VUINTERACTION*. La base inférieure de la plaque inférieure, infiniment rigide, est entièrement fixée et un déplacement normal à la surface de contact est imposé à la face supérieure du parallélépipède élastique supérieur, de hauteur h , surface S , module d'Young E et coefficient de Poisson ν , pour atteindre une compression uniaxiale de contrainte normale $T_1 = 3\sigma_y$, avec σ_y la limite d'élasticité des aspérités supposées parfaitement plastiques. D'après l'équation 3.11 du modèle de Pullen et Williamson, le degré de contact correspondant est donc $\alpha = 0,5$.

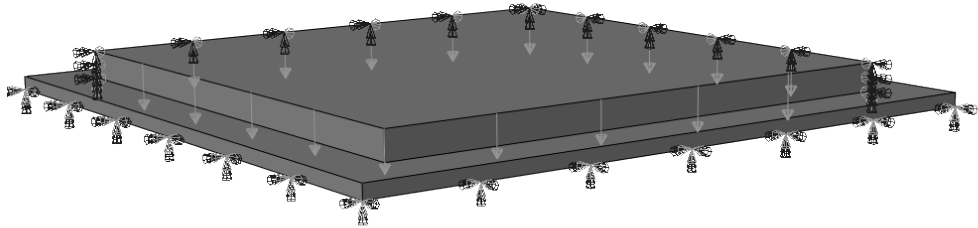


FIGURE 3.6 – *Modèle numérique de contact plan utilisé pour la validation de l'implémentation de la loi de contact normale et tangentielle.*

Les deux surfaces sont ensuite séparées pour vérifier l'implémentation de la partie normale de la loi de contact. Les résultats sont présentés [figure 3.7](#).

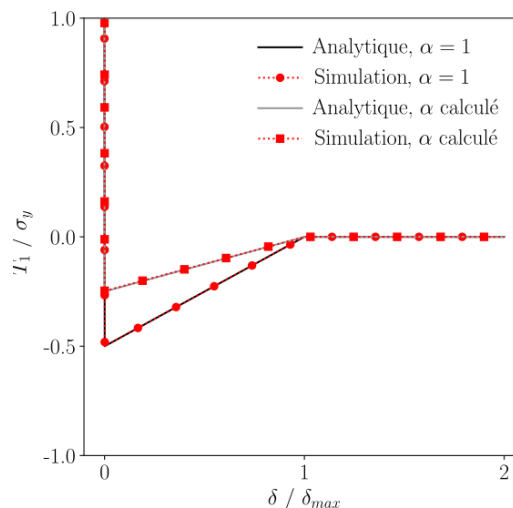


FIGURE 3.7 – *Vérification de l'implémentation de la loi de contact adhésive à l'aide du modèle présenté figure 3.6 : comparaison entre l'entrée de la loi de contact et la sortie Abaqus, avec $k = 10^9 \text{ N.mm}^{-3}$, $\sigma_y = 200 \text{ MPa}$, $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$ et $\sigma_c = \sigma_y/2$. Contrainte normale normalisée en fonction du déplacement normal normalisé.*

Afin de vérifier l'implémentation de la partie tangentielle de la loi de contact, un second es-

sai numérique est réalisé. Dans cet essai, la contrainte normale en compression est maintenue constante et un déplacement transversal u_3 est imposé sur la surface supérieure du parallélépipède déformable. D'après la loi de Coulomb, le glissement est initié pour une contrainte de cisaillement critique $\tau^c = \mu T_1$. Du fait de la déformation élastique du parallélépipède, cette contrainte critique est atteinte pour un déplacement u_3^c défini par l'équation 3.20.

$$u_3^c = \frac{2(1+\nu)h\tau^c}{E} \quad (3.20)$$

Un déplacement $u_3 = 3u_3^c$ suivi d'un déplacement $u_3 = -3u_3^c$ sont alors imposés au modèle. Les résultats présentés figure 3.8a vérifient une initialisation du glissement pour $u_3 = 3u_3^c$. Ce même modèle est également utilisé pour vérifier le calcul de l'énergie de dissipation par frottement $W_f = \int \tau^c du_3^f$, avec du_3^f l'incrément de déplacement tangentiel relatif entre les deux surfaces diminué de sa composante réversible (figure 3.8b). Une raideur de contact numérique k élevée est utilisée afin d'induire des déformations restant négligeables devant les déformations induites par la raideur du parallélépipède déformable $\tilde{k} = E/(2h(1+\nu))$. Les résultats obtenus à l'aide de ce modèle permettent de valider l'implémentation de la loi de contact et le calcul de l'énergie dissipée par frottement au sein de la subroutine.

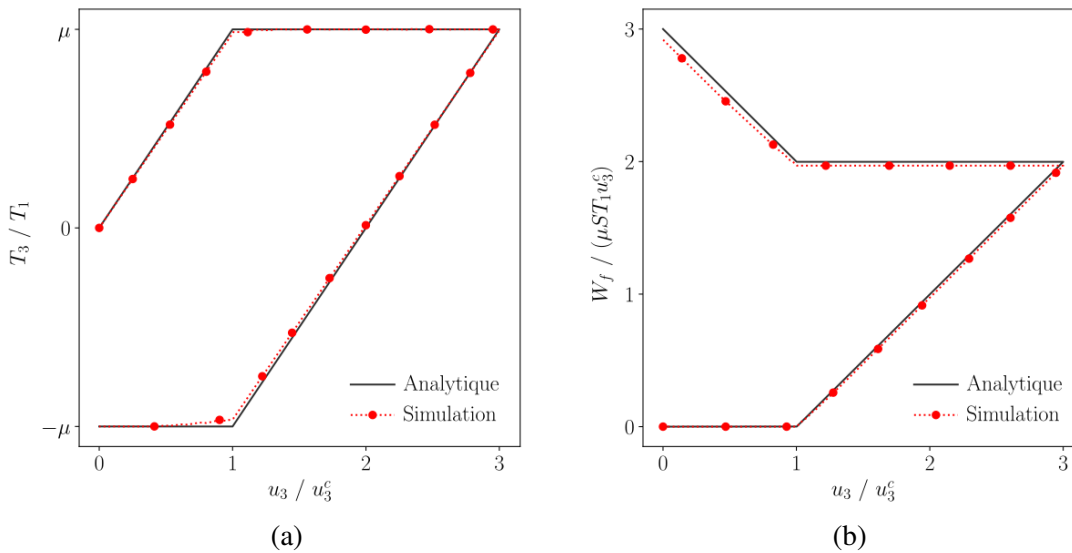


FIGURE 3.8 – Vérification de l'implémentation de la partie tangentielle de la loi de contact à l'aide du modèle présenté figure 3.6 : comparaison entre l'entrée de la loi de contact et la sortie Abaqus, avec $k = 10^9 \text{ N.mm}^{-3}$ et $\mu = 0,1$. (a) contrainte de cisaillement normalisée en fonction du déplacement transversal normalisé; (b) dissipation par frottement normalisée en fonction du déplacement transversal normalisé.

3.4.2 Validation de la loi de contact dans sa forme simplifiée : comparaison avec les modèles de la littérature

Un modèle élastoplastique constitué de deux sphères en contact (figure 3.9) est étudié pour comparer les résultats du modèle de contact adhésif implémenté à ceux de Mesarovic et Johnson [124] et de Olsson et Larsson [128]. À des fins de comparaison, le degré de contact α est maintenu égal à 1, ces deux modèles ne prenant pas en compte la rugosité des surfaces de contact. Un modèle 3D a été construit à la place d'un modèle axisymétrique 2D pour des raisons pratiques, les subroutines étant destinées à être ultérieurement utilisées dans le cadre de simulations 3D sur des ensembles de particules.

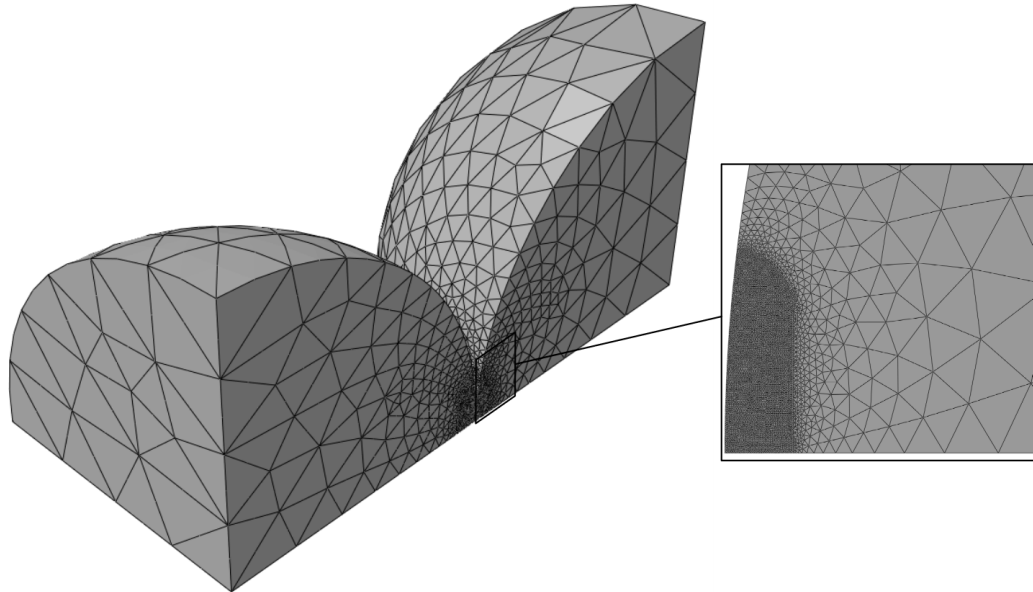


FIGURE 3.9 – Maillage éléments finis utilisé pour la validation de la loi de contact développée.

Les simulations ont été effectuées sur cet échantillon numérique à l'aide du progiciel d'éléments finis *Abaqus* [45]. Les calculs ont été parallélisés sur 6 cœurs à l'aide de doubles processeurs AMD EPYC 7302 de 16 cœurs. Le matériau constitutif des particules a été modélisé comme un matériau élastoplastique à élasticité isotrope et linéaire. Une plasticité à écrouissage linéaire isotrope de type von Mises a été introduite pour faciliter la convergence de la simulation. Le module de Young est défini comme E , le coefficient de Poisson comme ν , la limite d'élasticité initiale comme σ_y et le module d'écrouissage comme K . Les valeurs des paramètres de matériaux utilisés sont résumées [tableau 3.2](#).

Paramètre	E	ν	σ_y	K
Unité	MPa	-	MPa	MPa
Valeur	200 000	0,3	200	100

TABLEAU 3.2 – Valeurs des paramètres matériaux utilisés dans la simulation numérique.

Bien que le problème étudié ici soit statique, le solveur *Abaqus/Explicit* est utilisé pour permettre l'utilisation future de la subroutine implémentée dans le cas d'assemblages granulaires, où un grand nombre de contacts se produisent. Les sphères ont été partitionnées et maillées ([figure 3.9](#)) à l'aide d'éléments tétraédriques quadratiques de type C3D10.

De manière similaire à Olsson et Larsson [128], les deux sphères identiques de rayon r ont d'abord été comprimées en imposant un déplacement relatif $u_1 = 0,02r$ des centres des sphères. Les sphères ont ensuite été éloignées jusqu'à ce que les surfaces de contact soient séparées. La taille des plus petits éléments du maillage a été définie à $0,00125r$, où r correspond au rayon de la sphère maillée. La distance d'interaction maximale δ_{max} a été calculée pour obtenir $\sigma_c = 0,9\sigma_y$. De cette manière, δ_{max} a été minimisée tout en garantissant l'hypothèse de Mesarovic et Johnson [124] d'absence de plastification lors de la décharge.

La [figure 3.10](#) montre une comparaison entre les résultats du modèle de contact développé et ceux de la littérature, où a_0 , a et F représentent respectivement le rayon de contact entre les sphères déformées en fin de chargement, le rayon de contact lors de la décharge et la force de

contact. Le modèle de Mesarovic et Johnson retenu correspond à la "solution singulière"⁷, étant plus proche des hypothèses faites dans le présent travail.

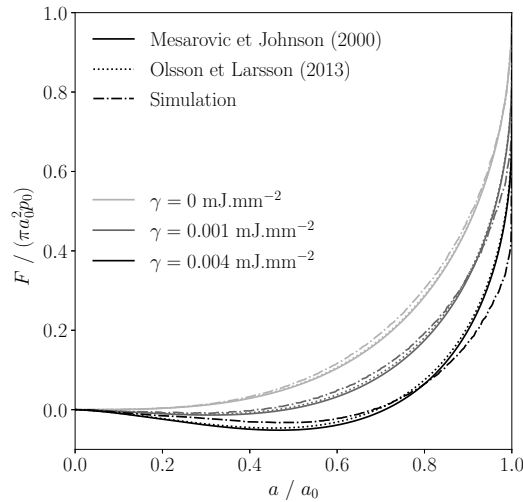


FIGURE 3.10 – Comparaison entre les prédictions de la solution singulière du modèle de Mesarovic et Johnson [124], le modèle d’Olsson et Larsson [128] et les résultats numériques, sans pondération par le degré de contact, pour diverses énergies de surface, avec $k = 10^9 \text{ N.mm}^{-3}$, $\sigma_y = 200\text{MPa}$, et $\sigma_c = 0,9\sigma_y$.

Des écarts sont constatés sur la figure 3.10 en début de décharge (pour a/a_0 proche de 1,0), principalement pour les grandes valeurs de γ . Ces écarts sont dus au fait que le logiciel éléments finis n’a pas exactement la même définition de la surface de contact que les modèles analytiques : les surfaces sont considérées en contact tant que la force de contact nodale est différente de zéro (c’est-à-dire tant que la distance δ reste inférieure à δ_{max}), bien que la séparation ait commencé ; a/a_0 reste donc égal à 1,0 même si la surface de contact géométrique a commencé sa séparation⁸. Cet effet devient plus significatif pour des valeurs élevées de δ_{max} , comme indiqué ci-dessous. La contrainte d’adhésion σ_c étant limitée à $0,9\sigma_y$, le travail d’adhésion γ est donc proportionnel à δ_{max} . Ce paramètre δ_{max} est ainsi plus grand pour des valeurs de γ supérieures. Une augmentation de la contrainte d’adhésion réduit l’écart en début de décharge, mais de la plasticité à la décharge se produit alors à l’interface, augmentant, quoique d’une manière différente, l’écart entre la solution numérique et les prédictions de Mesarovic et Johnson. Une étude de sensibilité a été réalisée afin de déterminer l’influence de la contrainte d’adhésion σ_c et de la distance d’interaction maximale δ_{max} (les deux étant directement liées par l’équation 3.13) pour une valeur donnée de γ . La figure 3.11 montre l’influence de ces paramètres.

Dans la figure 3.11a, le rapport σ_c/σ_y est maintenu inférieur à 1,0 de sorte à ce qu’aucune plasticité ne se produise lors de la décharge. Dans ce cas, la diminution de la valeur de σ_c entraîne principalement une augmentation de δ_{max} , ce qui retarde le point auquel le contact est perdu. Dans le pire des cas ($\sigma_c/\sigma_y = 0,1$, $\delta_{max}/r = 1,0 \cdot 10^{-4}$), la charge doit être considérablement réduite avant que le rayon de contact ne commence à diminuer. D’autre part, lorsque δ_{max} diminue ($\sigma_c/\sigma_y = 0,8$, $\delta_{max}/r = 1,3 \cdot 10^{-5}$), les résultats numériques se rapprochent des prédictions de

7. Dans laquelle aucune traction adhésive ne peut se produire en dehors de la surface de contact, ce qui est similaire à l’hypothèse du modèle JKR.

8. Par ailleurs, la surface de contact géométrique exacte ne peut pas être connue dans le contexte de la FEM car elle n’est pas parfaite ; la discrétisation et le chevauchement des facettes limitent la précision. Différentes méthodes pour définir le rayon de contact ont été testées dans cette étude, la plus précise d’entre elles consistant à définir la surface de contact grâce à l’utilisation des forces nodales.

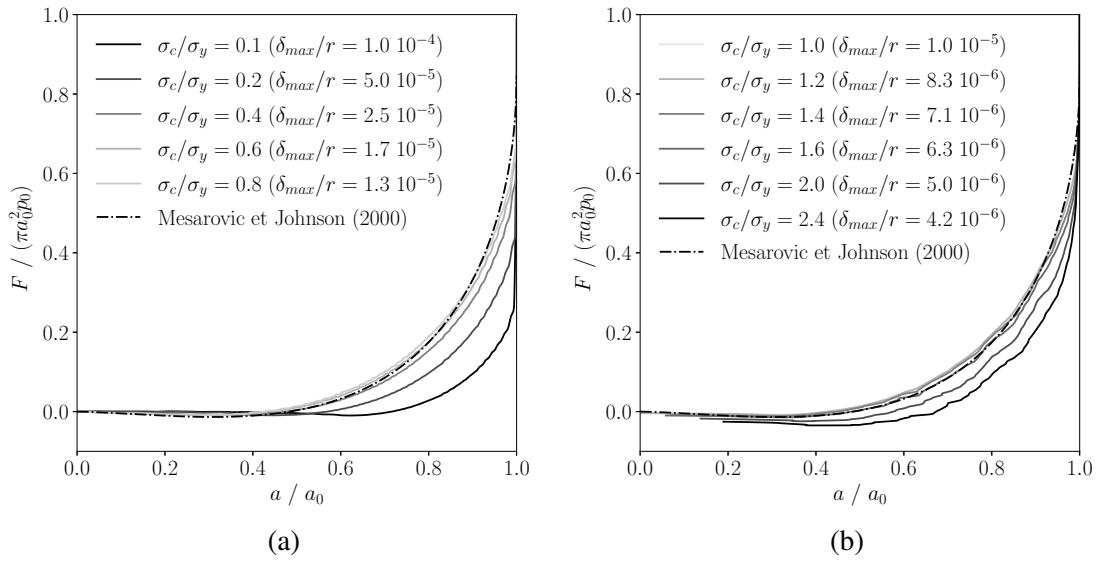


FIGURE 3.11 – Étude de l'impact du paramètre σ_c/σ_y sur les prédictions numériques pour un contact sphère/sphère, avec $k = 10^9 \text{ N.mm}^{-3}$, $\sigma_y = 200\text{MPa}$, et $\gamma = 10^{-3}\text{mJ.mm}^{-2}$ pour (a) $\sigma_c/\sigma_y < 1,0$, et (b) $\sigma_c/\sigma_y \geq 1,0$.

Mesarovic et Johnson. Les courbes numériques et analytiques concordent raisonnablement pour $\sigma_c > 0,6\sigma_y$ ce qui confirme l'observation soulignée par Olsson et Larsson [128].

Dans la figure 3.11b, $\sigma_c/\sigma_y \geq 1,0$. Dans ce cas, pas (ou très peu) de retard est observé dans la séparation des contacts. Cependant, de la plasticité se produit à la décharge ce qui explique que le rayon de contact a n'atteigne pas zéro en fin de simulation (les deux sphères ne sont pas complètement séparées avec le déplacement imposé). Plus σ_c est grand, plus le rayon de contact est grand en fin de simulation. On peut également observer que pour une valeur donnée de force de contact (lors de la décharge), le rayon de contact reste plus grand pour des valeurs plus grandes de σ_c . Ce comportement est raisonnable puisque le travail des forces de traction doit être en partie consacré à la déformation plastique à la place de la séparation des contacts. Naturellement, à mesure que la contrainte adhésive augmente, la courbe de décharge s'écarte davantage des prédictions de Mesarovic et Johnson, puisque leur hypothèse d'une décharge purement élastique devient de moins en moins acceptable.

Les résultats de la figure 3.11 sont résumés dans la figure 3.12, dans laquelle l'erreur relative e entre les résultats numériques et les prédictions de Mesarovic et Johnson [124] (équation 3.21) est tracée en fonction du rapport σ_c/σ_y . Une erreur inférieure à 5 % est obtenue pour σ_c/σ_y se situant entre 0,6 et 1,6 environ.

$$e = \sqrt{\sum_{a=0}^{a_0} \left(\frac{F_{simulation}(a) - F_{Mesarovic}(a)}{\pi a_0^2 p_0} \right)^2} \quad (3.21)$$

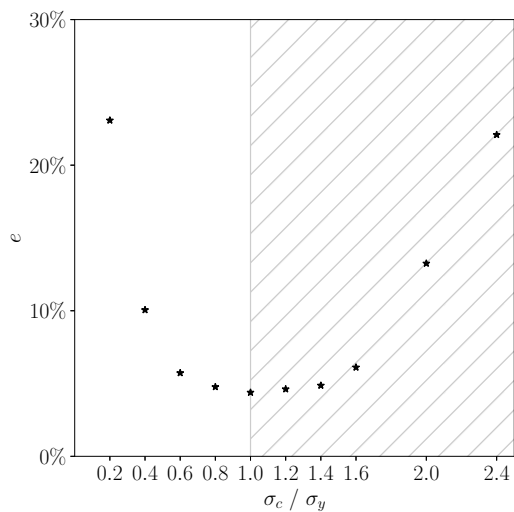


FIGURE 3.12 – Évolution de l'erreur relative e entre la simulation numérique et le modèle de Mesarovic et Johnson [124] en fonction de la contrainte d'adhésion adimensionnée. $k = 10^9 \text{N}\cdot\text{mm}^{-3}$, $\sigma_y = 200 \text{MPa}$, et $\gamma = 10^{-3} \text{mJ}\cdot\text{mm}^{-2}$.

3.5 Validation expérimentale de la loi de contact dans sa forme globale

3.5.1 Principe du dispositif expérimental

Un dispositif expérimental représenté [figure 3.13](#) et [figure 3.14](#) a été développé afin de mesurer les forces d'adhésion entre deux échantillons préalablement comprimés. Ce dispositif a été créé afin de permettre de réaliser un essai de compression suivi d'un essai de traction à l'aide d'une presse hydraulique de 500 kN, sans manipulation transitoire des échantillons à tester. L'objectif est de mesurer la force requise pour séparer deux échantillons (et donc de mesurer la cohésion développée entre ces derniers) en fonction de la compression préalablement appliquée entre ces deux échantillons.

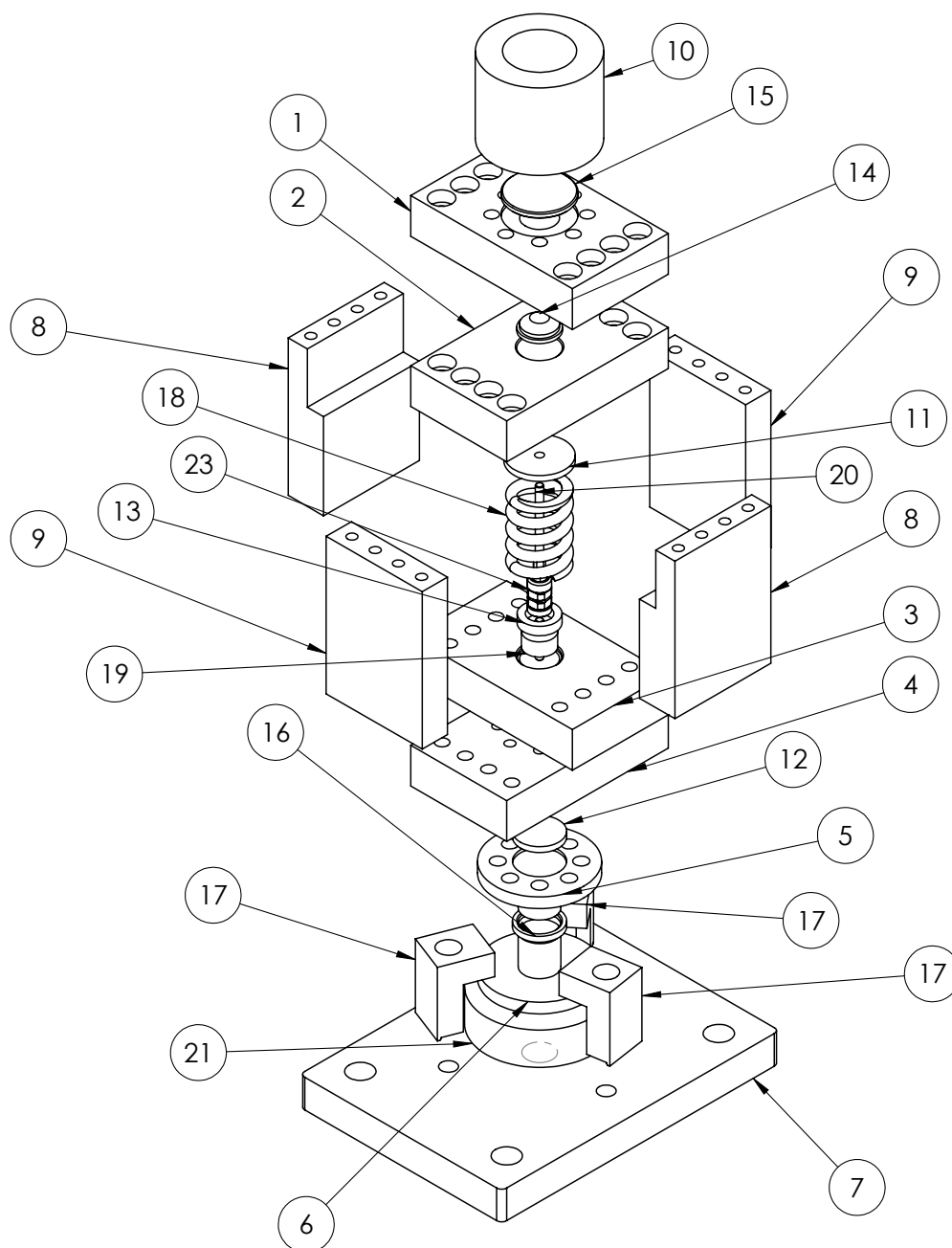


FIGURE 3.13 – Vue éclatée du dispositif expérimental.

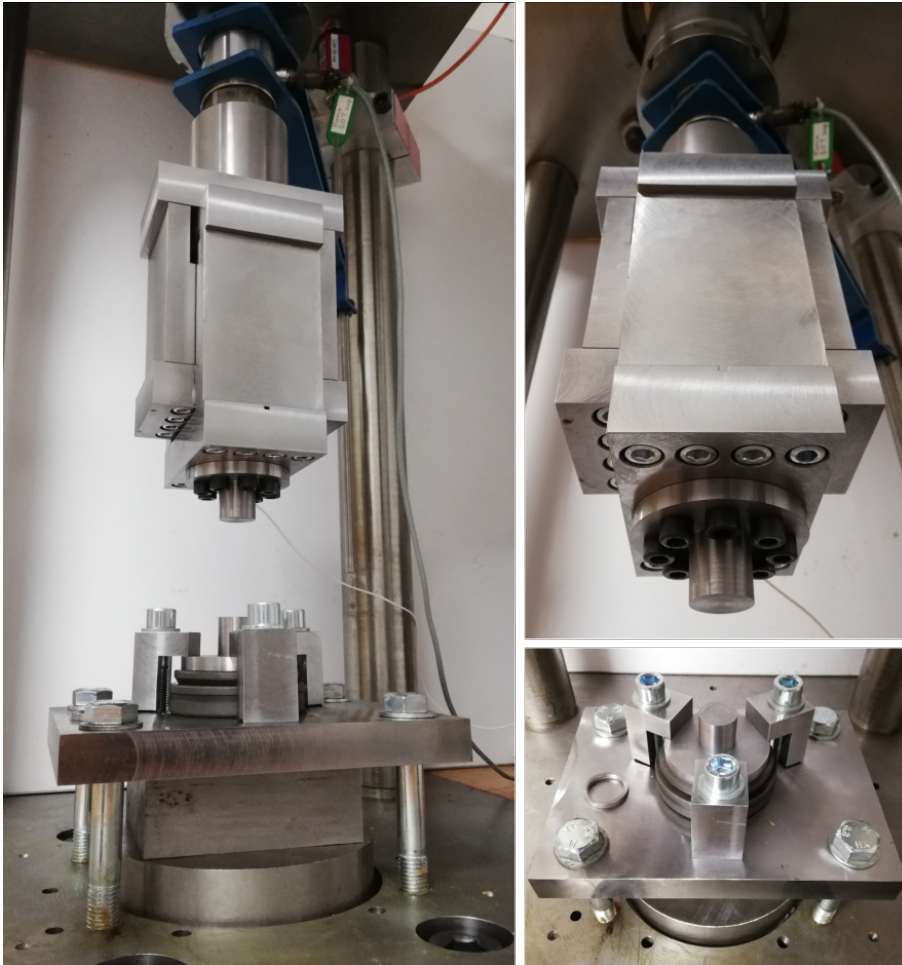


FIGURE 3.14 – Photographies du dispositif expérimental.

Un capteur de traction de 2500 N (pièce 19) est couplé au dispositif à l'aide d'un ressort de compression (pièce 18) de raideur $k = 186.3 \text{ N}\cdot\text{mm}^{-1}$ et de longueur à vide $l_0 = 65 \text{ mm}$ afin de permettre une mesure précise de l'adhésion lors de la phase de traction. Le ressort 18 permet en effet de diminuer la raideur du système et facilite ainsi la mesure de la valeur de l'adhésion (en permettant d'obtenir plus de points de mesure lors de la montée en charge). La cellule de force de 500 kN est en effet bien adaptée aux efforts appliqués lors de la compression, mais est surdimensionnée pour la mesure de la force de séparation des échantillons survenant lors de la phase de traction.

Le capteur 19 est pour cela fixé entre la plaque 4 et le disque de réglage (pièce 11) venant comprimer le ressort contre la plaque 3 par l'intermédiaire d'une tige filetée M6x70 (pièce 20) de section nominale $S_n = 9.65 \text{ mm}$ et de classe 6.8 (limite élastique $R_e = 480 \text{ MPa}$) passant au centre du ressort. La pré-compression du ressort 18 est déterminée afin de permettre la compensation du poids du dispositif. De cette manière, le capteur 19 n'est pas sollicité durant la compression (grâce au contact entre les pièces 1 et 2) et est protégé en cas de force de traction excessive grâce au système de butée du dispositif (pièces 8 venant en contact avec la pièce 2); la cellule de force de 500 kN prenant alors le relais pour des efforts supérieurs. La position de la butée est calculée pour permettre une course du ressort de 15 mm, correspondant à une protection de la cellule de force pour des efforts supérieurs à 2794 N (sachant que le capteur peut supporter jusqu'à 3750 N).

L'ensemble des pièces du dispositif est usiné en acier 40CMD8 et dimensionné afin de résister à un chargement maximal de 500 kN. Un embout à rotule droit taraudé en acier zingué - chromaté bleu (pièce 23) est vissé entre la cellule de force de 2500 N et la tige filetée afin d'assurer son

auto-alignement. Trois brides (pièces 17) orientées à 120 degrés sont utilisées pour permettre la fixation de l'échantillon inférieur (pièce 6) à la plaque support (pièce 7), une fois celui-ci aligné avec l'échantillon supérieur (pièce 5). L'échantillon supérieur 5 est fixé au dispositif expérimental par l'intermédiaire de la plaque 4. L'échantillon inférieur est posé sur une rotule de compression (pièce 21) afin d'assurer la planéité du contact avant le serrage des brides. Une bague de centrage (pièce 16) est utilisée lors de la phase de réglage afin d'assurer le bon alignement des échantillons, puis retirée du dispositif une fois les brides fixées. Une gorge est usinée dans la pièce 4 afin de permettre le passage et le positionnement du câble de branchement de la cellule de force 19. Un jeu de 3 mm entre les pièces 3 et 4 est également assuré lors du contact entre les pièces 1 et 2 afin d'empêcher l'écrasement du câble en cas de sortie de gorge.

Un cylindre taraudé en $M52 \times 3$ (pièce 10) est utilisé afin de pouvoir relier le dispositif à la presse hydraulique. Des plaques de centrage (pièces 12, 13, 15) sont utilisées pour assurer l'alignement du dispositif lors de son montage. Un pion de centrage chanfreiné (pièce 14) est utilisé afin d'assurer le centrage des plaques 1 et 2 durant les essais. Les ajustements récapitulés [figure 3.15](#) ont été choisis afin de permettre un alignement précis du dispositif expérimental. Les tolérances ont été choisies pour permettre une mise en place au maillet des pièces (12, 13, 14, 15) dans les pièces (4, 3, 1, 1) respectivement. Afin de permettre un démontage aisé du dispositif, des ajustements glissants précis de type H7g6 ou équivalent ont été adoptés entre les pièces (5, 6, 12, 14, 15) et les pièces (16, 16, 5, 2, 10) respectivement.

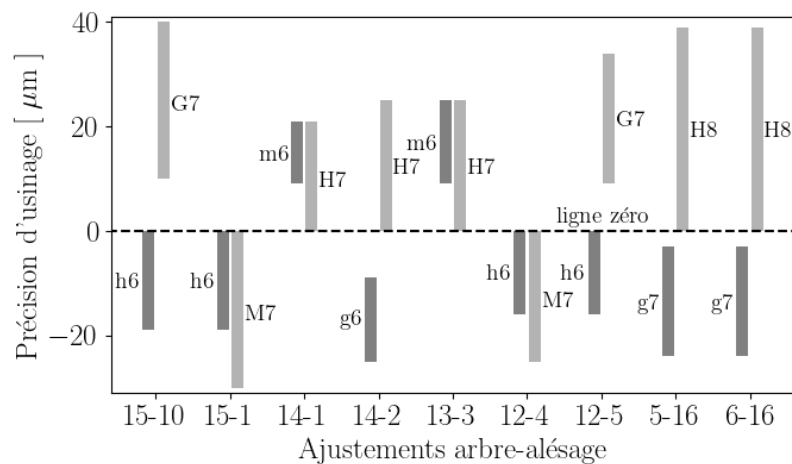


FIGURE 3.15 – Schéma récapitulatif des tolérances d'usinage des ajustements (norme du système ISO d'ajustements).

Huit vis de type CHCM10x40 venant fixer l'échantillon supérieur sont utilisées dans l'assemblage comme fusibles afin de protéger le reste des pièces du dispositif. Ces vis à tête hexagonale et à filetage métrique ISO sont en acier à faible teneur en carbone de classe de qualité 8.8 (charge de rupture de 800 MPa, limite d'élasticité de 640 MPa) et ont une tige de diamètre nominal 10 mm, une longueur sous tête de 40 mm et une section résistante nominale de $S_n = 58 \text{ mm}^2$. Dans le cas non-lubrifié (pour un coefficient de frottement sous tête $\mu = 0,2$), le guide de serrage contrôlé *Facom* recommande un couple de serrage $C_s = 53 \text{ N.m}$ induisant une pré-charge $F_s = 21.8 \text{ kN}$. La charge minimale de rupture étant $F_{max}^{vis} = 46.4 \text{ kN}$, la charge maximale en traction du montage avant rupture des vis est donc $F_{tot} = 8(F_{max}^{vis} - F_s) = 196.8 \text{ kN}$. Quatre vis CHCM20x70-8.8 sont ensuite utilisées pour la fixation de la plaque support au bâti de l'expérience. Les brides sont quant à elles fixées grâce à trois vis CHCM16x80-8.8. Les quarante vis restantes étant de type CHCM10x45-8.8.

3.5.2 Description du protocole expérimental

Le gain de la cellule de force *Measurement Specialties* 2500 N utilisée a été réglé à l'aide d'un capteur étalon de 10 kN afin d'obtenir une force de 250 N sous excitation de 10 V. La courbe de calibration présentée figure 3.16 montre un lien affine entre la force F et la tension U . La force non nulle observée à tension nulle vient du fait d'une modification de la précontrainte imposée au ressort (pièce 18) post-étalonnage.

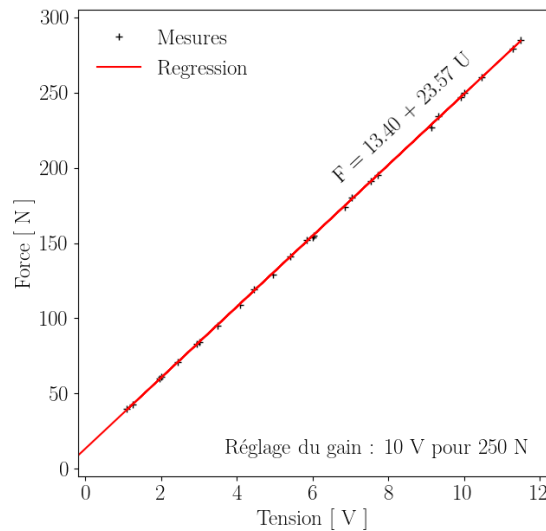


FIGURE 3.16 – Courbe de calibration de la cellule de force *Measurement Specialties* 2500 N sous excitation de 10 V.

Les échantillons (pièces 5 et 6) ont initialement été usinés en acier XC48 (de limite élastique $\sigma_y = 375$ MPa) à l'aide de mors doux afin d'assurer un parallélisme précis et ainsi une compression axée sur l'échantillon. Les résultats obtenus avec ce matériau n'étant pas concluants, il a par la suite été décidé de changer de matériau de référence et d'effectuer les essais sur des échantillons de plomb. Ceux-ci ont été directement moulés sur une tige filetée assemblée à des porte-échantillons permettant le même système de fixation que les échantillons 5 et 6 (figure 3.17a et figure 3.18d). Un moule matrice cylindrique de diamètre 30 mm a pour cela été utilisée.

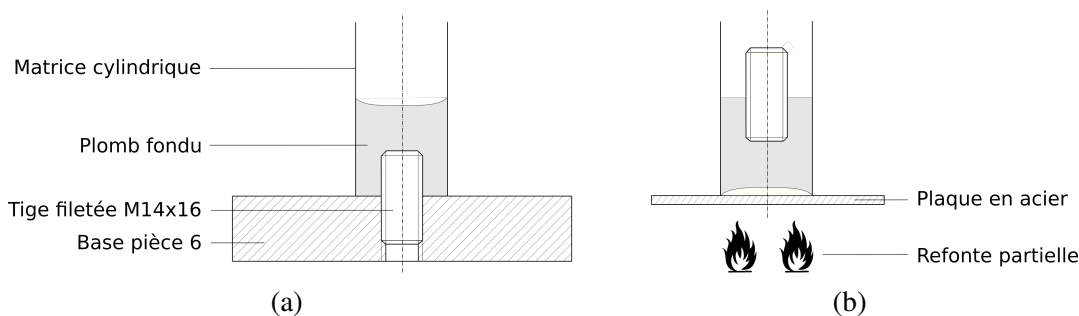


FIGURE 3.17 – Illustration du principe de fabrication des échantillons en plomb. (a) Moulage initial et (b) refonte de la surface utile.

La surface libre des échantillons lors du moulage correspondant à la surface de contact entre les deux échantillons lors de l'essai présenté figure 3.14, il est nécessaire que celle-ci possède une bonne planéité pour permettre un développement plan du contact. Ceci n'est pas le cas à la suite de cette étape de moulage (figure 3.18a). Afin d'améliorer cet état de surface, les échantillons ont

ensuite été dévissés des bases des pièces 5 et 6, retournés dans la matrice cylindrique, puis refondus en contact avec une plaque chauffée (figure 3.17b et figure 3.18b). Ils ont enfin été ponçés à l'aide d'un papier de verre à grain 120 (figure 3.18c) puis refixés aux porte-échantillons.

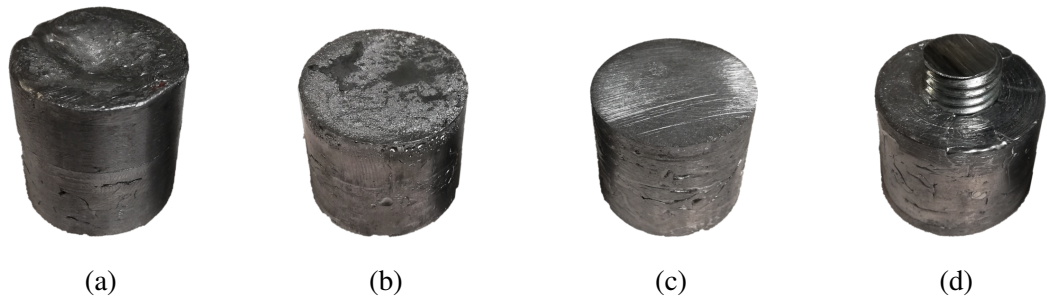


FIGURE 3.18 – (a,b,c) État de surface de l'échantillon de plomb aux différentes étapes de sa fabrication et (d) surface inférieure de l'échantillon moulé sur une tige filetée afin d'être fixé aux bases des pièces 5 et 6.

Les différentes étapes du protocole expérimental effectuées lors de l'assemblage du dispositif et de la fixation des échantillons précédant l'essai de compression suivi de l'essai de traction sont décrites ci-dessous :

1. Fixation de l'échantillon supérieur sur le dispositif à l'aide des huit vis *CHCM10x40-8.8*.
2. Positionnement approximatif de l'échantillon inférieur entre les trois brides 17.
3. Rapprochement des deux échantillons et alignement des surfaces à l'aide de la bague 16 et du rotulage.
4. Fixation de l'échantillon inférieur par serrage des brides 17.
5. Séparation des échantillons et retrait de la bague 16.
6. Nettoyage à l'acétone des surfaces des deux échantillons.

Trois cycles de compression/traction sont ensuite appliqués au dispositif. Un pilotage en déplacement est pour cela utilisé et une mesure de l'évolution de la force est effectuée. Les essais sont réalisés à la vitesse minimale de la presse ($4 \mu\text{m.s}^{-1}$) afin de réduire au maximum les effets de la forte visco-plasticité du plomb.

3.5.3 Résultats expérimentaux

La figure 3.19 présente les résultats obtenus lors d'un essai de trois cycles de compression/traction d'amplitude 4 mm en compression et 1 mm en traction. La figure 3.19a représente l'évolution de la contrainte en fonction du déplacement imposé obtenue à partir de la force extraite de la cellule de force 500 kN. La surface de contact S est pour cela calculée à partir de la connaissance de la surface initiale de l'échantillon S_0 , de sa hauteur initiale h_0 ainsi que de sa hauteur dans la configuration déformée h , en faisant l'hypothèse d'une transformation isochore (équation 3.22).

$$S = \frac{S_0 h_0}{h} \quad (3.22)$$

Les résultats obtenus permettent d'obtenir la contrainte maximale appliquée lors de chacun des cycles, correspondant au paramètre σ_{max} du modèle de Pullen et Williamson [150]. La zone linéaire en début d'essai correspond au domaine élastique. La limite élastique observée ici varie d'un essai à l'autre. Ceci est dû à un écrouissage des échantillons lors de la phase d'alignement des échantillons et du serrage des brides. Un adoucissement semble être observé au cours du dernier chargement. Cependant, cette plage de déplacement ($u > 8$ mm) correspond également à la zone

d'apparition d'un "effet tonneau", amenant à un calcul erroné de la surface de contact et donc de la contrainte. Ces résultats devront donc être manipulés avec précaution. Lors des différentes décharges, la contrainte semble revenir à zéro, la cellule de force 500 kN n'étant pas suffisamment précise pour détecter une force d'adhésion.

La figure 3.19b présente, quant à elle, l'évolution de la contrainte avec le déplacement, obtenue par l'intermédiaire de la cellule de force 2500 N. La figure 3.19b montre qu'une contrainte non-nulle est mesurée au cours des phases de compression. En principe, la cellule de force 2500 N ne devrait pas être sollicitée lors de ces phases de compression (cf. figure 3.13). Cette mesure non nulle résulte de la déformation du dispositif expérimental et ne correspond pas à une mesure réelle de la contrainte au sein de l'échantillon. Lors de la compression, le bloc constitué des pièces 2-4-9 supportant la charge se déforme. La distance de séparation entre les pièces 3 et 4 (initialement 3 mm) décroît donc lors de la compression, venant par la même occasion diminuer la précontrainte du ressort, ce qui se traduit par l'enregistrement d'une force positive par le capteur de 2500 N. Ainsi, la partie positive de la contrainte sur la figure 3.19b ne correspond pas à une mesure réelle, seulement à un relâchement du ressort au dessus du zéro défini lors de l'étalonnage (elle est en revanche proportionnelle à la contrainte de compression). La partie négative de la contrainte, en revanche, correspond à la contrainte de traction réelle. Cette différence explique pourquoi la pente ("raideur") observée sur la courbe change au passage du zéro. Le déplacement correspond essentiellement à la raideur du ressort et non à celle des échantillons. Ainsi la seule donnée à retirer de cette courbe est la valeur de la contrainte au niveau des pics qui définit la contrainte maximale d'adhésion. Il est cette fois possible de détecter la contrainte d'adhésion σ_c apparaissant durant la phase de traction. Celle-ci augmente au cours des cycles ce qui semble être en adéquation avec les prédictions du modèle de Pullen et Williamson [150]. Ces observations doivent toutefois être traitées avec méfiance, en raison notamment du caractère fortement visqueux du plomb. Un niveau d'adhésion différent est par exemple observé entre le second et le troisième cycle, tandis que la contrainte maximale est sensiblement identique (en raison de l'adoucissement). Ce type d'observation ne s'explique pas par le modèle de rugosité de Pullen et Williamson [150] et pourrait être induit par des effets visqueux. En effet la surface effective pourrait continuer d'augmenter à contrainte quasi-constante entre deux cycles sous l'effet d'une forme de fluage.

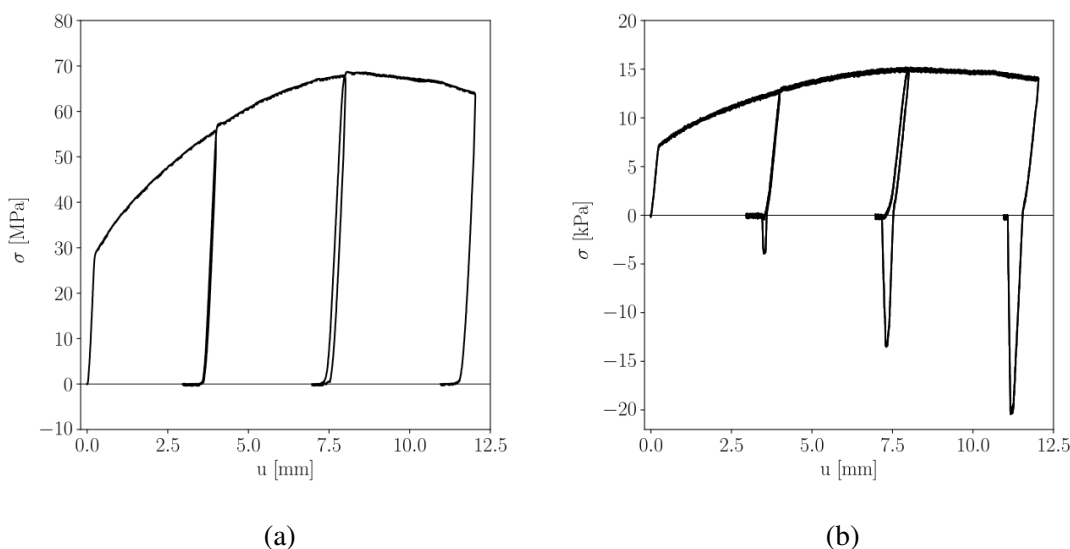


FIGURE 3.19 – Mesure de la contrainte en fonction du déplacement lors d'un essai de trois cycles de compression/traction à l'aide (a) de la cellule de force de 500 kN et (b) de la cellule de force de 2500 N (résultats valides uniquement en traction).

Plusieurs essais de ce type (composés de trois cycles successifs d'amplitude en compression de 3 mm, 4 mm ou 5 mm et d'amplitude en traction de 1 mm) ont été effectués. Les résultats correspondant aux valeurs de contraintes d'adhésion relevées sont résumés figure 3.20. Les résultats obtenus mettent en évidence une dépendance du niveau d'adhésion à l'historique de chargement. Pour un même échantillon, la contrainte d'adhésion augmente (en valeur absolue) au cours des cycles avec le déplacement (et donc avec la contrainte maximale appliquée). De façon similaire, la contrainte d'adhésion au premier cycle augmente avec l'amplitude de déplacement de ce premier cycle. Ces deux observations corroborent le modèle de Pullen et Williamson [150].

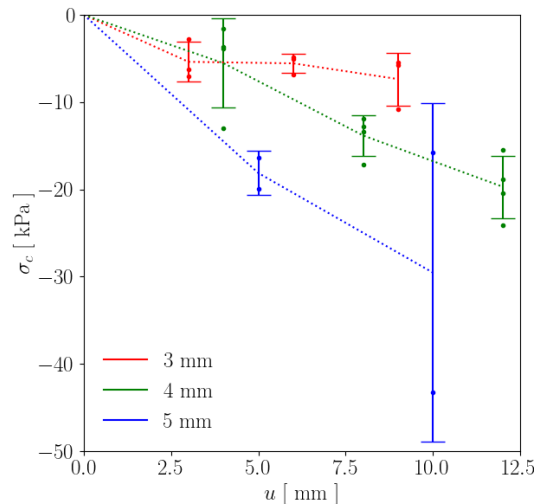


FIGURE 3.20 – Contrainte maximale d'adhésion en fonction du déplacement imposé lors de la charge. Plusieurs cycles successifs de même amplitude sont effectués sur un même échantillon. Différentes amplitudes de cycle sont présentées.

Toutefois, la présente étude n'est pas suffisante pour vérifier la validité de la loi de contact dans sa forme globale. Il serait pour cela nécessaire de déterminer le lien entre la contrainte d'adhésion (extraite de la cellule de force de 2500 N) et la contrainte maximale appliquée (extraite de la cellule de force de 500 kN). Un tel lien n'a pas pu être déterminé dans le cas présent. Premièrement, comme mentionné plus haut, les effets visqueux du plomb (qui n'ont pas été caractérisés dans ce travail) peuvent potentiellement venir compliquer l'interprétation des résultats. Deuxièmement, le dispositif expérimental dans sa forme actuelle ne permet pas une étude en conditions confinées : dès lors que la contrainte nominale atteint la limite d'élasticité de l'échantillon, celui-ci se déforme plastiquement dans la masse. En compression simple, si l'on admet le modèle de Pullen et Williamson [150], le degré de contact est égal à 0,25. Dans tous les cas, il est nettement inférieur à 1, et pourrait être encore plus faible que 0,25 en raison de l'écroutissement [151].

Des mesures de l'adhésion développée pour des contraintes appliquées inférieures ($\sigma < \sigma_y$) étant difficiles en raison de la très faible limite d'élasticité du plomb, la présente étude reste ainsi restreinte à un degré de contact quasi-constant (les variations étant simplement dues à l'écroutissement). En ajoutant à ceci les incertitudes quant à la prédiction de la contrainte maximale appliquée (en raison de l'effet tonneau notamment), aucune corrélation entre la contrainte maximale appliquée et la contrainte d'adhésion n'a pu être déterminée.

Ces limites rendent difficile la validation quantitative du modèle de Pullen et Williamson [150]. Il serait pour cela nécessaire d'étendre l'étude à des degrés de contact différents. Une solution intéressante à explorer serait d'utiliser un dispositif triaxial couplé au dispositif actuel. De cette manière, il serait possible d'atteindre des degrés de contact nettement supérieurs (de la même

manière que dans l'étude réalisée par Pullen et Williamson [150]) en évitant l'utilisation d'une matrice rigide, pouvant poser problème pour la mesure de l'adhésion en raison du développement de forces de frottement latérales. De plus, il est probable que les forces adhésives se développent très peu pour des valeurs de α trop faibles, ce qui est probablement la raison pour laquelle seul un matériau très fortement ductile comme le plomb a permis de mettre en évidence l'effet des forces adhésives. La construction d'une cellule de confinement adapté au dispositif décrit ici est malheureusement une opération coûteuse autant en temps qu'en termes financiers. Elle n'a pas pu être envisagée au cours de la présente thèse.

Les résultats de l'étude actuelle semblent également montrer une dépendance de la contrainte d'adhésion à l'amplitude des déplacements durant le cycle considéré. En effet, il est par exemple observé que l'adhésion au second chargement de 3 mm (correspondant donc à un déplacement total de 6 mm) est inférieure à celle du premier chargement de 5 mm. De la même manière, l'adhésion au troisième chargement de 3 mm (et donc à 9 mm) est inférieure à celle du premier chargement de 5 mm et du second chargement à 4 mm (correspondant à un déplacement total de 8 mm). Une explication possible de ce phénomène est de remarquer que les surfaces en contact s'étalent plus au cours d'un chargement pour des amplitudes de charges supérieures, permettant d'obtenir un contact plus intime à l'échelle des rugosités. Ce phénomène pourrait être lié au simple fait que plus l'amplitude du déplacement est grande, plus le temps nécessaire pour l'atteindre est long, ce qui permet une déformation plus importante des aspérités en raison de la viscosité du plomb. Ce contact intime est rompu lors de la séparation des surfaces, venant ainsi réduire l'adhésion. Des essais supplémentaires semblent ainsi utiles afin d'obtenir une meilleure compréhension de ce phénomène et de déterminer s'il s'agit d'un paramètre à prendre en compte pour la description du développement de l'adhésion, ou simplement d'un artefact causé par la viscosité du plomb. Il pourrait pour cela être utile d'introduire en fin de charge des paliers de relaxation ou d'effectuer ce type d'essais sur d'autres matériaux moins visqueux. Néanmoins, Les résultats présentés ici présentent l'avantage d'une preuve de concept. Ils mettent en évidence :

1. Qu'il est possible de mesurer une force d'adhésion dans un essai macroscopique.
2. Que cette force d'adhésion n'est pas liée à une accroche mécanique, mais de manière bien plus probable à des forces moléculaires, tel qu'il a été pris comme hypothèse lors de la formulation du modèle d'adhésion.
3. Que la force d'adhésion augmente avec la compression, ce qui, à ce stade et sans toutefois prouver définitivement la pertinence de cette approche, va dans le sens de l'introduction du degré de contact dans le modèle d'adhésion développé.

3.6 Conclusion

Une loi de contact adhésive, adaptée à la MPFEM, a été adaptée de la littérature et implémentée dans le code commercial d'éléments finis *Abaqus* [45]. Ce modèle multi-échelles, basé sur le potentiel inter-atomique de Lennard Jones exprimé sous forme de contrainte [141], est pondéré par le modèle de rugosité de Pullen et Williamson [150]. Il permet de prédire localement (en chaque nœud du maillage éléments finis) le niveau d'adhésion, évoluant avec l'augmentation de la surface effective de contact lors de la déformation élastoplastique des aspérités en contact. Ce modèle a été implémenté dans le logiciel *Abaqus* à l'aide d'une sous-routine utilisateur *VUINTERACTION*. Une fois cette implémentation vérifiée dans le cadre d'un contact plan, ce modèle a été confronté dans sa forme simplifiée aux modèles de contact entre sphères élastoplastiques de la littérature [124, 128]. Une étude expérimentale a ensuite été entamée afin d'étudier la formation de forces d'adhésion lors de la déformation plastique de deux surfaces en contact. Cette étude a donné quelques résultats encourageants même si beaucoup de travail reste à faire pour mettre en évidence les mécanismes à l'œuvre et permettre de valider ou d'améliorer le modèle de contact développé ici. Le modèle ainsi construit a pour vocation de pouvoir être utilisé dans le cadre d'assemblages granulaires, pour la prédiction des propriétés mésoscopiques des milieux granulaires telles que les surfaces de charge ou de rupture, ainsi que les phénomènes d'endommagement. Il s'agit de l'objectif principal du [chapitre 4](#) de cette thèse.

Le modèle de contact développé ici n'a certes pas été validé définitivement par des observations expérimentales (ce qui est regrettable mais n'était pas possible dans le temps imparti à la présente thèse). Néanmoins, il a été construit dans un cadre fortement ancré dans la littérature existante et n'est basé que sur des considérations physiques. Il n'introduit aucun paramètre ou concept dont le sens physique n'est pas clair ou qui n'est pas mesurable. Il est donc possible de conserver le cadre de ce modèle pour construire des échantillons expérimentaux qui permettront de valider ou d'invalider directement les hypothèses faites, et de les enrichir.

Différentes perspectives sont envisageables afin d'améliorer les prédictions numériques du modèle de contact développé. Il semble tout d'abord pertinent de poursuivre la validation du modèle de contact adhésif dans sa forme globale. Il est pour cela envisageable d'adapter une cellule triaxiale au dispositif présenté [figure 3.13](#). Ceci permettrait l'étude du développement de l'adhésion en conditions confinées, telles que rencontrées lors de la compression des poudres. En outre, le modèle de contact implémenté pourrait être amélioré en lui incorporant une forme d'adhésion tangentielle (correspondant en quelque sorte à un coefficient de frottement dynamique) ainsi qu'une valeur limite au cisaillement. Une description plus précise du lien entre le degré de contact et la contrainte normale appliquée à la surface rugueuse pourrait également être considérée, en ne se restreignant plus à l'hypothèse d'aspérités parfaitement plastiques.

Par ailleurs, une meilleure compréhension des mécanismes entrant en jeu lors du développement de l'adhésion semble également requise afin de construire un modèle adapté à la nature physico-chimique des poudres constituant le milieu granulaire. Une caractérisation de l'adhésion à l'échelle nanométrique permettrait de mettre en évidence et de quantifier les différents mécanismes physiques à l'origine de l'adhésion, et ainsi de donner des pistes d'amélioration du modèle de contact adhésif implémenté. Ce type d'approche a été proposé par Bérard et al. [153] lors de la caractérisation du développement de l'adhésion sur des systèmes modèles construits à partir de poudres de cellulose micro-cristalline couramment utilisées dans le domaine pharmaceutique. Une approche expérimentale micromécanique de ce type a également été initiée dans le cadre de cette thèse. Les résultats préliminaires de cette étude sont présentés [annexe D](#). Ils n'ont malheureusement pas permis de mesurer quantitativement des valeurs de contrainte ou d'énergie d'adhésion. En plus de permettre une meilleure compréhension scientifique des phénomènes d'adhésion, la poursuite de ces études permettrait également de déterminer les paramètres du modèle de contact actuel, tels que la limite d'élasticité ou l'énergie de Dupré.

4

Plasticité et endommagement des milieux granulaires ductiles cohésifs

Ce chapitre présente l'étude des propriétés mésoscopiques associées à un milieu granulaire cohésif, modélisé à l'aide de la MPFEM. Ces propriétés de plasticité et d'endommagement sont ici discutées.

Sommaire

4.1	Introduction	100
4.2	Procédure d'obtention des surfaces de charge	101
4.2.1	Principe	101
4.2.2	Définition d'un critère de plasticité	104
4.3	Étude de l'évolution des surfaces de charge	108
4.3.1	Impact de la densité relative	108
4.3.2	Impact de l'adhésion	110
4.4	Qualification de l'endommagement du milieu granulaire	112
4.4.1	Principe	112
4.4.2	Étude de l'évolution de la surface spécifique de contact	113
4.4.3	Analyse de l'endommagement	115
4.4.4	Impact de la densité relative	120
4.5	Vers un critère de rupture	123
4.5.1	Définition d'un critère de rupture	123
4.5.2	Résultats préliminaires	123
4.6	Conclusion	125

4.1 Introduction

La loi de contact adhésive développée au [chapitre 3](#), validée dans le cadre d'un contact simple entre deux particules sphériques élastoplastiques, peut être utilisée dans le cadre de la modélisation d'assemblages granulaires à l'aide de la MPFEM. Le modèle numérique présenté [figure 4.1](#) est pour cela utilisé. Celui-ci se compose d'un volume élémentaire de 50 particules élastoplastiques et de 296 particules périphériques utilisées pour l'application des CL. Au vu des conclusions du [chapitre 2](#), des CL à gradient de déplacement imposé aux frontières (de type GDF) sont ici implémentées. Une distance $d_{bc} = 2,5 r_{max}$ est pour cela utilisée afin de s'affranchir des effets de bord.

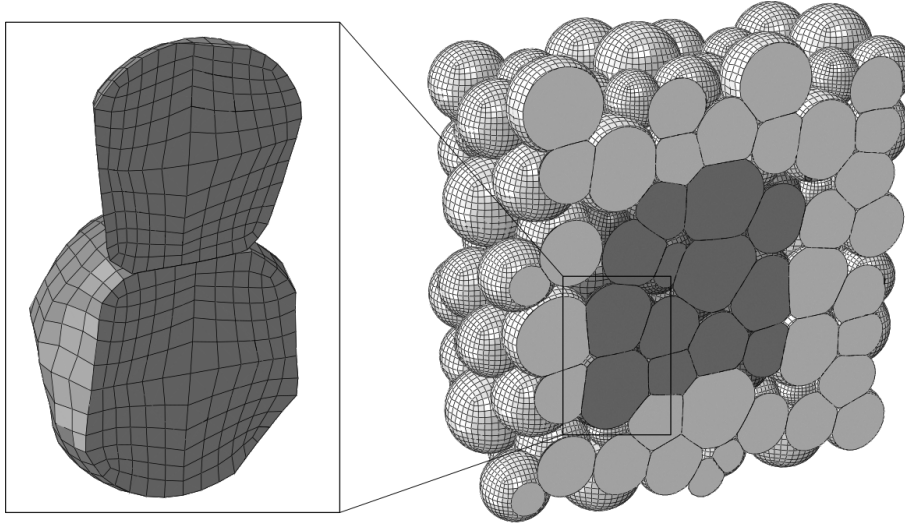


FIGURE 4.1 – Assemblage numérique utilisé dans le présent chapitre pour l'étude des propriétés mésoscopiques de plasticité et d'endommagement. La loi de contact adhésive développée au [chapitre 3](#) est utilisée et des CL de type GDF sont implémentées.

Le modèle numérique ainsi étudié est composé d'un total de 346 particules maillées. Il comptabilise 669 167 nœuds de calcul et inclut la prise en compte d'un contact potentiel entre 10092 paires de particules. En raison de la forte dépendance de l'énergie d'adhésion à la nature physico-chimique des particules étudiées, deux énergies de Dupré $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ.mm}^{-2}$ et $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$ sont utilisées dans la présente étude. Ces deux niveaux d'énergies correspondent aux extremums rencontrés dans la littérature concernant le contact adhésif entre solides métalliques [68]. La raideur de pénalité du modèle de contact se base sur la valeur par défaut du logiciel *Abaqus*. Une distance maximale d'interaction $\delta_{max} = 0,5 \mu\text{m}$ est ici utilisée (les particules ayant un rayon initial compris entre 82 et 147 μm). Les différents autres paramètres du modèle numérique correspondent à ceux présentés au [chapitre 2](#).

Ce chapitre a pour objectif d'étudier les propriétés mésoscopiques du volume de Cauchy équivalent à cet échantillon numérique. Des propriétés mécaniques et microstructurales en lien avec la déformation plastique et l'endommagement de l'échantillon numérique sont déduites des simulations. Différentes perspectives quant à l'étude de la rupture du milieu granulaire sont ensuite proposées.

4.2 Procédure d'obtention des surfaces de charge

4.2.1 Principe

La détermination numérique des surfaces de charge associées à un chargement initial s'effectue, telle qu'illustrée [figure 4.2](#), par une décharge élastique de l'échantillon numérique suivie d'une recharge dans toutes les directions de l'espace des déformations. Le développement d'un critère de plasticité présenté [sous-section 4.2.2](#) permet ensuite de déterminer, pour chaque direction de sollicitation, l'entrée en plasticité du VEP. Dans le cas présent, il a été choisi d'effectuer une décharge isotrope, permettant de se rapprocher d'un état de contrainte nul en fin de décharge.

Les surfaces de charge sont représentées dans le plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$, où σ_m correspond à la projection d'un point de l'espace des contraintes sur la trissectrice de l'espace des contraintes principales (axe d'équation $\sigma_I = \sigma_{II} = \sigma_{III}$, où σ_I , σ_{II} et σ_{III} correspondent aux contraintes principales, cf. [équation 4.1](#)) et $\tilde{\sigma}_d$ à sa projection sur l'axe orthogonal à la trissectrice contenu dans le plan de Rendulic (plan d'équation $\sigma_{II} = \sigma_{III}$, cf. [équation 4.2](#)). Les chemins de chargement peuvent être représentés de manière analogue dans l'espace des déformations ([équation 4.3](#) et [équation 4.4](#)).

$$\sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr} \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.1)$$

$$\tilde{\sigma}_d = \sigma_I - \frac{1}{2} (\sigma_{II} + \sigma_{III}) \quad (4.2)$$

$$h_v = \text{Tr} \underline{\underline{h}} \quad (4.3)$$

$$\tilde{h}_d = \frac{2}{3} \left[h_I - \frac{1}{2} (h_{II} + h_{III}) \right] \quad (4.4)$$

La contrainte $\tilde{\sigma}_d$ remplace ici la contrainte déviatoire σ_d utilisée [chapitre 2](#). En effet, les surfaces seuil étudiées dans le cas présent (surface de charge, de rupture entre autre) dépendent de l'angle de Lode [[154](#)]. Par conséquent, en restreignant l'étude au plan de Rendulic, deux points associés à une même valeur de contrainte moyenne σ_m seront trouvés pour une même surface seuil. Ces deux points se différencieront par le signe de $\tilde{\sigma}_d$, ce que ne permet pas σ_d (étant toujours positif par définition). Dans ce chapitre, $\tilde{\sigma}_d$ sera nommée "contrainte déviatoire" pour des raisons de simplification, du moins tant que le signe de $\tilde{\sigma}_d$ n'aura pas d'importance particulière. En effet, l'interprétation physique de $\tilde{\sigma}_d$ ne diffère quasiment pas de celle de σ_d en se restreignant au plan de Rendulic. Il en va de même pour la déformation déviatoire : \tilde{h}_d se substituant à h_d dans le cas présent. Cette définition, différente de celle présentée [section 2.4](#), permet de conserver l'information du signe de la contrainte (et de la déformation) déviatoire. Elle est adaptée au cas présent, les chemins de chargement étant approximativement contenus dans le plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$. Le chemin de décharge suivi des différents chemins de recharge étudiés seront également approximativement contenus dans ce plan, permettant ainsi d'obtenir la courbe de charge dans le plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$, qui sera par la suite appelée "surface de charge", afin de garder en mémoire qu'il s'agit d'une surface (en réalité, d'une hypersurface) dont il n'est observé que l'intersection avec le plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$.

L'utilisation d'une *restart*¹ est particulièrement adaptée à cette investigation des surfaces de charge. En effet, la charge et la décharge du milieu granulaire n'ont besoin d'être simulées qu'une

1. Le terme *restart* désigne la capacité du logiciel *Abaqus* à enregistrer l'état d'une analyse en cours et à le reprendre ultérieurement. Le principe d'un *restart* est donc de permettre la continuation d'une simulation à partir d'un point d'arrêt précédent, plutôt que de la recommencer depuis le début. Les résultats d'une simulation *Abaqus* sont enregistrés à la fin de chaque étape (*step*) dans un fichier de sortie (d'extension *.odb*). En utilisant la fonction de *restart*, il est possible de reprendre l'analyse à partir de cet état précédent, ce qui permet un gain de temps considérable. Le principe d'un *restart* dans *Abaqus* est donc de fournir une fonctionnalité de sauvegarde et de reprise d'analyse, offrant aux utilisateurs la possibilité de résoudre des problèmes nécessitant des itérations successives.

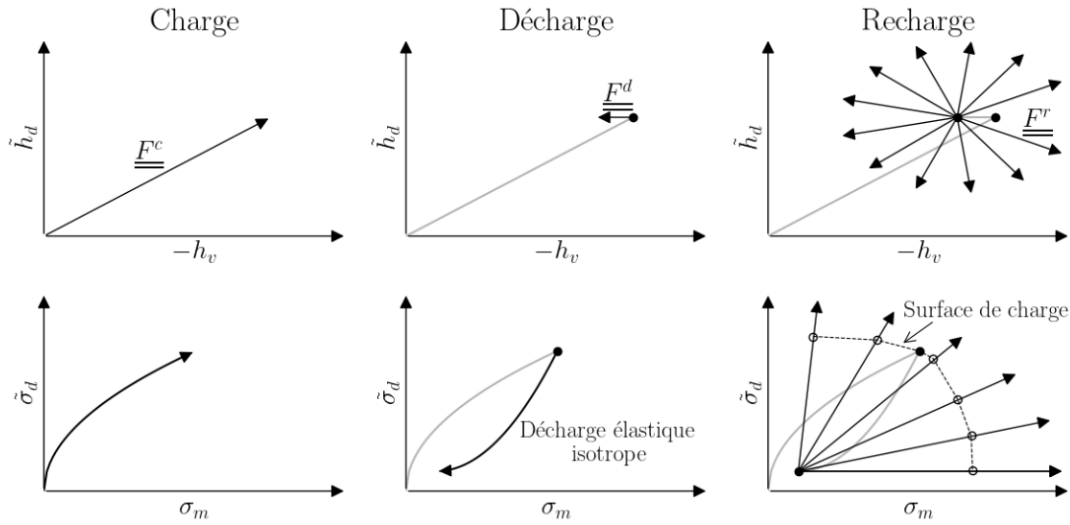


FIGURE 4.2 – Illustration du procédé de traçage des surfaces de charge et de rupture.

seule fois, tandis qu'une multitude de recharges doivent être effectuées pour l'obtention des surfaces de charge. Cependant, dans l'étude présente, la subroutine *VUINTERACTION* requiert l'utilisation d'une variable (nommée "variable d'état" dans le logiciel *Abaqus*) dont la valeur est enregistrée entre deux appels successifs de la subroutine (cette option permet l'introduction de paramètres de mémoire dans les sous-routines utilisateurs, cf. [annexe B](#) pour plus de détails). Malheureusement, cette variable d'état est réinitialisée aux changements de *step*, venant par la même occasion réinitialiser la valeur de l'adhésion. Ainsi, la décharge et la recharge du système devront nécessairement être effectuées lors d'un seul et même *step*. La charge est toutefois effectuée lors d'un *step* antérieur et un *restart* est effectué afin de n'avoir à effectuer qu'un seul calcul de charge (qui est le plus long) pour l'investigation des surfaces de charge.

Cette solution n'est pas optimale du point de vue physique car la remise à zéro des forces adhésives induit une perturbation du système se traduisant par l'apparition de vibrations. Le fait, de plus, d'effectuer cette remise à zéro en fin de charge (donc à la limite de plasticité) induit de la dissipation dans le modèle et modifie ainsi l'état de référence associé aux différentes recharges. Ce choix a néanmoins été effectué, car relancer la simulation de la charge autant de fois que nécessaire pour l'investigation des surfaces de charge était trop coûteux en termes de temps de calcul. Il est toutefois possible de noter que la dissipation plastique ainsi que la dissipation par frottement sont peu modifiées au changement de *step*. Cet effet indésirable a néanmoins quelques conséquences sur les résultats comme il sera vu plus loin.

Dans un tel contexte, trois transformations linéaires ont été définies, caractérisées par les tenseurs \underline{F}^c (pour la charge initiale), \underline{F}^d (pour la décharge) et \underline{F}^r (pour la recharge). Les déplacements \underline{u} imposés à chaque particule pilotée sont ensuite déduits de la configuration initiale via le tenseur \underline{F} associé au gradient de la transformation totale ($\underline{F} = \underline{F}^c$ à la charge, $\underline{F} = \underline{F}^d \cdot \underline{F}^c$ à la décharge et $\underline{F} = \underline{F}^r \cdot \underline{F}^d \cdot \underline{F}^c$ à la recharge) :

$$\underline{u} = (\underline{F} - \underline{I}) \cdot \underline{X} + \underline{u}^0 \quad (4.5)$$

où \underline{I} correspond au tenseur identité, \underline{X} au vecteur position dans la configuration de référence, associé à la particule considérée et \underline{u}^0 au déplacement de corps rigide associé à la transformation totale et défini par :

$$\underline{u}^0 = -\frac{1}{2} (\underline{F} - \underline{I}) \cdot \begin{pmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

avec (d_x, d_y, d_z) les dimensions de la cellule périodique initiale.

Chaque composante de déplacement appliquée à chacune des particules pilotées est imposée sous la forme d'une fonction du temps respectant les valeurs du [tableau 4.1](#). Entre deux valeurs, une interpolation est utilisée. Cette interpolation est définie de sorte que l'évolution du déplacement avec le temps soit régulière ("*Smooth step*" dans *Abaqus* [45]). Un palier de stabilisation est effectué au changement de *step* afin de réduire les vibrations de la simulation dynamique liées à la remise à zéro des forces adhésives ; et ainsi de réduire l'effet de cette perturbation.

	Temps	Déplacement
fin de charge →	t^c	u_i^c
	$t^c + 0.1 t^d$	u_i^c
fin de décharge →	t^d	u_i^d
fin de recharge →	t^r	u_i^r

TABLEAU 4.1 – Déplacements imposés lors de la séquence décharge/recharge à chaque particule suivant la direction i .

De la même manière qu'au [chapitre 2](#), le tenseur \underline{F}^c est calculé à partir de l'estimation d'une densité cible et d'un chemin de chargement isotrope ou en matrice. La densité relative finale ρ_f atteinte en fin de charge diffère de la densité relative cible pour les mêmes raisons que celles évoquées au [chapitre 2](#). En effectuant une décharge isotrope, le gradient de la transformation associé à la décharge \underline{F}^d s'exprime :

$$\underline{F}^d = [1 + \zeta (1 - \text{Tr}\underline{F}^c)] \underline{I} \quad (4.7)$$

où ζ est un coefficient modulant l'amplitude de la décharge, déterminé par essai-erreur. Ce paramètre est pris égal à $\zeta = 0.01$ afin de se rapprocher d'un état de contrainte nul, sans pour autant passer dans un état de traction. Plusieurs recharges \underline{F}^r associées à différents chemins de chargements sont ensuite effectuées.

Comme présenté [figure 4.2](#), différents chemins de chargement associés à la recharge, définis par $h_v^r = A \cos \varphi$ et $\tilde{h}_d^r = A \sin \varphi$ sont explorés lors de la détermination des surfaces de charge associées au milieu granulaire, où $\varphi \in [0; 2\pi]$ permet de définir la direction de la recharge et $A = 1,5 h_v^d$ son amplitude, avec h_v^d l'amplitude de la décharge isotrope. L'[équation 4.3](#) et l'[équation 4.4](#) permettent alors d'obtenir les valeurs principales du tenseur de Hencky associé à chacune des recharges :

$$\begin{cases} h_I^r &= -A \left(\frac{\cos \varphi}{3} + \sin \varphi \right) \\ h_{II}^r = h_{III}^r &= -A \left(\frac{\cos \varphi}{3} - \frac{\sin \varphi}{2} \right) \end{cases} \quad (4.8)$$

Le tenseur gradient de déplacement associé à la recharge \underline{F}^r étant diagonal, $\underline{F}^r \cdot \underline{F}^{rT} = \underline{F}^{r2}$. Il en résulte ainsi que :

$$\underline{\underline{F}}^r = \begin{pmatrix} e^{h^r_I} & 0 & 0 \\ 0 & e^{h^r_{II}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{h^r_{III}} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

4.2.2 Définition d'un critère de plasticité

Dans ce chapitre, les surfaces de charge sont assimilées à des surfaces iso-dissipation. Ces surfaces ont en effet l'avantage de contenir des informations sur la plasticité par glissement des particules et par cisaillement, tandis que les surfaces isodensité, classiquement utilisées expérimentalement, ne décrivent que la variation de volume de l'échantillon [35]. Par ailleurs, les surfaces isodensité amènent à une prédiction de l'entrée en plasticité pouvant être considérée comme anticipée, en raison du caractère progressif de la transition élastique-plastique. La figure 4.3 illustre cette observation, en représentant les variations de la contrainte moyenne σ_m en fonction de la déformation volumique h_v lors d'un cycle constitué d'une charge, d'une décharge et d'une recharge, toutes trois isotropes. Les isodensités prédisent une entrée en plasticité pour une déformation volumique à la recharge égale à celle atteinte en fin de charge. Pour une telle déformation, la contrainte moyenne lors de la recharge est inférieure à celle obtenue en fin de charge. Il en résulte que le point de chargement se retrouve à l'extérieur des surfaces isodensité.

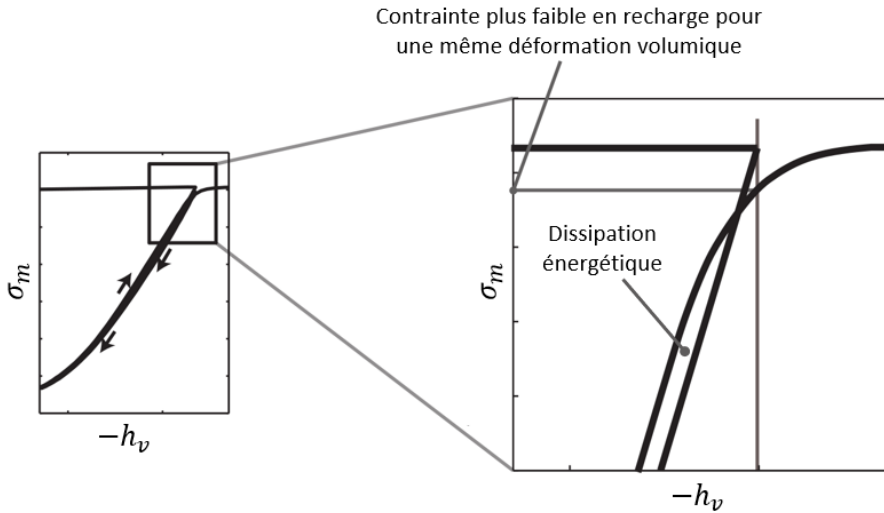


FIGURE 4.3 – Évolution de la contrainte moyenne en fonction de la déformation volumique lors d'un cycle charge/décharge/recharge. Figure inspirée des travaux de Harthong [35].

Pour ces raisons, un critère basé sur l'augmentation de l'énergie dissipée E_d est ainsi utilisé. Ce critère a été introduit par Schmidt et al. [97] et utilisé, entre autres, par Abdelmoula [1]. Pour un matériau élastoplastique, l'énergie dissipée correspond à la somme de l'énergie plastique E_p et de l'énergie dissipée par frottement E_f :

$$E_d = E_p + E_f \quad (4.10)$$

Dans le cadre d'un modèle MPFEM, l'énergie plastique peut être directement déterminée de la connaissance du tenseur des contraintes de Cauchy $\underline{\underline{\sigma}}$ et du tenseur des vitesses de déformation plastique $\underline{\underline{D}}^{pl}$, exprimés en chaque nœud du maillage éléments finis :

$$E_p = \int_V \left(\int_0^t \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^{pl} dt \right) dV \quad (4.11)$$

où V représente le volume total du modèle numérique. L'énergie dissipée par frottement est, quant à elle, reliée aux vecteurs \underline{v} et $\underline{\tau}^f$, exprimés en chaque nœud de la surface du modèle et représentant respectivement la vitesse relative des surfaces en contact et les efforts surfaciques de frottement :

$$E_f = \int_S \left(\int_0^t \underline{v} \cdot \underline{\tau}^f dt \right) dS \quad (4.12)$$

avec S la surface totale de contact (somme des surfaces de contact pour chaque paire de particules en contact). Il convient de mentionner que, dans le cas présent et pour des raisons de simplicité, les énergies, plastique et dissipée par frottement, associées à l'ensemble de l'échantillon numérique ont été utilisées pour la détermination de l'entrée en plasticité. Il serait plus scrupuleux de ne considérer que les dissipations énergétiques associées au VEP. Au vu des résultats obtenus, il semble toutefois que cette imprécision n'induit pas de modifications drastiques quant à la prédiction des surfaces de charge, en raison de la stabilisation de l'état de contrainte. En effet, les surfaces iso-dissipation détectent une variation de l'énergie dissipée, sa valeur n'étant pas prise en compte. L'affirmation précédente signifie, en d'autres termes, qu'il est fait l'hypothèse que l'entrée en plasticité se produise en même temps pour le VEP et pour l'échantillon numérique complet. Cette hypothèse est sans doute inexacte, mais la contrainte variant peu lors de la transition élastique-plastique, la surface iso-dissipation observée dans l'espace des contraintes n'est affectée que de manière négligeable.

Le choix d'un critère portant sur l'augmentation de l'énergie dissipée permet finalement de déterminer l'entrée en plasticité du modèle numérique. La [figure 4.4](#) représente l'évolution de cette énergie dissipée lors d'un essai de compression isotrope, réalisé jusqu'à une densité relative $\rho_f = 0,79$ ($t \in [0; t_c]$) suivie d'une décharge élastique isotrope ($t \in [t_c; t_d]$) et enfin d'une recharge dans une direction quelconque de l'espace des contraintes ($t \in [t_d; t_r]$).

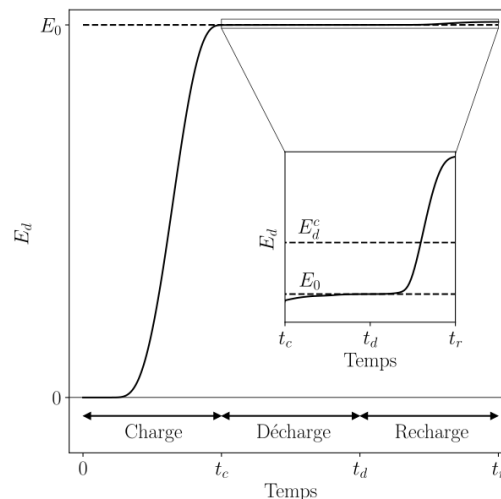


FIGURE 4.4 – Évolution de l'énergie volumique dissipée au cours d'un essai composé d'une charge isotrope de densité relative $\rho_f = 0,79$, d'une décharge élastique isotrope et d'une recharge suivant une direction quelconque de l'espace des contraintes.

Lors de la phase de charge, le réagencement et la déformation des particules entraînent une nette augmentation de l'énergie dissipée. Celle-ci stagne ensuite lors de la phase de décharge. Enfin, l'énergie dissipée reste quasi-constante en début de recharge, puis se met à augmenter sensiblement en raison de la présence de plasticité à la recharge (les chemins de recharge étant d'amplitude supérieure à celle du chemin de décharge). Une très faible augmentation de l'énergie dissipée par frottement est toutefois observée lors de la phase de décharge, indiquant la présence

d'un léger réagencement. Cette observation concorde avec les résultats obtenus par Harthong [35] montrant la présence d'hystérésis lors d'un cycle décharge/recharge correspondant à une dissipation énergétique² (figure 4.3). En raison de cette faible augmentation, le seuil de plasticité E_d^c de cette étude est fixé par rapport à l'énergie en fin de décharge, notée E_0 . Il correspond, dans le cas présent, à une augmentation de l'énergie dissipée de 0,3 % par rapport à cette valeur. Ce choix se base sur des travaux antérieurs [1, 35, 97] et est discuté ci-dessous.

Une interpolation de cette énergie seuil E_d^c sur la contrainte moyenne et déviatoire permet finalement de représenter la surface de charge associée au chargement initial. La figure 4.5 illustre cette méthode d'obtention des surfaces de charge, en représentant huit chemins différents de recharge ainsi que leur entrée en plasticité vis à vis du critère énergétique décrit ci-dessus, avec un seuil pris égal à $E_d^c = E_0(1 + 0,3 \%)$. Il convient de rappeler que, dans cette étude, la convention de la mécanique des sols, où une contrainte associée à un état de compression est prise comme positive, est utilisée.

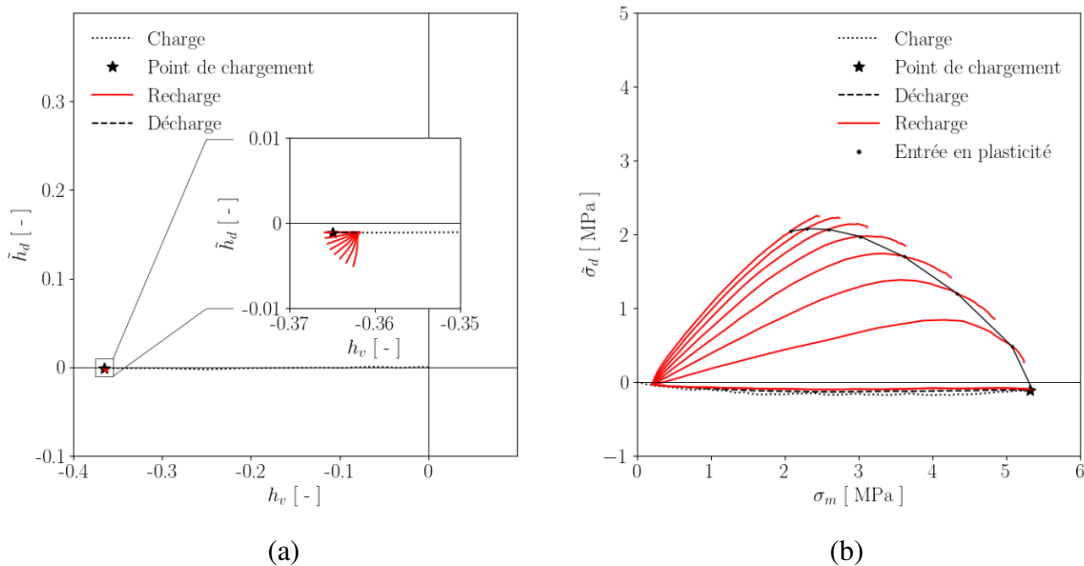


FIGURE 4.5 – Détermination de la surface de charge associée à un chargement isotrope de densité relative $\rho_f = 0,79$: représentation de la charge, de la décharge élastique isotrope, ainsi que de huit recharges suivant différentes sollicitations. (a) Déformation volumique vs. déformation déviatoire et (b) contrainte moyenne vs. contrainte déviatoire.

Il ne reste finalement plus qu'à déterminer la valeur du seuil énergétique à utiliser pour la détermination de l'entrée en plasticité du système modélisé. La figure 4.6 représente les surfaces iso-dissipation obtenues sur le même essai isotrope de densité relative $\rho_f = 0,79$ pour différentes valeurs de seuil utilisées. Les résultats obtenus dans le cas présent confortent le choix d'un seuil énergétique pris égal à $E_d^c = E_0(1 + 0,3 \%)$ dans le cas d'une charge isotrope de densité relative $\rho_f = 0,79$, permettant d'observer une bonne concordance entre l'entrée en plasticité et le point de chargement initial. Par ailleurs, une augmentation supérieure du seuil ne change plus sensiblement la forme des surfaces de charge. Cette observation s'explique en remarquant (en accord avec la figure 4.3) que les variations de l'état de contrainte sont faibles une fois la plasticité établie.

Dans la suite de cette étude, le seuil de plasticité a systématiquement été choisi afin de permettre la convergence des surfaces de charge. Il correspond à un seuil $E_d^c = E_0(1 + 0,3 \%)$ pour les chargements à des densités relatives $\rho_f \geq 0,75$. A des densités relatives inférieures et pour des

2. La variation observée pendant la phase de décharge est probablement amplifiée par la perturbation créée par la remise à zéro du paramètre α lors du changement de *step*.

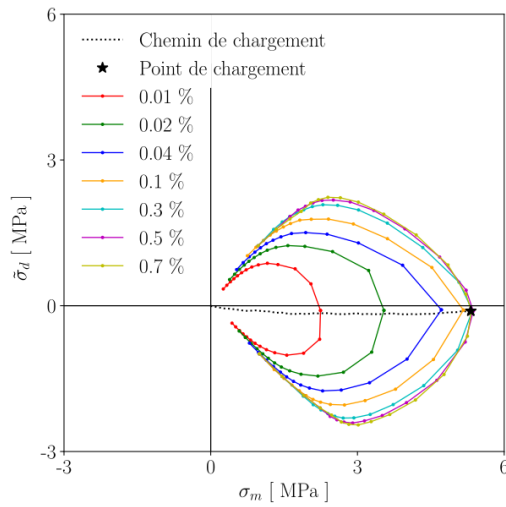


FIGURE 4.6 – *Impact du seuil énergétique sur les surfaces de charge associées à un chargement isotrope de densité relative $\rho_f = 0,79$ sans adhésion.*

énergies d'adhésion non-nulles, l'étude de l'impact du seuil sur la forme des surfaces de charge a révélé qu'un seuil supérieur était nécessaire pour permettre la stabilisation des surfaces de charge. Ce constat s'explique en remarquant que l'énergie dissipée au cours de la décharge cesse d'être négligeable à faible densité relative. Cette observation est associée aux perturbations engendrées par le changement de *step* entre la charge et la décharge. En effet, comme expliqué précédemment, le changement de *step* induit une remise à zéro de la "variable d'état" associée au degré de contact α utilisé dans la subroutine utilisateur. Cette remise à zéro brutale génère une dissipation parasite venant perturber le critère de plasticité. L'impact de cette perturbation est aggravé à faible densité relative en raison de la moindre stabilité de l'échantillon numérique.

4.3 Étude de l'évolution des surfaces de charge

4.3.1 Impact de la densité relative

De la même manière qu'au chapitre 2, deux chemins de chargement initiaux (correspondant à de la compression isotrope et en matrice) sont ici étudiés. La figure 4.7 présente l'évolution des surfaces de charge avec la densité relative pour ces deux chemins de chargement, avec et sans adhésion inter-particulaire.

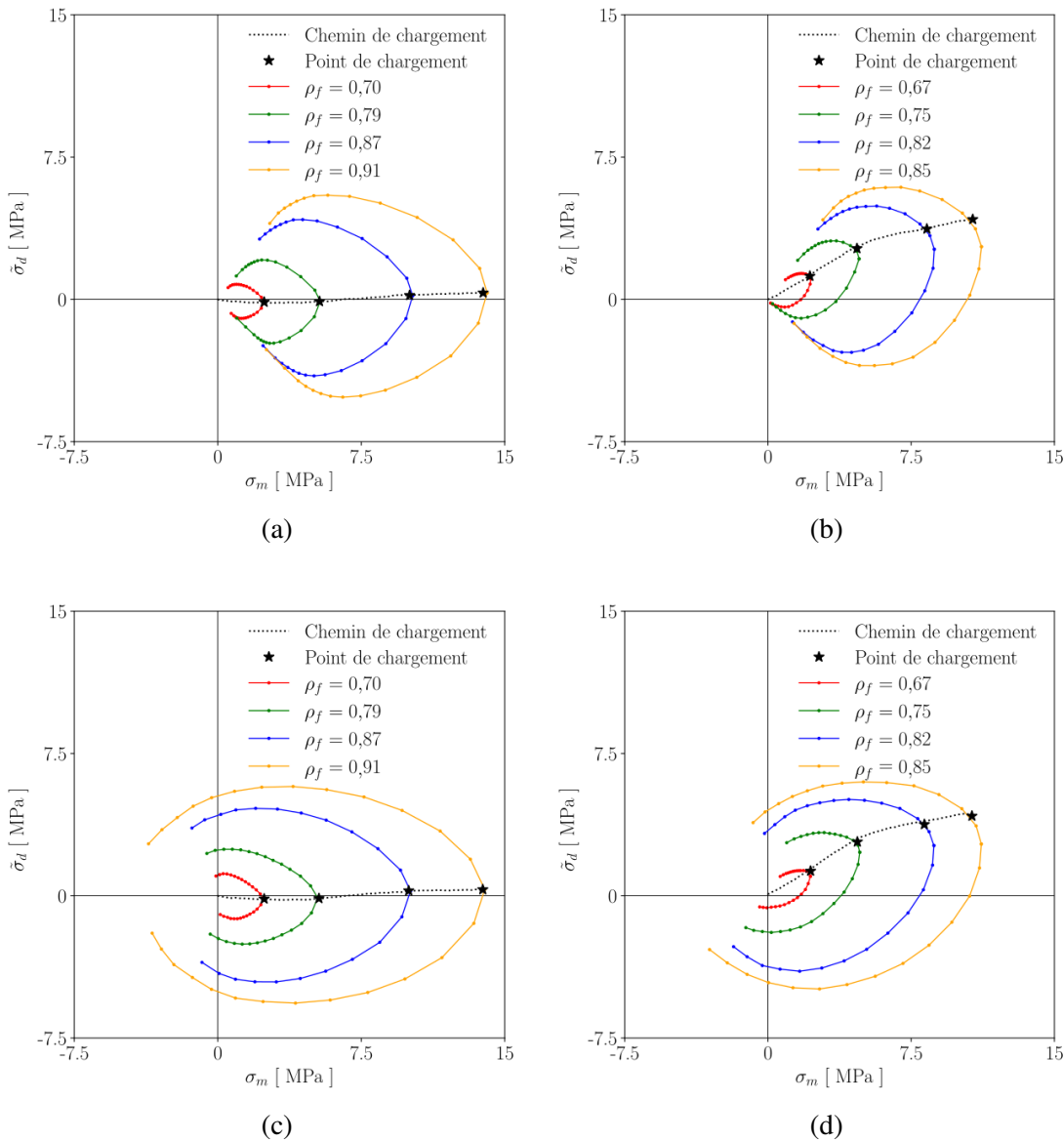


FIGURE 4.7 – Évolution des surfaces de charge avec la densité, pour une énergie d'adhésion (a,b) $\gamma = 0 \text{ mJ}\cdot\text{mm}^{-2}$ et (c,d) $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ}\cdot\text{mm}^{-2}$ et un chargement (a,c) isotrope et (b,d) en matrice.

Cette figure illustre la dépendance au chemin de chargement des propriétés de plasticité associées au milieu granulaire. De l'écroutissage isotrope couplé à de l'écroutissage cinématique sont en effet observés. Une homothétie de la surface de charge semble être observée au cours de la densification dans le cas d'un chargement isotrope ((figure 4.7a et figure 4.7c)). Dans le cas de chargements en matrice (figure 4.7b et figure 4.7d), cette homothétie est couplée à une rotation

des surfaces de charge, en raison de la déviation du chemin de chargement. Cette observation illustre l'adaptation de la microstructure du milieu granulaire au chargement extérieur, optimisant sa résistance mécanique suivant la direction de sollicitation [96].

Par ailleurs, il est possible d'observer une certaine asymétrie d'axe σ_m dans la forme de la surface de charge associée au chargement isotrope (principalement sur la figure 4.7a pour les faibles densités relatives)³. Ce constat corrobore les observations de Schmidt et al. [107], ayant mis plus en lumière l'impact de l'angle de Lode [154] sur la forme des surfaces de charge à l'aide d'observations dans le plan déviatoire (figure 4.8).

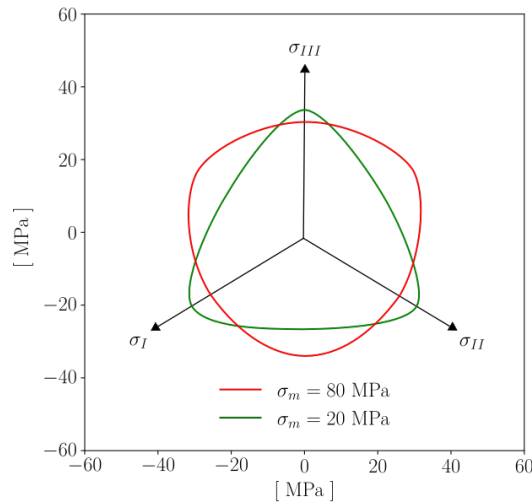


FIGURE 4.8 – Surfaces de charge dans le plan déviatoire pour différentes pressions hydrostatiques. Résultats tirés des travaux de Schmidt et al. [107].

Il serait ainsi intéressant de compléter la caractérisation dans le plan déviatoire initiée par Schmidt et al. [107], en séparant les surfaces associées à un phénomène d'endommagement de celles associées au phénomène de consolidation et en observant l'influence de l'énergie d'adhésion et de la densité sur la forme de ces surfaces. Ceci permettrait de mettre plus en évidence l'influence de l'angle de Lode : les modèles de plasticité isotropes existants ne permettent à ce jour pas de définir la dépendance observée par Schmidt et al. [107] entre l'angle de Lode et la pression hydrostatique.

Enfin, il est également possible de remarquer sur la figure 4.7d (et dans une moindre mesure sur la figure 4.7b) que l'extremum associé à la surface de charge tend à s'éloigner du point de chargement et à se rapprocher de l'axe hydrostatique pour des densités relatives élevées. Cette observation concorde avec les prédictions MPFEM de Abdelmoula [1]. Ils peuvent s'expliquer en remarquant qu'à haute densité relative, l'impact de l'orientation des contacts sur la réponse mécanique du milieu granulaire diminue, la faisant tendre vers celle associée au matériau dense, pour lequel l'écroutissage est isotrope par hypothèse [1]. Ces résultats numériques, non-visibles dans le cadre de modélisations en éléments discrets, correspondent à des observations expérimentales, telles que celles réalisées par Schneider et Cocks [39].

3. La contrainte de Mises $\sigma_d = |\tilde{\sigma}_d|$ est en effet supérieure dans le cas $\tilde{\sigma}_d = \tilde{\sigma}_d^+$ pour de petites valeurs de σ_m , tandis qu'elle est supérieure dans le cas $\tilde{\sigma}_d = \tilde{\sigma}_d^-$ pour des contraintes moyennes plus élevées, où $\tilde{\sigma}_d^+$ et $\tilde{\sigma}_d^-$ correspondent aux deux contraintes déviatoires, positive et négative respectivement, définies pour une même valeur de σ_m .

4.3.2 Impact de l'adhésion

La figure 4.9 présente les surfaces de charge obtenues pour différents niveaux d'adhésion interparticulaire. Cette figure met en évidence l'impact de ce paramètre sur la réponse mécanique du milieu granulaire suivant des chemins de déformation très déviatoires (rapport $|\tilde{\sigma}_d|/|\sigma_m|$ élevé). En effet, les surfaces de charge associées à des valeurs élevées d'adhésion se situent à l'extérieur des autres surfaces de charge, indiquant une entrée en plasticité plus tardive.

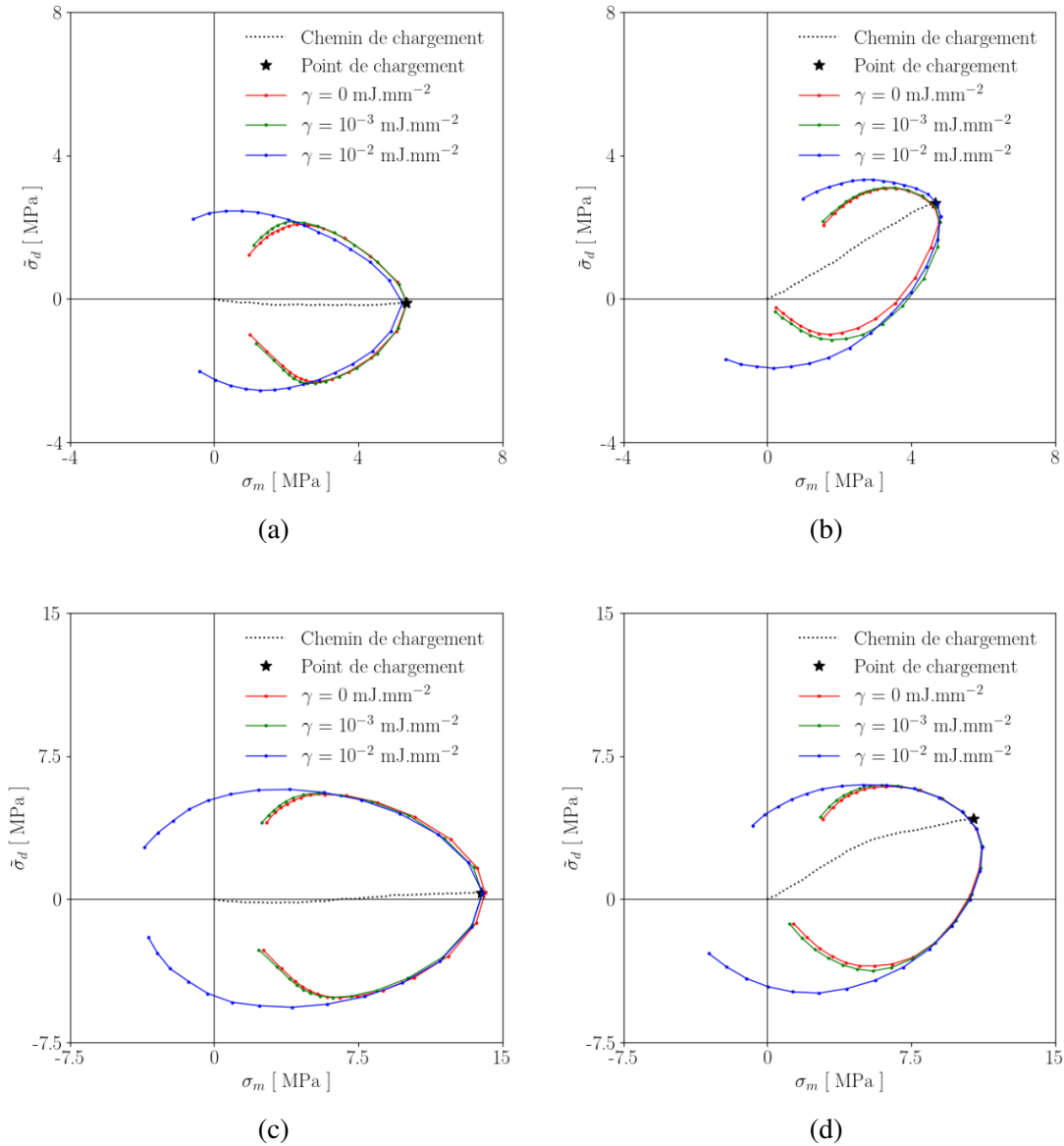


FIGURE 4.9 – Évolution des surfaces de charge avec l'adhésion, pour une densité finale (a) $\rho_f = 0,79$, (b) $\rho_f = 0,75$, (c) $\rho_f = 0,91$ et (d) $\rho_f = 0,85$ et un chargement (a,c) isotrope et (b,d) en matrice.

Par ailleurs, la présence d'adhésion permet également de définir une surface de charge pour des valeurs de σ_m inférieures (pouvant même être négatives dans le cas $\gamma = 10^{-2}$ mJ.mm⁻²). Ceci montre que pour cette gamme de chargements, l'adhésion interparticulaire est suffisamment forte pour que le seuil de plasticité soit atteint avant la décohésion de l'échantillon numérique. Ce constat illustre le lien direct entre l'adhésion inter-particulaire et le développement de la cohésion

du milieu granulaire. Pour des valeurs d'adhésion élevées, le milieu granulaire sera en effet plus en mesure de résister à des chemins fortement déviatoires.

L'impact de l'adhésion semble plus limité pour des rapports $|\tilde{\sigma}_d|/|\sigma_m|$ inférieurs (et $\sigma_m > 0$). Il est en effet observé que la surface de charge est très peu affectée par la présence d'adhésion dans cette zone. Un modèle de contact non-adhésif, plus simple, permet donc une bonne approximation des surfaces de charge dans une zone assez large autour du point de chargement. Cette observation s'explique par la présence plus rare de contraintes de traction (qui deviennent négligeables devant les contraintes de compression) au niveau des contacts entre particules dans cette zone de l'espace des contraintes.

La [figure 4.9a](#) montre une surface de charge pour $\rho_f = 0,79$ et $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ}\cdot\text{mm}^{-2}$ se situant à l'intérieur de celle sans adhésion pour ce type de chargement. Cette observation indique une entrée en plasticité plus précoce en présence d'adhésion. Une telle observation n'est pas retrouvée dans le cas de la compression en matrice et d'une compression isotrope à une densité $\rho_f = 0,91$. Néanmoins, la différence étant très faible, il est possible que cet effet soit lié à une erreur numérique, une imperfection du modèle ou un manque de précision du pilotage.

4.4 Qualification de l'endommagement du milieu granulaire

Les surfaces de charge présentées dans la section précédente permettent de définir la limite de plasticité associée au milieu granulaire, mais ne sont pas suffisantes pour caractériser complètement son comportement mécanique. En effet, ces surfaces ne sont pas complètes et ne permettent donc pas de prédire la limite du domaine d'élasticité associée à des chemins fortement déviatoires ou dilatants. En effet, il est observé que la contrainte est limitée pour de tels chargements ; celle-ci n'augmentant plus avec la déformation. Des phénomènes irréversibles se produisent, mais sans que l'énergie dissipée atteigne le seuil des 0,3 % défini ci-dessus. Ultimement, ces phénomènes conduisent à la séparation des particules (figure 4.10) et à une dégradation très forte des propriétés mécaniques. L'étude de ce phénomène est l'objet de la présente section. Cette étude s'appuie sur la définition de grandeurs moyennées sur le VEP et ne considère aucune forme de localisation. La notion d'endommagement, qui est bien adaptée au formalisme de la mécanique des milieux continus, se prête bien à cette approche. Par hypothèse, l'endommagement est ici relié, quoique de manière indirecte, aux surfaces de contact entre les particules, comme expliqué ci-après.

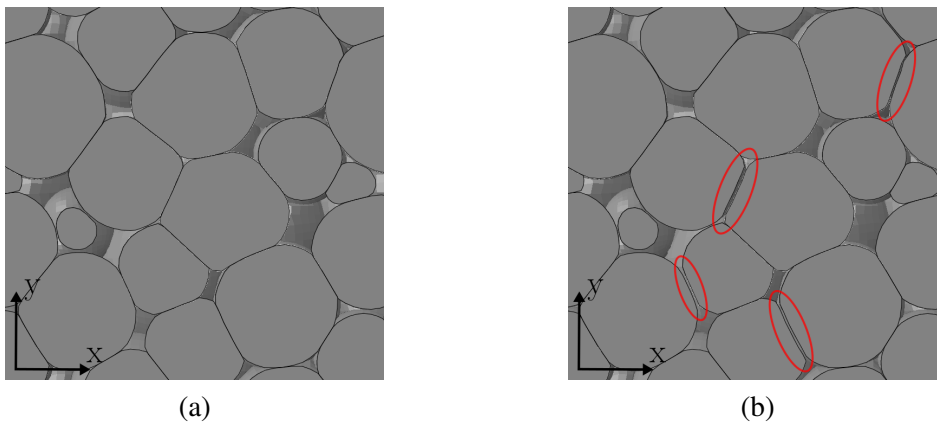


FIGURE 4.10 – Microstructure d'un milieu granulaire comprimé de manière isotrope (a) en fin de décharge élastique et (b) en fin de recharge suivant un chemin correspondant approximativement à une traction simple d'axe x .

4.4.1 Principe

L'endommagement correspond à une dégradation des propriétés mécaniques des matériaux, pouvant mener à la rupture. Cette notion est couramment reliée au développement de microfissures apparaissant au sein du matériau. L'endommagement peut ainsi être étudié à l'aide d'une quantification directe de cette détérioration à l'échelle microstructurale, ou de manière indirecte à l'aide de l'examen de l'évolution de propriétés mécaniques conduisant au phénomène de rupture. Dans cette partie, une étude de l'endommagement à travers l'évolution de la surface spécifique de contact notée Γ est proposée :

$$\Gamma = \frac{S}{V} = \frac{S}{V_0 \det \underline{\underline{F}}} \quad (4.13)$$

où S correspond à la surface de contact inter-particules totale développée au sein du VER⁴, V à son volume, V_0 à son volume initial et $\underline{\underline{F}}$ à son gradient de déplacement. Le caractère discret offert par la MPFEM permet en effet l'analyse de l'évolution de cet indicateur microstructural. L'étude de

4. Obtenue par sommation des surfaces associées à chaque contact du modèle MPFEM. Ces surfaces peuvent être obtenues à l'aide de la variable de sortie *CAREA* du logiciel *Abaqus* par écriture directe dans le fichier d'entrée.

l'évolution des iso-surfaces spécifiques présentée ci-après a pour vocation de caractériser la capacité d'adaptation au chargement de la microstructure du milieu granulaire, dans l'optique d'étudier de manière qualitative les mécanismes d'endommagement se produisant au sein du VEP. Il est toutefois possible de noter que la surface spécifique est un indicateur incomplet, dans la mesure où elle ne prend pas en compte l'anisotropie induite par l'orientation des surfaces de contact. En effet, l'adaptation de la structure des contacts peut résulter en une consolidation pour certains chemins de chargement et, en même temps, en une perte de résistance pour d'autres chemins, comme cela a été montré par Harthong et al. [96]. La surface spécifique totale ne donne qu'une idée moyenne de cette évolution. Ainsi, le lien entre surface spécifique et endommagement n'est pas direct. La déformation élastique affecte également la surface spécifique et vient encore perturber ce lien. Ce point est discuté ci-dessous.

4.4.2 Étude de l'évolution de la surface spécifique de contact

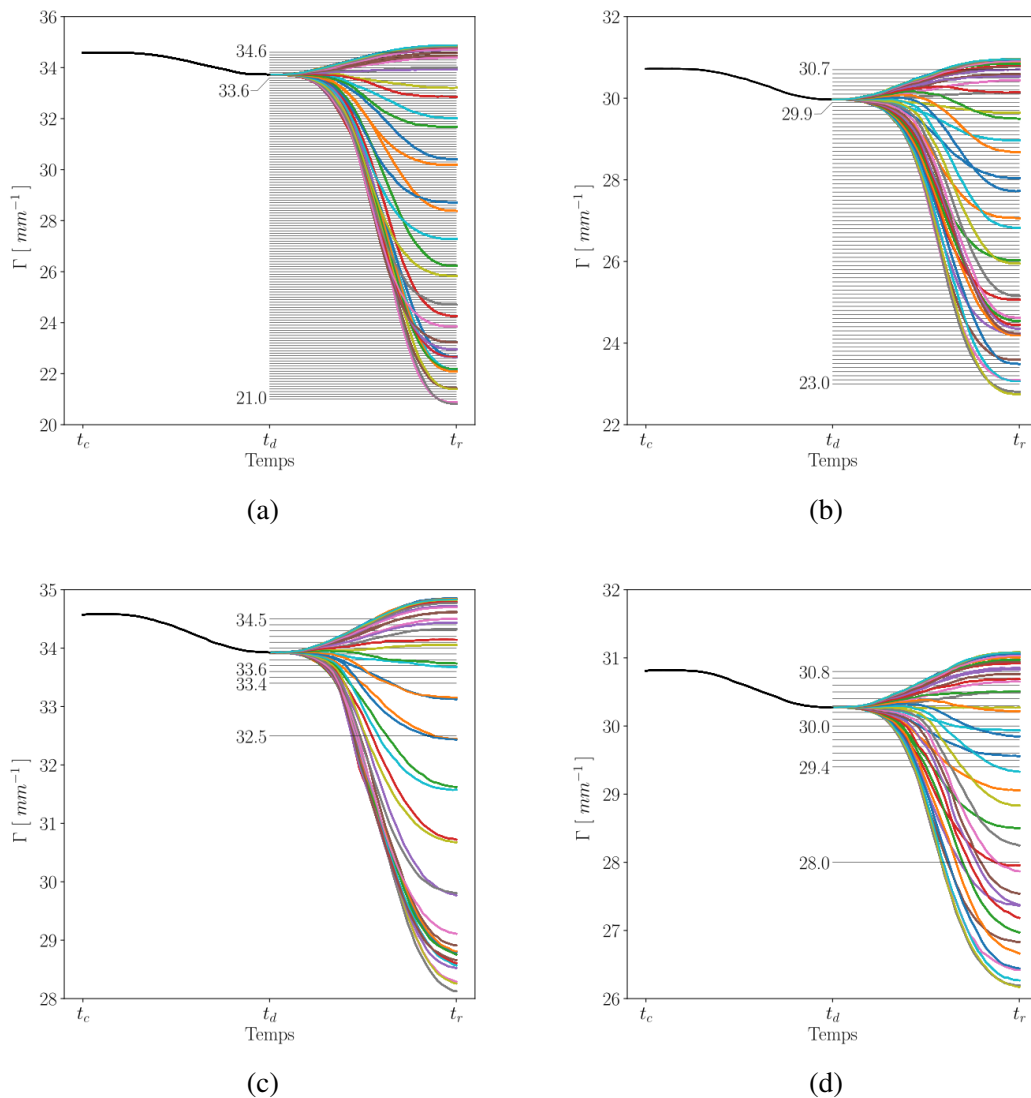


FIGURE 4.11 – Évolution de la surface spécifique suivant les différents chemins de chargement associés à un chargement initial (a,c) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (b,d) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, avec une adhésion (a,b) $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ.mm}^{-2}$ et (c,d) $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$.

La figure 4.11 représente l'évolution de la surface spécifique de contact lors de la décharge et des différentes recharges étudiées. Les résultats présentés correspondent à un chargement isotrope jusqu'à une densité relative $\rho_f = 0,91$ et en matrice jusqu'à une densité relative $\rho_f = 0,85$, avec des énergies de surface $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ.mm}^{-2}$ et $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$. Durant la décharge, la surface spécifique de contact diminue fortement en raison de la relaxation élastique de l'échantillon. Cette dépendance de la surface spécifique de contact à la déformation élastique montre que l'évolution de la surface spécifique de contact ne peut pas être assimilée directement à un mécanisme d'endommagement (ni d'ailleurs de consolidation), puisque la perte de surface spécifique par retour élastique n'est pas liée à une perte de résistance mécanique de l'échantillon. Différentes évolutions (schématisées sur la figure 4.12) sont observées en fonction du chemin de recharge (on se réfère ici aux chemins dans l'espace des déformations) :

- pour des recharges contractantes et fortement déviatoires (zone ③), la surface spécifique de contact ré-augmente au cours de la recharge ;
- pour des recharges dilatantes faiblement déviatoires (zone ④), la surface spécifique de contact continue de diminuer au cours de la recharge ;
- enfin, pour des recharges correspondant à la zone ② présentant à la fois de la dilatation et du glissement, la surface spécifique de contact diminue jusqu'à atteindre un minimum, avant de ré-augmenter dans un second temps. Cette évolution de la surface spécifique est plus visible en l'absence d'adhésion (figure 4.13) mais apparaît également dans le cas de contacts adhésifs.

Une interprétation de ces différents types de comportement peut être donnée en supposant que le mécanisme de glissement à volume constant implique une augmentation de la surface de contact, ce qui est le corollaire du phénomène de dilatance. En effet, en imposant une déformation à volume constant, les particules doivent se déformer pour accommoder le glissement sans l'accompagner d'une augmentation de volume. D'autre part, un chargement dilatant impose une diminution de la surface de contact. Dans la zone ④, la dilatation l'emporte ; dans la partie dilatante de la zone ③, le glissement l'emporte ; tandis que dans la zone ②, une compétition entre ces deux phénomènes est observée. Il est, par ailleurs, également possible que ce comportement soit influencé par un mécanisme de transfert entre déformation élastique et déformation plastique.

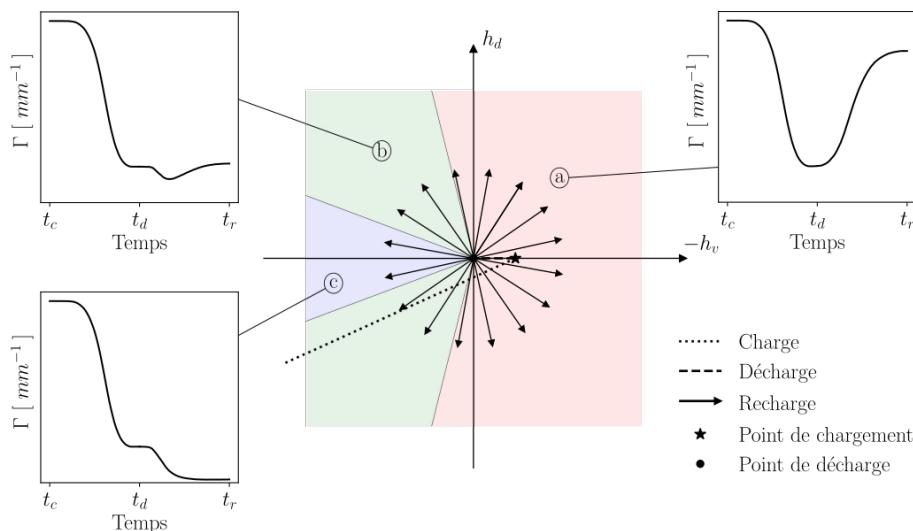


FIGURE 4.12 – Illustration des différents régimes d'évolution de la surface spécifique de contact dans l'espace des déformations.

En l'absence d'adhésion (figure 4.13), la surface spécifique de contact atteint une valeur inférieure en fin de charge. Celle-ci diminue par ailleurs nettement plus au cours de la décharge et

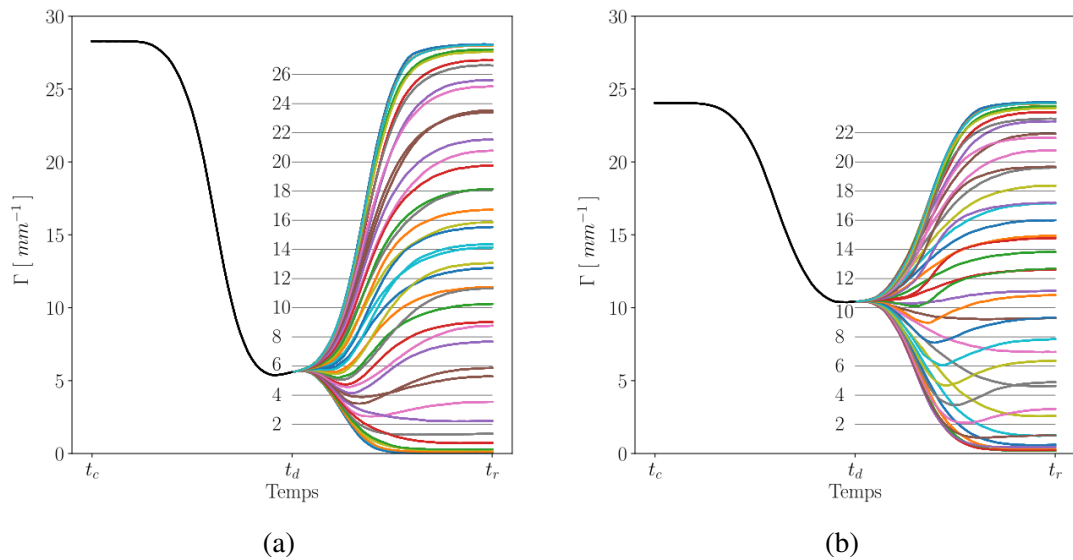


FIGURE 4.13 – Évolution de la surface spécifique suivant les différents chemins de chargement associés à un chargement initial (a) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (b) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, sans adhésion.

retourne à zéro pour un certain nombre des chemins de recharge étudiés. Durant la décharge élastique complète de l'échantillon, les différents contacts entre particules retrouvent une courbure, ramenant ainsi la surface spécifique à zéro. La surface spécifique non-nulle observée [figure 4.13](#) vient du fait d'une décharge incomplète. Pour cette raison, la notion même d'endommagement est dépourvue de sens en l'absence d'adhésion. En effet, un matériau granulaire non cohésif ne possède par nature aucune tenue mécanique à l'état déchargé. Il ne peut en avoir qu'en présence de forces impliquant une contrainte moyenne non nulle.

Les contraintes moyennes et déviatoires sont interpolées lors de la recharge aux différents seuils de surface spécifique (représentés [figure 4.11](#) et [figure 4.13](#) par les lignes horizontales). Dans le cas d'évolutions non-monotones de la surface spécifique au cours de la recharge (zone ⑥), l'interpolation est effectuée sur la partie croissante de la courbe. Il est en effet considéré qu'un milieu granulaire en capacité de ré-augmenter sa surface spécifique de contact est en mesure de supporter un chargement extérieur au moyen d'un mécanisme d'adaptation de la structure des contacts s'apparentant à de l'écrouissage. Pour cette raison, le seuil le plus tardif est choisi comme indicateur d'endommagement.

4.4.3 Analyse de l'endommagement

Les courbes iso-surface spécifique obtenues sont présentées [figure 4.14](#) dans le plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$ pour une énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ} \cdot \text{mm}^{-2}$. Elles correspondent aux différents seuils de la [figure 4.11](#). Les faisceaux de courbes obtenus ([figure 4.14a](#) et [figure 4.14c](#)) permettent de quantifier la surface de contact spécifique au sein du VEP. Une réduction du seuil de surface spécifique en deçà d'un seuil limite Γ_ℓ (pour cette énergie d'adhésion et ces densités relatives : $\Gamma_\ell = 33,6 \text{ mm}^{-1}$ en isotrope et $\Gamma_\ell = 29,9 \text{ mm}^{-1}$ en matrice) amène à une superposition quasi-parfaite des courbes iso-surface spécifique ([figure 4.14b](#), [figure 4.14d](#)). L'évolution des courbes iso-surface au delà du seuil Γ_ℓ traduisent essentiellement l'augmentation de la surface spécifique dans le domaine élastique. Que ce soit pour la compression en matrice ou isotrope, il est possible de remarquer que les iso-surfaces croisent l'axe hydrostatique de manière quasi-perpendiculaire. Cette observation semble indiquer que le trajet le plus favorable à la reconstitution des surfaces de contact est le

trajet isotrope. Ceci est intuitif dans le cas de compression isotrope, mais l'est moins pour la compression en matrice. Ce constat peut néanmoins s'expliquer par le fait que :

1. La décharge est incomplète : puisque la surface spécifique est influencée par la déformation élastique, elle doit être influencée par les contraintes résiduelles.
2. La décharge est isotrope : il faut donc effectuer une recharge isotrope pour parcourir le chemin inverse.

Il est également possible d'observer que pour des trajets de recharge assez fortement déviatoires (c'est-à-dire pour un ratio $|\tilde{\sigma}_d/\sigma_m| \geq 1$), la surface spécifique stagne ou décroît (la valeur de $|\tilde{\sigma}_d/\sigma_m| \approx 1$ correspond à une tangente des iso-surfaces).

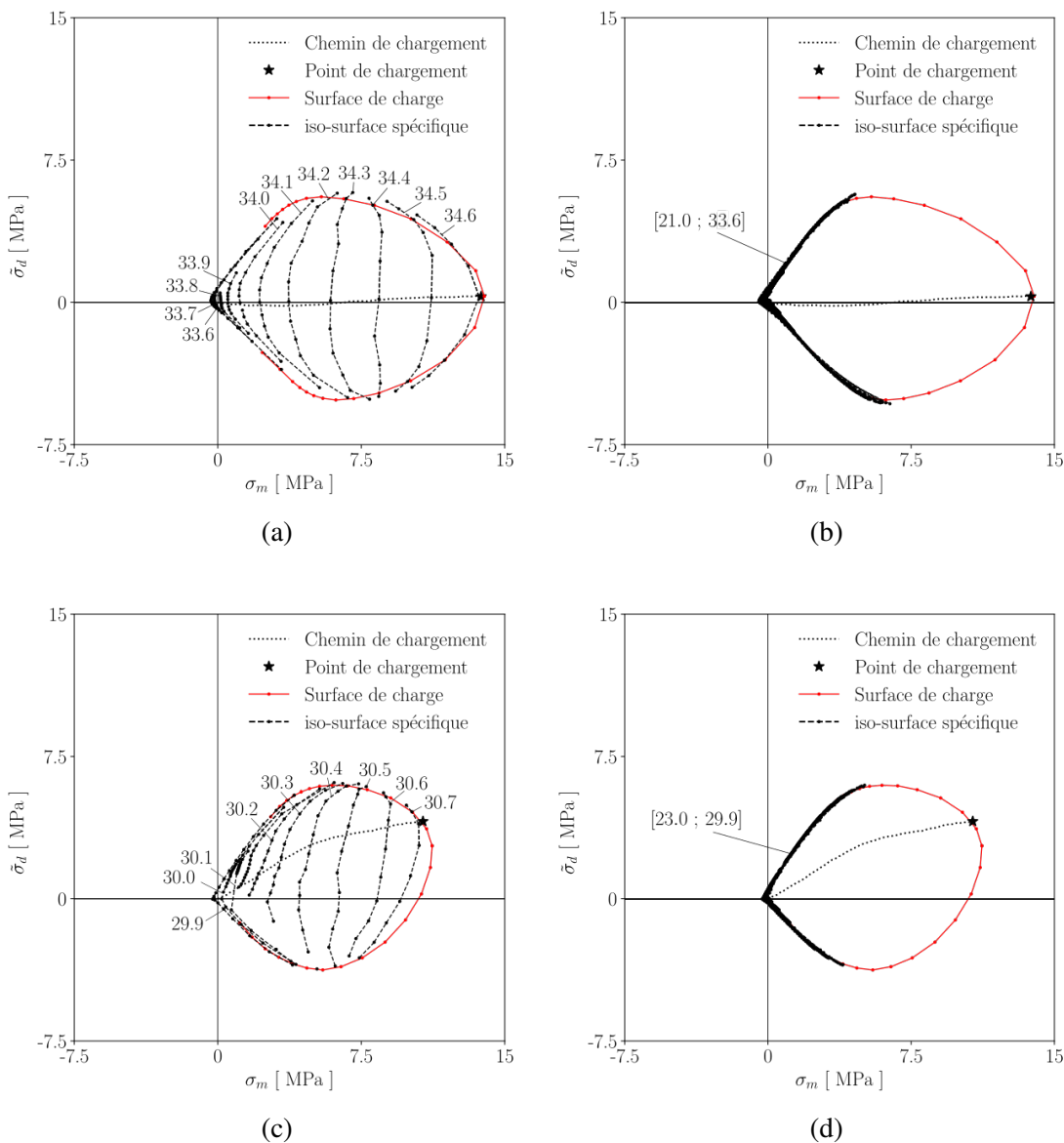


FIGURE 4.14 – Courbes iso-surface spécifique associées à différents seuils exprimés en mm^{-1} pour un chargement (a,b) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (c,d) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, avec une adhésion $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ} \cdot \text{mm}^{-2}$. Les iso-valeurs de surface spécifique sont exprimées en mm^{-1} et correspondent aux seuils présentés figure 4.11.

Pour l'énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ} \cdot \text{mm}^{-2}$ (figure 4.15), les tangentes aux iso-surface spécifique ne correspondent plus à $|\tilde{\sigma}_d/\sigma_m| \approx 1$, mais à des valeurs très nettement supérieures. De

manière naturelle, la surface spécifique augmente pour presque tous les trajets de chargement vérifiant $\sigma_m > 0$ et diminue pour l'ensemble des trajets vérifiant $\sigma_m < 0$. Un chemin correspondant à $\sigma_m = 0$ ou à des valeurs légèrement supérieures (donc un trajet proche du cisaillement pur) correspond à une diminution de la surface spécifique. Une superposition des iso-surfaces pour des seuils compris entre $\Gamma_\ell = 33,4 \text{ mm}^{-1}$ et $\Gamma_\ell = 33,6 \text{ mm}^{-1}$ en isotrope et entre $\Gamma_\ell = 29,4 \text{ mm}^{-1}$ et $\Gamma_\ell = 30,0 \text{ mm}^{-1}$ en matrice est également observée. En deçà de ces seuils, il est observé que les courbes iso-surface spécifique "reculent", c'est-à-dire que la contrainte associée se rapproche de zéro tandis que la surface spécifique continue de diminuer.

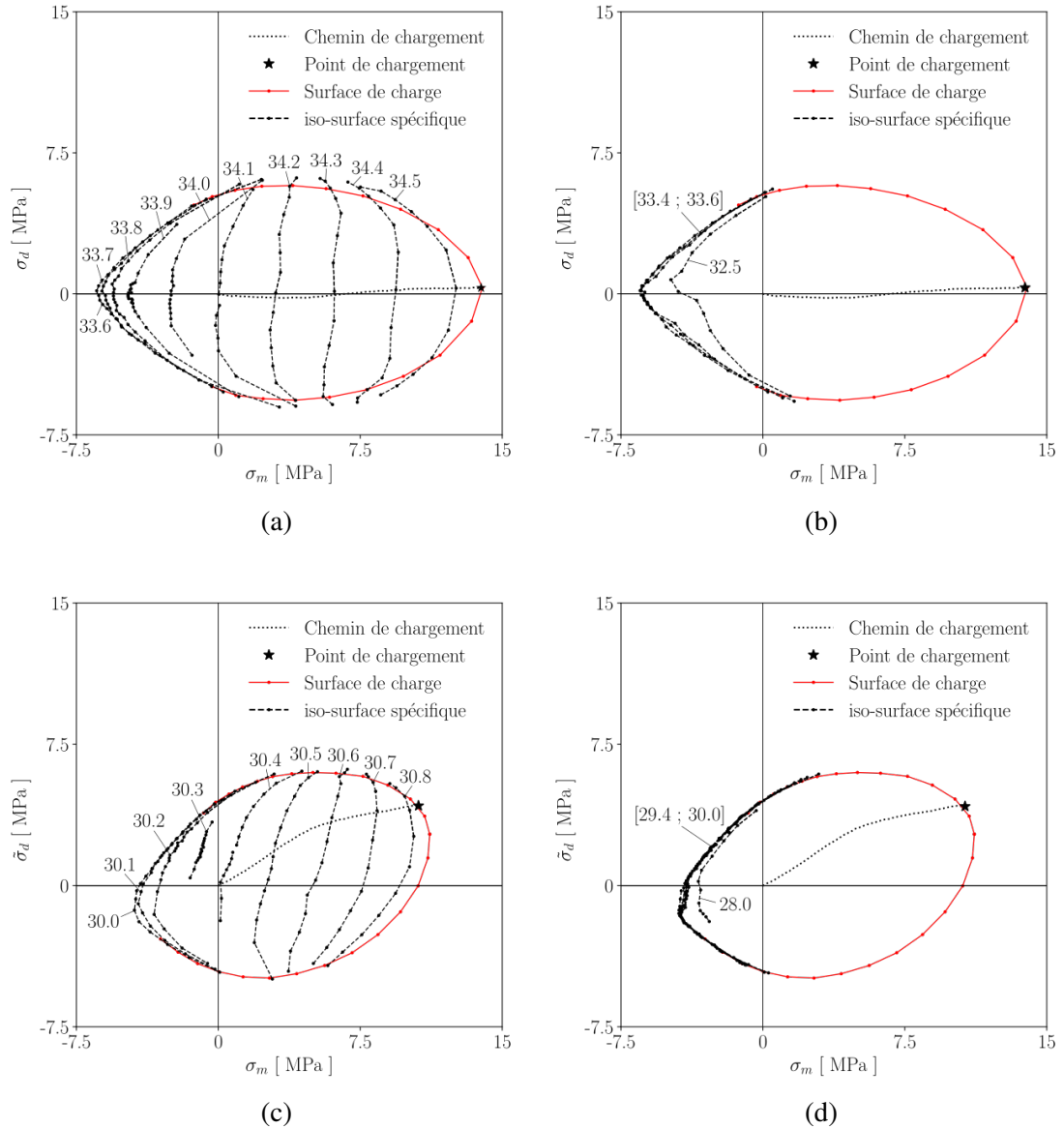


FIGURE 4.15 – Courbes iso-surface spécifique associées à différents seuils exprimés en mm^{-1} pour un chargement (a,b) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (c,d) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, avec une adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ} \cdot \text{mm}^{-2}$. Les iso-valeurs de surface spécifique sont exprimées en mm^{-1} et correspondent aux seuils présentés figure 4.11.

Les courbes représentant la contrainte en fonction de la déformation, associées à quatre chemins de recharge différents, sont représentées figure 4.16 afin d'expliquer plus en détail ce constat : le chemin ① correspondant à une compression d'axe $-h_v$, le chemin ② à un cisaillement d'axe

$+\tilde{h}_d$, le chemin ③ à une traction d'axe $+h_v$ et enfin le chemin ④ à un cisaillement d'axe $-\tilde{h}_d$. Les résultats sont présentés dans le plan (h_v, σ_m) pour les chemins de recharge ① et ③ et dans le plan $(\tilde{h}_d, \tilde{\sigma}_d)$ pour les chemins de recharge ② et ④. Dans le cas du chemin en traction ③, les résultats montrent l'apparition d'une contrainte moyenne minimale. Ainsi, au delà de cet extremum, une augmentation de la déformation n'induit plus d'augmentation de la contrainte (en valeur absolue). Ce constat n'est pas retrouvé pour les chemins ①, ② et ④, pour lesquels la contrainte associée à la direction de chargement dans l'espace des contraintes continue d'augmenter au cours de la transformation.

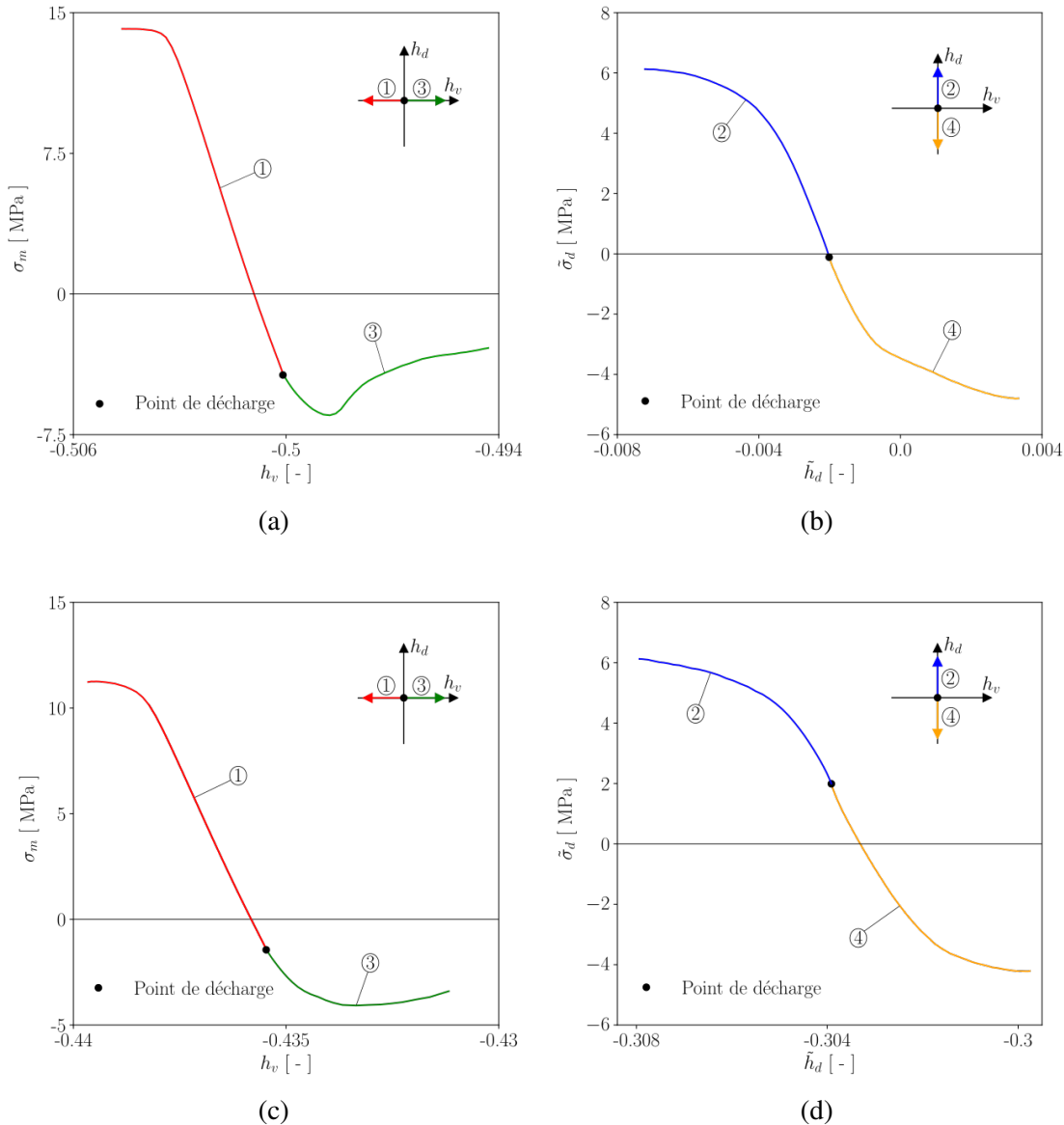


FIGURE 4.16 – Courbes contrainte/déformation associées à différents chemins de recharge (numérotés de ① à ④), pour un chargement initial (a,b) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (c,d) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, avec une adhésion $\gamma = 10^{-2}$ mJ.mm⁻².

Ainsi, les courbes iso-surface spécifique à faible seuil correspondent en fait à des courbes post-pic de contrainte. Elles correspondent donc à un mécanisme dans lequel la déformation augmente tandis que la contrainte diminue (en valeur absolue). Il s'agit donc d'un mécanisme d'adoucissement causé par une forme d'endommagement qu'il est possible d'observer au travers de la perte

des contacts tandis que le chargement continue. Autrement dit, la structure des contacts ne parvient pas à s'adapter au chargement et serait incapable de supporter une contrainte plus élevée que celle correspondant au pic. Sur les trajets ② et ④, un mécanisme similaire se produit, mais sans pic de contrainte. La déformation augmente mais la surface spécifique ainsi que la contrainte stagnent, ce qui s'apparente à ce qui est couramment appelé un "état critique". Comme il sera vu par la suite, la présence de ce pic de contrainte peut également correspondre à un critère de rupture, ce qui peut suggérer l'assimilation des iso-surface spécifiques limites (c'est-à-dire correspondant au seuil Γ_ℓ) aux surfaces de rupture. Ce retour en arrière des courbes iso-surface spécifique n'est pas visible pour l'énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-3} \text{ mJ.mm}^{-2}$, pour la simple raison que les iso-surfaces se superposent avec l'état de contrainte nulle $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d) = (0, 0)$.

La figure 4.17 présente les résultats obtenus en l'absence d'adhésion, aux seuils de surface spécifique présentés figure 4.13. Un comportement sensiblement différent de celui observé en présence d'adhésion (même de très faible valeur) est observé. En effet, les surfaces obtenues ne semblent, dans ce cas, pas tendre vers une surface limite. Ceci provient du fait qu'en l'absence d'adhésion, la perte de contact (et donc de surface spécifique) a pour conséquence de ramener progressivement l'état de contrainte à zéro. La décharge n'étant pas complète (cf. figure 4.13), les chemins de recharge dilatants correspondent simplement à une poursuite de la décharge. Le fait mentionné plus haut que la notion d'endommagement n'est pas appropriée dans le cas non adhésif est retrouvé ici. Ce changement très net de comportement mécanique (y compris à des valeurs d'adhésion très faibles) s'explique par l'apparition d'un mécanisme de rupture au niveau des contacts en présence d'adhésion, ne pouvant pas exister en l'absence d'adhésion. Ce phénomène correspond à la perte de cohésion du milieu granulaire et est directement relié à la perte des contacts adhésifs. Il semble ainsi cohérent d'assimiler les courbes iso-surface spécifique de contact limite aux surfaces de rupture dans le cas de contacts adhésifs.

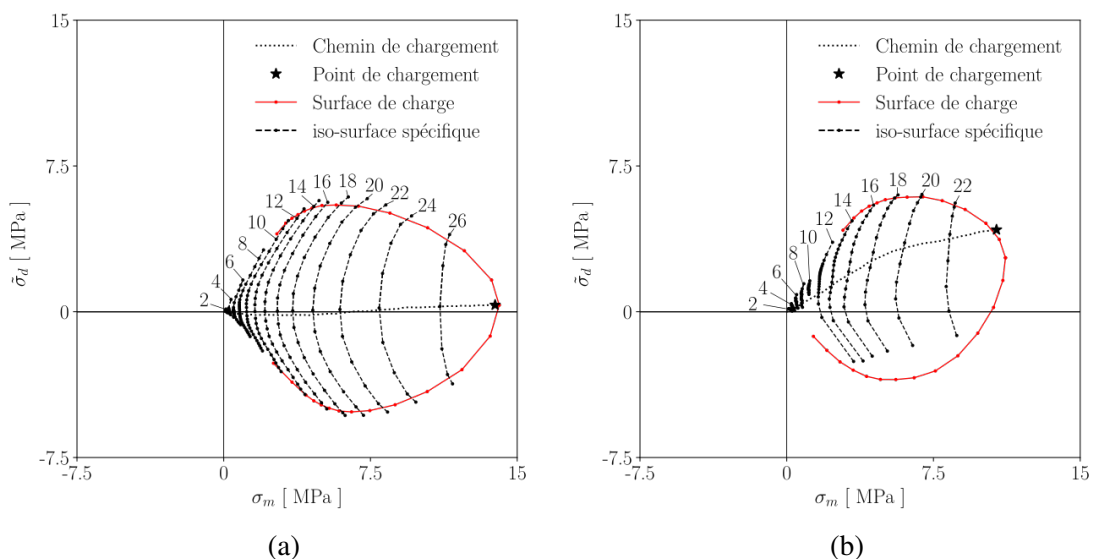


FIGURE 4.17 – Courbes iso-surface spécifique associées à différents seuils exprimés en mm^{-1} pour un chargement (a) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,91$ et (b) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, sans adhésion. Les iso-valeurs de surface spécifique sont exprimées en mm^{-1} et correspondent aux seuils présentés figure 4.13.

4.4.4 Impact de la densité relative

Les surfaces limites, constituées de la juxtaposition des surfaces de charge et de rupture, associées à des chargements isotropes et en matrice, à différentes densités relatives et avec une énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$ sont présentées figure 4.18, en assimilant la surface de rupture à l'iso-surface spécifique de contact limite. Les seuils de surface spécifique limite Γ_ℓ correspondant aux différentes densités étudiées sont synthétisés dans le tableau 4.2.

ρ_f	0,59	0,60	0,67	0,70	0,75	0,79	0,82	0,85	0,87	0,89	0,91	0,95
Isotrope	-	2,07	-	8,75	-	16,95	-	-	27,4	-	33,6	46,8
Matrice	2,09	-	7,96	-	15,58	-	24,9	30,0	-	39,8	-	-

TABLEAU 4.2 – Valeurs des seuils d'iso-surface spécifique de contact limite Γ_ℓ pour les chargements isotropes et en matrice et pour les différentes densités relatives ρ_f étudiées, avec une énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$.

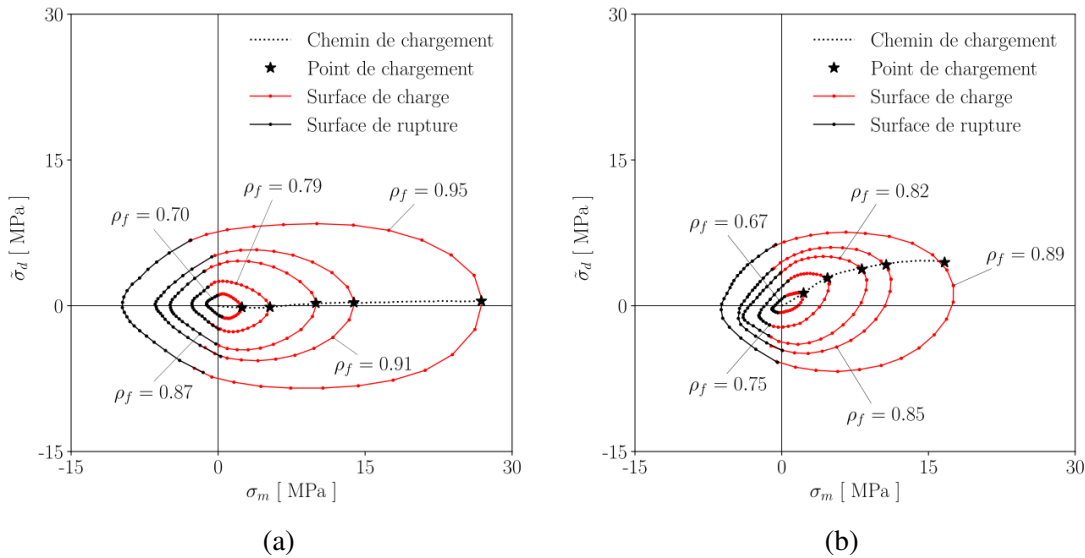


FIGURE 4.18 – Surfaces limites en fonction de la densité relative, pour un chargement (a) isotrope et (b) en matrice, avec une énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$.

Il est possible de remarquer que l'extrémité de la surface limite se positionne dans la direction opposée à l'extrémité de la surface de charge. L'adaptation de la microstructure au chargement initial vient en effet orienter les surfaces de contact entre particules, ce qui a pour conséquence, en présence d'adhésion, d'optimiser la résistance à la traction suivant le chemin de chargement opposé au chemin de chargement initial. Ceci s'explique en considérant que les surfaces de contact développées au cours du chargement initial sont orientées à peu près perpendiculairement aux forces de contact (et donc orientées en fonction du chargement macroscopique) et que la croissance des surfaces de contact augmente à la fois la limite élastique en compression et la limite à la rupture en traction.

La figure 4.19b représente l'évolution de la contrainte limite d'élasticité en compression simple σ_e^{1ax} et de la contrainte limite à la rupture en traction simple σ_r^{1ax} en fonction de la densité relative ρ_f ; pour un chargement isotrope et en matrice, avec une énergie d'adhésion prise égale à $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$. D'après l'équation 4.1 et l'équation 4.2, le chemin de chargement associé à la compression simple et à la traction simple correspond à la droite d'équation $\tilde{\sigma}_d = 3\sigma_m$ dans le

plan $(\sigma_m, \tilde{\sigma}_d)$. Les valeurs de σ_e^{1ax} et de σ_r^{1ax} sont ainsi déterminées grâce à la projection suivant l'axe $\tilde{\sigma}_d$ du point d'intersection entre le chemin de chargement et les surfaces de charge et de rupture⁵, tel que présenté figure 4.19a dans le cas d'un chargement en matrice de densité relative $\rho_f = 0,85$, avec $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$.

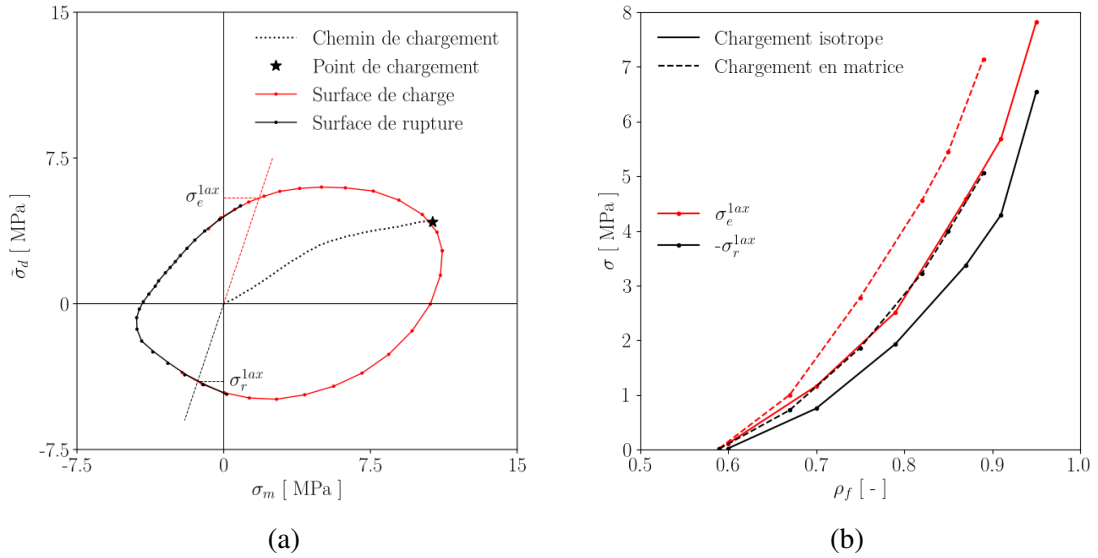


FIGURE 4.19 – (a) Illustration du procédé d'obtention de la contrainte limite d'élasticité en compression simple σ_e^{1ax} et de la contrainte limite à la rupture en traction simple σ_r^{1ax} , dans le cas d'un chargement en matrice de densité $\rho_f = 0,85$ avec $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$. (b) Évolution de la contrainte limite d'élasticité en compression simple σ_e^{1ax} et de la contrainte limite à la rupture en traction simple σ_r^{1ax} en fonction de la densité relative ρ_f ; pour un chargement isotrope et en matrice, avec une énergie d'adhésion $\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$.

La figure 4.19b illustre l'augmentation de la contrainte limite d'élasticité en compression simple et de la contrainte limite à la rupture en traction simple avec la densité relative, mettant en évidence le développement de la cohésion au cours de la densification. La contrainte limite d'élasticité en compression simple et la contrainte limite à la rupture en traction simple observées sont supérieures dans le cas d'un chargement en matrice. Cette observation s'explique par une meilleure adaptation de la microstructure à ce chemin de chargement par la compression en matrice. Par ailleurs, à densité relative fixée, la contrainte limite d'élasticité en compression simple est supérieure à la contrainte limite à la rupture en traction simple.

Les résultats numériques présentés figure 4.19b suivent des variations similaires aux résultats expérimentaux de Dorémus [155, 156]. La figure 4.20a correspond à un essai de traction simple et la figure 4.20b à un essai de compression simple; essais effectués sur un échantillon cylindrique de hauteur H et de diamètre D , obtenu par compression en matrice d'une poudre de fer. La figure 4.20a montre un développement de la contrainte limite à la rupture en traction simple avec la densification suivant des variations similaires et du même ordre de grandeur que les résultats numériques obtenus. Des niveaux de contraintes plus élevés sont obtenus numériquement, mais ceux-ci sont fortement dépendants de la valeur d'énergie de Dupré choisie, qui correspond dans le cas présent à la borne supérieure des données de la littérature ($\gamma = 10^{-2} \text{ mJ.mm}^{-2}$ correspondant à une énergie de Dupré élevée [68]). Les résultats en compression simple (figure 4.20b) sont

5. En effet, dans le cas de la compression et de la traction simple, le tenseur de Cauchy $\underline{\underline{\sigma}}$ se simplifie à une unique composante diagonale notée σ . D'après l'équation 4.2, on a donc $\tilde{\sigma}_d = \sigma$. La détermination de la contrainte limite s'effectue ainsi en l'assimilant à la contrainte déviatoire limite.

également sensiblement similaires aux prédictions numériques. En effet, la limite d'élasticité en compression simple est liée à la limite d'élasticité du matériau en traction simple ($\sigma_y = 5$ MPa pour le matériau élastoplastique modélisé, $\sigma_y \approx 200$ MPa pour la poudre de fer utilisée par Dorémus [156]). En rapportant la contrainte limite d'élasticité en compression simple à la limite d'élasticité du matériau, les résultats expérimentaux et numériques sont du même ordre de grandeur.

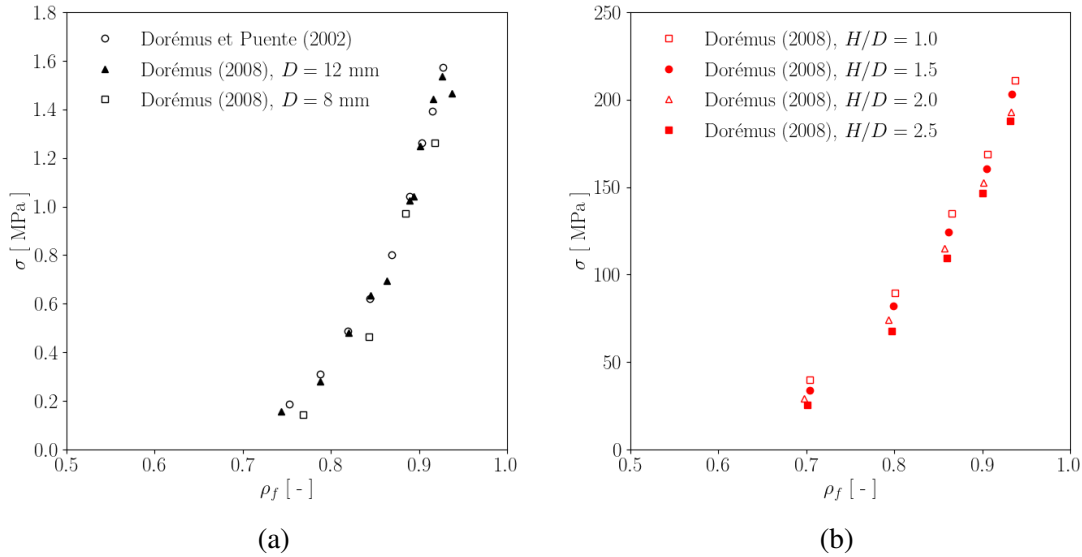


FIGURE 4.20 – (a) Contrainte limite à la rupture en traction simple en fonction de la densité relative et (b) contrainte limite d'élasticité en compression simple en fonction de la densité relative, suite à la compression en matrice d'une poudre de fer [155, 156].

4.5 Vers un critère de rupture

4.5.1 Définition d'un critère de rupture

Une autre manière d'appréhender l'endommagement du milieu granulaire est de l'assimiler à une rupture diffuse de l'échantillon numérique, correspondant à une perte de ses propriétés mécaniques. Une approche analogue à celle utilisée pour la prédiction des surfaces de charge a été développée par Abdelmoula [1] pour la prédiction des surfaces de rupture. Cette approche utilise un critère de rupture basé sur le rapport ϕ de l'énergie cinétique E_c , associée au modèle numérique sur son énergie dissipée E_d (définie équation 4.10) :

$$\phi = \frac{E_c}{E_d} \quad (4.14)$$

Une énergie cinétique non négligeable devant l'énergie dissipée qualifie en effet une perte de stabilité du système modélisé (l'échantillon numérique ne parvient plus à supporter un chargement quasi-statique). Le choix d'un seuil ϕ_c permet alors de définir la rupture, de manière similaire à celle présentée section 4.2 dans le cadre de la plasticité. Ce critère est particulièrement adapté à un pilotage en effort mais ne s'applique pas au cas d'un pilotage en déplacement (pour lequel l'énergie cinétique est directement contrôlée : le maintien de faibles vitesses de déformation limite la valeur de l'énergie cinétique). Dans le cas d'une approche en déplacement, le critère introduit par Hill [157], adapté aux solides élastoplastiques, semble plus approprié. Pour un chargement uniaxial, ce critère de stabilité stipule que la rupture survient lorsque l'incrément de contrainte se met à diminuer pour un incrément de déformation continuant d'augmenter. Hill introduit pour cela la notion de travail du second ordre W_2 , définie par l'équation 4.15, où $\underline{d\sigma}$ correspond à l'incrément de contrainte et \underline{dh} à l'incrément de déformation.

$$W_2 = \underline{d\sigma} : \underline{dh} \quad (4.15)$$

Selon cette définition, la rupture diffuse du milieu considéré, associée à sa perte de stabilité, survient pour $W_2 \leq 0$. Ce critère a été discuté et utilisé par un certain nombre d'auteurs dans le secteur de la mécanique des sols pour la prédiction de la perte de stabilité des milieux granulaires ; parmi eux Bigoni et Hueckel [158, 159], Desoyer et Cormery [160], Darve et al. [161], Buscarnera et di Prisco [162], Nicot et al. [163-165], ou encore Wan et al. [166, 167]. Ces travaux ont permis l'étude de la perte de stabilité de milieux granulaires dans le cadre de modélisations continues et discrètes (DEM).

4.5.2 Résultats préliminaires

Les résultats préliminaires présentés ci-dessous proposent une étude de la rupture à travers le critère de Hill décrit succinctement ci-dessus. La figure 4.21 représente l'évolution du travail du second ordre W_2 au cours des étapes de décharge et de recharge du milieu granulaire associé à un chargement en matrice de densité 0,82. Les quatre chemins présentés (numérotés de ① à ④) correspondent aux chemins introduits à la figure 4.16. Les résultats obtenus montrent que le critère de Hill n'est pas très adapté au cas présent pour deux raisons. Premièrement, le calcul incrémental de W_2 induit de grandes variations rendant difficile la détermination de l'initialisation de la rupture. Deuxièmement, l'utilisation d'une amplitude *Smooth*⁶ pour l'application des CL amène à une valeur nulle de W_2 en fin d'essai (car $\underline{d\sigma}$ et \underline{dh} s'annulent tous les deux), quel que soit le chemin de recharge utilisé. Ces deux problèmes couplés amènent à une prédiction peu précise de la rupture (y compris pour des chargements compressifs).

6. Par ailleurs très utile dans le cadre de la modélisation explicite pour limiter les vibrations aux changements de *Step*.

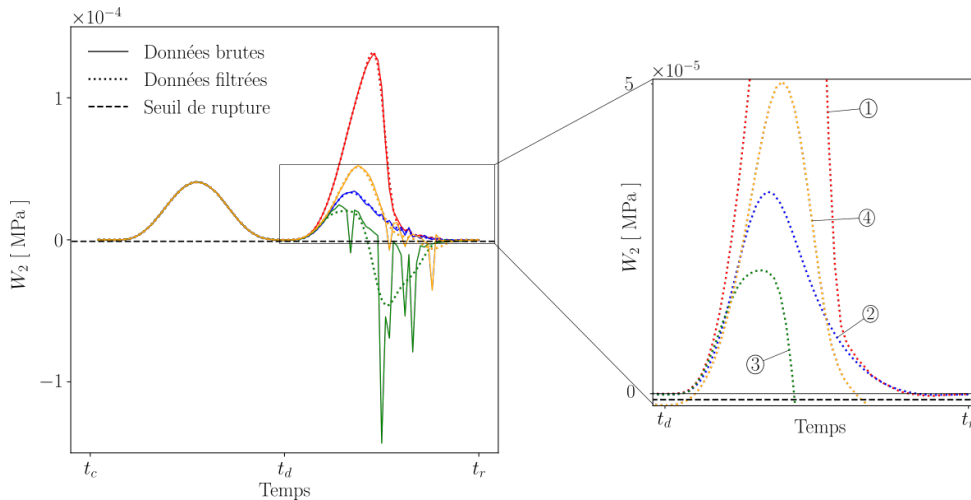


FIGURE 4.21 – Évolutions du travail du second ordre aux cours d’une décharge et des quatre chemins de recharges introduits précédemment. Les signaux bruts et filtrés sont présentés.

Pour ces raisons, le critère de Hill a été appliqué dans le cas présent à des valeurs filtrées de W_2 . Un filtre elliptique passe bas d’ordre 3, basé sur la méthode de Gustaffson [168], a pour cela été utilisé. Les signaux filtrés sont également présentés figure 4.21. Un seuil de rupture légèrement négatif a été utilisé afin de s’affranchir du bruit numérique. Celui-ci a été fixé à $W_2 = -10^{-5}$ MPa dans le cas d’un chargement isotrope et à $W_2 = -10^{-6}$ MPa dans le cas d’un chargement en matrice, dans l’optique de ne pas détecter de rupture causée par la simple oscillation des signaux filtrés. Une méthode d’interpolation similaire à celle présentée section 4.2 est finalement effectuée pour la détermination des iso-surfaces correspondant à $W_2 = 0$. La figure 4.22 montre une prédiction relativement propre de l’iso-surface, en dépit de la qualité médiocre des variations du travail du second ordre utilisé. Cette observation s’explique une fois encore en remarquant que la contrainte reste quasi-constante en fin de recharge, réduisant ainsi la précision requise lors de l’interpolation.

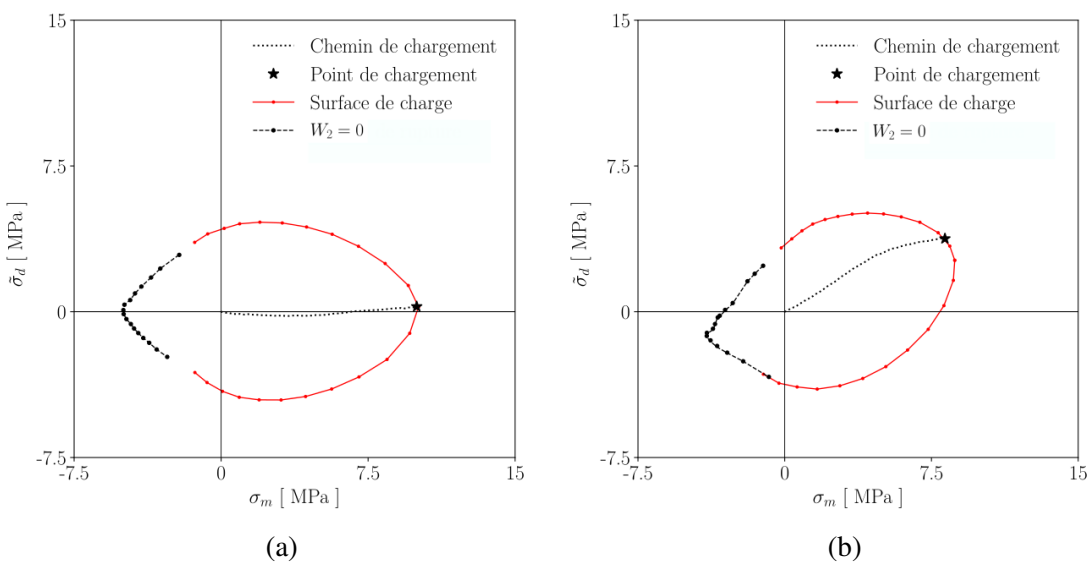


FIGURE 4.22 – Surfaces de rupture associées à un chargement (a) isotrope de densité relative $\rho_f = 0,87$ et (b) en matrice de densité relative $\rho_f = 0,82$, déterminées à l’aide de la méthode de Hill [157].

4.6 Conclusion

Ce chapitre a proposé une étude de la densification d'un milieu granulaire constitué de particules ductiles développant des contacts adhésifs. Une approche micromécanique discrète, basée sur la MPFEM, a pour cela été utilisée afin de décrire les propriétés de plasticité et d'endommagement associées à un volume élémentaire de Cauchy équivalent au système modélisé. Des CL de type GDF ont pour cela été appliquées aux frontières d'un VEP constitué de 50 particules initialement sphériques. L'utilisation de la loi de contact adhésive développée au [chapitre 3](#) a permis l'étude des propriétés du VEP suivant des chargements fortement déviatoires. Le rôle joué par la densité relative ainsi que par l'adhésion inter-particulaire sur les propriétés mésoscopiques du VEP a ainsi pu être étudié.

Les résultats obtenus ont, entre autres, permis de mettre en évidence le lien direct existant entre l'adhésion inter-particulaire et la cohésion du milieu granulaire. Par ailleurs, l'étude de l'endommagement à travers l'évolution de la surface spécifique de contact a révélé qu'il pouvait s'agir d'un indicateur de rupture pertinent quoiqu'indirect dans le cadre des contacts adhésifs. Les difficultés, associées au choix d'un seuil et à la forte dépendance de cette surface spécifique à la déformation élastique des particules, ont finalement conduit à aborder la rupture sous un angle différent. Différentes approches ont ainsi été proposées. La poursuite de ces études permettrait la définition d'un critère de rupture permettant de s'affranchir des limites associées à l'étude de l'endommagement. En particulier, l'étude de la rupture basée sur le critère de Hill permettrait de limiter les difficultés rencontrées à fortes énergies d'adhésion observées [figure 4.15](#). Il serait pour cela intéressant de définir des amplitudes en décharge *semi-Smooth*, permettant une transition de *Step* lissée tout en évitant le retour à zéro du travail du second ordre en fin de décharge, problématique pour l'application de ce critère de rupture.

Une autre perspective serait d'adopter une étude de la rupture basée sur le critère énergétique décrit ci-dessus, en adoptant un pilotage en force des particules lors des phases de décharge et de recharge. Il serait en effet envisageable d'exporter la force associée à chaque point de pilotage en fin de charge, de définir des rampes d'amplitude permettant de ramener cette force proche de zéro et enfin de définir des rampes d'amplitude permettant la recharge dans toutes les directions de l'espace des contraintes. Cette approche a été utilisée par Abdelmoula [1] utilisant des plans rigides pour l'application des CL, mais n'est pas applicable dans le cas présent. En effet, il n'est pas possible de connaître directement l'amplitude des efforts à imposer à chaque point de pilotage, dans le cas de CL de type GDF. Cette méthodologie est toutefois possible en utilisant d'autres types de CL, notamment périodiques (CLP ou CLPs). Il semble également envisageable de coupler les noeuds pilotés à l'aide des CL de type GDF à 3 noeuds auxiliaires qui seraient pilotés en force.

Conclusion générale

Le travail réalisé lors de cette thèse est une contribution à la modélisation micromécanique discrète de la densification de milieux granulaires constitués de particules ductiles développant des contacts adhésifs. La méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM), introduite par Gethin [3] est pour cela utilisée. Cette méthode de modélisation micromécanique se situe à la jonction entre la méthode des éléments finis (FEM) et la méthode des éléments discrets (DEM) : les particules sont maillées de sorte que leurs déformations soient intégralement prises en compte par l'intermédiaire de lois de comportement basées sur le cadre de la MMC et les interactions entre particules sont prises en compte à l'aide de lois de contact formulées en éléments finis. La discrétisation très fine requise par cette méthode la rend particulièrement onéreuse en termes de coût numérique. Cependant, l'utilisation de conditions aux limites (CL) adaptées permettent de déduire les propriétés mésoscopiques associées au continuum de Cauchy équivalent à l'échantillon numérique pour un nombre de particules modélisées relativement restreint. Une étude portant sur l'impact des différents types de CL adaptées à la MPFEM et sur la taille des échantillons numériques a ainsi été proposée au [chapitre 2](#). Des échantillons numériques constitués de particules élastoplastiques à écrouissage isotrope de Mises, initialement sphériques, ont ainsi été modélisés à l'aide du logiciel d'éléments finis commercial *Abaqus*. Une loi de contact simple de type Coulomb a pour cela été utilisée. L'étude réalisée a permis de comparer quatre types de CL périodiques et non-périodiques, en termes de temps de calcul, de prédictions mésoscopiques et d'évolutions microstructurales. La déformation mésoscopique équivalente au volume élémentaire modélisé a pour cela été déterminée à l'aide d'un ajustement en moindres carrés, tandis que la contrainte mésoscopique a été calculée à l'aide de la formule de Love-Weber [108, 109]. Les résultats obtenus ont permis de mettre en évidence la pertinence de l'utilisation de conditions aux limites périodiques (CLP); ce type de CL permet en effet la prise en compte précise de la déformation des particules en bordure d'échantillon ainsi que la stabilisation des résultats mésoscopiques homogénéisés pour un nombre de degrés de liberté associés au modèle numérique significativement inférieur à celui requis par les autres types de CL. Cependant, la gestion non-optimale du grand nombre d'équations de couplage par le logiciel *Abaqus* a conduit à une inflation du coût numérique associé à ce type de CL. Des CL non-périodiques nommées GDF, plus simples à implémenter et par essence moins précises, ont conduit à des résultats homogénéisés stabilisés sensiblement similaires à ceux obtenus dans le cadre des CLP, pour des coûts numériques nettement réduits (avec toutefois l'utilisation de modèles numériques basés sur l'utilisation d'un nombre largement supérieur de degrés de liberté). En accord avec les travaux antérieurs de Loidolt et al. [102] et de Schmidt et al. [107], cette étude a également révélé que la modélisation tridimensionnelle d'un volume élémentaire périodique (VEP) constitué d'environ 50 particules élastoplastiques était suffisante pour atteindre la stabilisation de la contrainte et de la déformation mésoscopiques associées au continuum de Cauchy équivalent. Dans le cadre des CL non-périodiques de type GDF, 296 particules additionnelles périphériques ont été nécessaires pour atteindre cette stabilisation.

Une loi de contact adhésive adaptée à la MPFEM, présentée au [chapitre 3](#), a ensuite été développée et implémentée dans le code d'éléments finis *Abaqus* à l'aide d'une sous-routine utilisateur *VUINTERACTION*, afin de permettre l'étude du développement de la cohésion des milieux granulaires durant leur densification. Une loi de contact locale a pour cela été adaptée de la littérature afin de pouvoir être utilisée dans le cadre de la MPFEM, en permettant de définir des forces de

contact en chaque nœud du maillage éléments finis. Cette loi de contact se base sur une pondération de l'énergie surfacique de Dupré par le modèle de rugosité de Pullen et Williamson [150]. Elle permet la prédiction d'un niveau d'adhésion variable, fonction des niveaux de contrainte normale et de la surface effective de contact (elle-même fonction de l'historique du chargement), ce qui est cohérent avec les observations faites dans le cadre de la compression à froid en matrice. Une fois son implémentation dans le logiciel d'éléments finis validée, la loi de contact a été confrontée aux modèles analytiques de contact adhésif entre sphères élastoplastiques issus de la littérature [124, 128]. Différentes perspectives de validation expérimentale ont ensuite été initiées : (i) une étude micromécanique du contact entre deux particules (annexe D) et (ii) une étude du développement de l'adhésion à l'aide d'un dispositif expérimental présenté section 3.5. Les résultats préliminaires ont validé de manière qualitative le principe de la loi de contact implémentée.

Un modèle numérique a finalement été construit au chapitre 4 pour l'étude de la densification d'un milieu granulaire cohésif constitué de particules ductiles. Un échantillon numérique de 346 particules élastoplastiques à écrouissage de Mises, composé d'un VEP de 50 particules et de 296 particules périphériques, a pour cela été modélisé. Les CL de type GDF implémentées au chapitre 2 ont été utilisées et les propriétés mésoscopiques associées au VEP ont été calculées. La loi de contact adhésive présentée au chapitre 3 a été utilisée pour la gestion en éléments finis des interactions inter-particules, en complément d'une loi de frottement de type Coulomb. Une étude de l'influence de l'énergie de Dupré sur les propriétés de plasticité mésoscopiques associées au VEP a ainsi pu être menée. Par ailleurs, une étude de l'évolution de la surface spécifique de contact, vue comme un indicateur d'endommagement, a été effectuée. Cette étude a permis de caractériser l'évolution des iso-surfaces spécifiques, venant compléter les surfaces de charge associées au milieu granulaire pour des chargements fortement déviatoires ou dilatants. L'étude des surfaces limites⁷ a mis en évidence l'influence de la densité relative, du chemin de chargement, ainsi que de l'adhésion inter-particulaire sur les propriétés mésoscopiques associées au milieu granulaire.

La MPFEM apparaît donc comme un outil puissant d'aide au développement d'un modèle constitutif caractéristique du milieu granulaire. Un tel modèle permettrait une modélisation efficace du processus de compression à froid de poudres largement utilisées dans le secteur industriel. Au vu des résultats obtenus, différentes perspectives directes à ce travail apparaissent comme intéressantes afin d'enrichir le modèle MPFEM et d'améliorer les prédictions numériques lui étant associées :

1. La présente campagne d'expérimentation numérique a été effectuée à l'aide d'un échantillon constitué d'un ensemble de particules au comportement élastoplastique, mais peut facilement être appliquée à d'autres types de matériaux en modifiant la loi constitutive des particules modélisées. En raison de la fréquence élevée des cycles de compression à froid pouvant être rencontrés (notamment dans le secteur pharmaceutique), ou encore afin de prendre en compte l'effet de la température pour la compression à chaud, il serait intéressant d'ajouter au comportement constitutif des particules modélisées des aspects visqueux, afin de modéliser de manière plus réaliste la déformabilité des particules.
2. De la même manière, la loi de contact adhésive implémentée pourrait être enrichie afin de dépendre de la température ou de la nature physico-chimique des différentes interactions pouvant entrer en jeu. Il serait pour cela intéressant d'étudier les mécanismes de développement de l'adhésion à l'échelle particulaire afin d'aboutir à une meilleure compréhension des phénomènes contribuant, au cours de la densification, au développement de la cohésion. Une étude préliminaire à ce sujet a été initiée annexe D. Par ailleurs, la relation entre le développement de l'adhésion et les actions mécaniques extérieures (actuellement prise en compte par l'intermédiaire du modèle de rugosité de Pullen et Williamson [150]) pourrait

7. Constituées des surfaces de charge prolongées par les iso-surfaces spécifiques limites, qui semblent pouvoir être assimilées à des surfaces de rupture.

être étudiée de manière quantitative en couplant une cellule triaxiale au dispositif expérimental présenté [section 3.5](#). De cette manière, la pression hydrostatique permettrait la réalisation d'essais de caractérisation confinés à des niveaux de contraintes normales élevés, tels que fréquemment rencontrés lors du processus de compression à froid, et permettrait ainsi d'atteindre des niveaux plus élevés de surface de contact effective.

3. Une morphologie plus réaliste des particules pourrait également être incorporée au modèle MPFEM. Les travaux de Teil [6] ont permis de modéliser des échantillons numériques dont la microstructure initiale était obtenue à l'aide de microtomographie à rayon X. Cette méthodologie pourrait être utilisée, en complément d'une loi de contact adhésive, pour l'étude de l'impact de la morphologie des particules sur le processus de densification des milieux granulaires cohésifs.
4. Par ailleurs, les difficultés quant à l'étude de la rupture par l'intermédiaire du critère de Hill ont été présentées au [chapitre 4](#). Il serait ainsi judicieux d'étudier la rupture du milieu granulaire par l'intermédiaire d'une méthodologie plus adaptée au cadre de la modélisation MPFEM. Pour cette raison, il serait intéressant d'adopter un pilotage en force et de caractériser la rupture à l'aide du critère basé sur l'augmentation de l'énergie cinétique du système. Cette approche n'est pas appropriée aux CL de type GDF mais semble prometteuse avec l'utilisation des CLPS présentées [chapitre 2](#).
5. Enfin, l'exploration des surfaces de charge et de rupture hors du plan $(\sigma_m, \bar{\sigma}_d)$, notamment dans le plan déviatoire, apparaît également comme une étape obligatoire du développement d'un modèle de comportement continu, afin de permettre la prise en compte de l'impact de l'angle de Lode sur les propriétés de plasticité et de rupture du milieu granulaire. Ce type d'étude nécessite également d'adopter au préalable un pilotage en force, afin de s'assurer que les points de recharge soient bien situés dans le même plan déviatoire (à pression hydrostatique constante).

Références bibliographiques

- [1] N. ABDELMOULA. « Comportement élasto-plastique incrémental des poudres ductiles : Simulation de l'écoulement plastique par la méthode des éléments finis multi-particules ». Thèse de doct. Université Grenoble Alpes, 2016. URL : <https://hal.science/tel-01523452/>.
- [2] P. CUNDALL et O. STRACK. « A discrete numerical model for granular assemblies ». In : *Geotechnique* 29 (1979), p. 47-65. DOI : [10.1680/geot.1979.29.1.47](https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47).
- [3] D. GETHIN et al. « Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material ». In : *Computers and Structures* 79 (2001), p. 1287-1294. DOI : [10.1016/S0045-7949\(01\)00015-3](https://doi.org/10.1016/S0045-7949(01)00015-3).
- [4] D. GETHIN, R. LEWIS et R. RANSING. « A discrete deformable element approach for the compaction of powder systems ». In : *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 11 (2003), p. 101-114. DOI : [10.1088/0965-0393/11/1/308](https://doi.org/10.1088/0965-0393/11/1/308).
- [5] G. MOLLON. *Mécanique des matériaux granulaires*. 2015, p. 1-118.
- [6] M. TEIL. « 3D imaging and numerical simulation for the multi-scale analysis of the compression of a powder made of deformable grains ». Thèse de doct. Univ. Grenoble Alpes, 2019. URL : <https://www.theses.fr/2019GREAI086.pdf>.
- [7] G. THOMAS et O. BONNEFOY. *Poudres et mélanges granulaires - Modélisation, propriété, procédés*. Technosup, Ellipses, 2012. ISBN : 2729874054.
- [8] J. DURAN. *Sable, poudres et grains : introduction à la physique des matériaux granulaires*. Eyrolles, 1999. ISBN : 978-2-212-05831-4.
- [9] *European Powder Metallurgy Association*. <https://www.epma.com/>.
- [10] R. KAWAMOTO et al. « All you need is shape : Predicting shear banding in sand with LS-DEM ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 111 (2018), p. 375-392. DOI : [10.1016/j.jmps.2017.10.003](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.10.003).
- [11] C. WU et al. « Experimental and numerical investigations of powder transfer ». In : *Powder Technology* 138 (2003), p. 216-228. DOI : [10.1016/j.powtec.2003.09.011](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2003.09.011).
- [12] C. WU et A. COCKS. « Flow behaviour of powders during die filling ». In : *Powder Metallurgy* 47 (2004), p. 127-136. DOI : [10.1179/003258904225015617](https://doi.org/10.1179/003258904225015617).
- [13] I. SINKA, L. SCHNEIDER et A. COCKS. « Measurement of the flow properties of powders with special reference to die fill ». In : *International Journal of Pharmaceutics* 280 (2004), p. 27-38. DOI : [10.1016/j.ijpharm.2004.04.021](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2004.04.021).
- [14] P. M. R. GROUP. « Numerical simulation of powder compaction for two multilevel ferrous parts, including powder characterisation and experimental validation ». In : *Powder Metallurgy* 45 (2002), p. 335-344. DOI : [10.1179/003258902225007078](https://doi.org/10.1179/003258902225007078).
- [15] O. COUBE et H. RIEDEL. « Numerical simulation of metal powder die compaction with special consideration of cracking ». In : *Powder Metallurgy* 43 (2000), p. 123-131. DOI : [10.1179/003258900665871](https://doi.org/10.1179/003258900665871).

- [16] C. WU et al. « Modelling the mechanical behaviour of pharmaceutical powders during compaction ». In : *Powder Technology* 152 (2005), 107– 117. DOI : [10.1016/j.powtec.2005.01.010](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.01.010).
- [17] H. DIARRA et al. « FEM simulation of the die compaction of pharmaceutical products : Influence of visco-elastic phenomena and comparison with experiments ». In : *International Journal of Pharmaceutics* 453 (2013), p. 389-394. DOI : [10.1016/j.ijpharm.2013.05.038](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2013.05.038).
- [18] P. JONSÉN, H. HÄGGBLAD et K. SOMMER. « Tensile strength and fracture energy of pressed metal powder by diametral compression test ». In : *Powder Technology* 176 (2007), p. 148-155. DOI : [10.1016/j.powtec.2007.02.030](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2007.02.030).
- [19] K. NARASIMHAN. « Sintering of powder mixtures and the growth of ferrous powder metallurgy ». In : *Materials Chemistry and Physics* 67 (2001), p. 56-65. DOI : [10.1016/S0254-0584\(00\)00420-X](https://doi.org/10.1016/S0254-0584(00)00420-X).
- [20] J. de MELLO et al. « Effect of compaction pressure and powder grade on microstructure and hardness of steam oxidised sintered iron ». In : *Powder Metallurgy* 44 (2001), p. 53-61. DOI : [10.1179/003258901666176](https://doi.org/10.1179/003258901666176).
- [21] A. SIMCHI. « Effects of lubrication procedure on the consolidation, sintering and microstructural features of powder compacts ». In : *Materials and Design* 24 (2003), p. 585-594. DOI : [10.1016/S0261-3069\(03\)00155-9](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(03)00155-9).
- [22] N. SOLIMANJAD et R. LARSSON. « Die wall friction and influence of some process parameters on friction in iron powder compaction ». In : *Materials Science and Technology* 19 (2003), p. 1777-1782. DOI : [10.1179/026708303225009517](https://doi.org/10.1179/026708303225009517).
- [23] T. VIÉ et al. « On the lubricating efficiency of high-performance powder metallurgy lubricants ». In : *Powder technology* 413 (2023), p. 118019. DOI : [10.1016/j.powtec.2022.118019](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.118019).
- [24] A. TELLIER et al. « Characterization of the Interfacial Zone Between a HIPed Fe-Based Alloy and a Stainless Steel Container ». In : *Journal of Materials Engineering and Performance* 29 (2020), p. 3800-3811. DOI : [10.1007/s11665-020-04897-5](https://doi.org/10.1007/s11665-020-04897-5).
- [25] D. KORACHKIN et al. « Measurement of Young’s modulus and tensile failure properties of green powder compacts ». In : *Powder Metallurgy* 51 (2008), p. 150-159. DOI : [10.1179/174329008X284994](https://doi.org/10.1179/174329008X284994).
- [26] P. JONSÉN et H. HÄGGBLAD. « Modelling and numerical investigation of the residual stress state in a green metal powder body ». In : *Powder Technology* 155 (2005), p. 196-208. DOI : [10.1016/j.powtec.2005.05.056](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.05.056).
- [27] N. SOLIMANJAD. « New method for measuring and characterisation of friction coefficient at wide range of densities in metal powder compaction ». In : *Powder Metallurgy* 46 (2003), p. 49-54. DOI : [10.1179/003258903225010488](https://doi.org/10.1179/003258903225010488).
- [28] C. ZHAO et al. « An integrated study of die powder fill, transfer and compaction process using digital image correlation method ». In : *Powder Technology* 208 (2011), p. 225-230. DOI : [10.1016/j.powtec.2010.12.024](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.12.024).
- [29] S. TAHIR et A. ARIFFIN. « Fracture in metal powder compaction ». In : *International Journal of Solids and Structures* 43 (2006), 1528–1542. DOI : [10.1016/j.ijsolstr.2005.10.010](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2005.10.010).
- [30] C. WU et al. « Numerical and experimental investigation of capping mechanisms during pharmaceutical tablet compaction ». In : *Powder Technology* 181 (2008), p. 121-129. DOI : [10.1016/j.powtec.2006.12.017](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2006.12.017).

-
- [31] R. HILL. *The mathematical theory of plasticity*. Clarendon Press, Oxford, 1950. ISBN : 0198503679.
- [32] R. V. MISES. « Mechanik der plastischen Formänderung von Kristallen ». In : *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 3 (1928), p. 161-185. DOI : [10.1002/zamm.19280080302](https://doi.org/10.1002/zamm.19280080302).
- [33] G. TAYLOR. « A connexion between the criterion of yield and the strain ratio relationship in plastic solids ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 191 (1947), p. 323-362. DOI : [10.1098/rspa.1947.0126](https://doi.org/10.1098/rspa.1947.0126).
- [34] M. RAPPAZ, M. BELLET et M. DEVILLE. *Modélisation numérique en science et génie des matériaux*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1998. ISBN : 2-88074-365-6.
- [35] B. HARTHONG. « Modélisation du comportement des poudres métalliques à l'échelle du grain ». Thèse de doct. Institut Polytechnique de Grenoble, 2010. URL : <https://theses.hal.science/tel-00545807/document>.
- [36] N. ABDELMOULA et al. « A study on the uniqueness of the plastic flow direction for granular assemblies of ductile particles using discrete finite-element simulations ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 109 (2017), p. 142-159. DOI : [10.1016/j.jmps.2017.07.021](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.07.021).
- [37] A. AKISANYA, A. COCKS et N. FLECK. « The yield behaviour of metal powders ». In : *International Journal of Mechanical Sciences* 39 (1997), p. 1315-1324. DOI : [10.1016/S0020-7403\(97\)00018-0](https://doi.org/10.1016/S0020-7403(97)00018-0).
- [38] I. SRIDHAR et N. A. FLECK. « The yield behaviour of cold compacted composite powders ». In : *Acta Materialia* 48 (2000), p. 3341-3352. DOI : [10.1016/S1359-6454\(00\)00151-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00151-8).
- [39] L. C. R. SCHNEIDER et A. C. F. COCKS. « Experimental investigation of yield behaviour of metal powder compacts ». In : *Powder Metallurgy* 345 (2002), p. 237-245. DOI : [10.1179/003258902225006998](https://doi.org/10.1179/003258902225006998).
- [40] S. SHIMA et al. « A study of iron powders by three-dimensional compaction ». In : *Powder Metallurgy and Particulate Materials* 7 (1996), p. 193-206.
- [41] E. PAVIER. « Caractérisation du comportement d'une poudre de fer pour le procédé de compression en matrice ». Thèse de doct. Institut National Polytechnique de Grenoble, 1998.
- [42] H. JIANG et Y. XIE. « A Note on the Mohr-Coulomb and Drucker-Prager strength criteria ». In : *Mechanics Research Communications* 38 (2011), p. 309-314. DOI : [10.1016/j.mechrescom.2011.04.001](https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2011.04.001).
- [43] T. ABDERRAHMANE. « Chapitre 3 : Les lois de comportement ». In : 2020, p. 41-73.
- [44] L. RESENDE et J. B. MARTIN. « Formulation of Drucker-Prager Cap Model ». In : *Journal of Engineering Mechanics* 111 (1985), p. 855-881. DOI : [10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(1985\)111:7\(855\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1985)111:7(855)).
- [45] *Abaqus 6.14 Documentation*. Dassault systèmes Simulia. 2016. URL : <http://130.149.89.49:2080/v6.14/>.
- [46] J. BRANDT et L. NILSSON. « A constitutive model for compaction of granular media, with account for deformation induced anisotropy ». In : *Mechanics of Cohesive-frictional Materials* 4 (1999), p. 391-418.
-

- [47] A. HRENNIKOFF. « Solution of problems of elasticity by the framework method ». In : *J. Appl. Mech.* 8.4 (1941), p. 169-175. DOI : [10.1115/1.4009129](https://doi.org/10.1115/1.4009129).
- [48] R. COURANT. « Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations ». In : *American Mathematical Society* 49 (1943), p. 1-23. DOI : [10.1090/s0002-9904-1943-07818-4](https://doi.org/10.1090/s0002-9904-1943-07818-4).
- [49] M. TURNER et al. « Stiffness and deflection analysis of complex structures ». In : *Journal of the aeronautical sciences* 23.9 (1956), p. 805-824. DOI : [10.2514/8.36646](https://doi.org/10.2514/8.36646).
- [50] J. ARGYRIS et S. KELSEY. *Energy Theorems and Structural Analysis*. Springer New York, NY, 1960. ISBN : 978-1-4899-5850-1. DOI : [10.1007/978-1-4899-5850-1](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-5850-1).
- [51] O. ZIENKIEWICZ et Y. CHEUNG. *The finite element method in structural and continuum mechanics*. McGraw-Hill, 1967. URL : [https://Books.google.fr/Books?id=YJwoAQAAMAJ](https://books.google.fr/books?id=YJwoAQAAMAJ).
- [52] G. STRANG et G. FIX. *An analysis of the finite element method*. Wellesley-Cambridge press, 1973. ISBN : 096140888X.
- [53] H. FISCHMEISTER et E. ARZT. « Densification of Powders by Particle Deformation ». In : *Powder Technology* 26 (1983), p. 82-90. DOI : [10.1179/pom.1983.26.2.82](https://doi.org/10.1179/pom.1983.26.2.82).
- [54] N. FLECK, L. KUHN et R. MCMEEKING. « Yielding of Metal Powder Bonded by Isolated Contacts ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 40 (1992), p. 1139-1162. DOI : [10.1016/0022-5096\(92\)90064-9](https://doi.org/10.1016/0022-5096(92)90064-9).
- [55] N. FLECK. « A crystal plasticity view of powder compaction ». In : *Acta Metallurgica et Materialia* 43.8 (1995), p. 3177-3184. DOI : [10.1016/0956-7151\(94\)00484-Y](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)00484-Y).
- [56] N. FLECK. « On the Cold Compaction of Powders ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 43 (1995), p. 1409-1431. DOI : [10.1016/0022-5096\(95\)00039-L](https://doi.org/10.1016/0022-5096(95)00039-L).
- [57] B. STORÅKERS, S. BIWA et P.-L. LARSSON. « Similarity analysis of inelastic contact ». In : *International Journal of Solids and Structures* 34.24 (1997), p. 3061-3083. DOI : [10.1016/S0020-7683\(96\)00176-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(96)00176-X).
- [58] B. STORÅKERS, N. FLECK et R. MCMEEKING. « The viscoplastic compaction of composite powders ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47 (1999), p. 785-815. DOI : [10.1016/S0022-5096\(98\)00076-3](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(98)00076-3).
- [59] D. WOLF. « Modelling and Computer Simulation of Granular Media ». In : *Computational Physics* (1996), p. 64-95. DOI : [10.1007/978-3-642-85238-1_5](https://doi.org/10.1007/978-3-642-85238-1_5).
- [60] J. MOREAU. « Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics ». In : *Nonsmooth Mechanics and Applications* (1988), p. 1-82. DOI : [10.1007/978-3-7091-2624-0_1](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-2624-0_1).
- [61] L. VU-QUOC et X. ZHANG. « An accurate and efficient tangential force–displacement model for elastic frictional contact in particle-flow simulations ». In : *Mechanics of Materials* 13 (1999), p. 235-269. DOI : [10.1016/S0167-6636\(98\)00064-7](https://doi.org/10.1016/S0167-6636(98)00064-7).
- [62] L. VU-QUOC, X. ZHANG et L. LESBURG. « Normal and tangential force–displacement relations for frictional elasto-plastic contact of spheres ». In : *International Journal of Solids and Structures* 38 (2001), p. 6455-6489. DOI : [10.1016/S0020-7683\(01\)00065-8](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(01)00065-8).
- [63] P. REDANZ et N. FLECK. « The compaction of a random distribution of metal cylinders by the discrete element method ». In : *Acta Materialia* 49 (2001), p. 4325-4335. DOI : [10.1016/S1359-6454\(01\)00298-1](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00298-1).

- [64] P. HEYLIGER et R. MCMEEKING. « Cold plastic compaction of powders by a network model ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49 (2001), p. 2031-2054. DOI : [10.1016/S0022-5096\(01\)00038-2](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00038-2).
- [65] C. MARTIN et D. BOUVARD. « Study of the cold compaction of composite powders by the discrete element method ». In : *Acta Materialia* 51 (2003), p. 373-386. DOI : [10.1016/S1359-6454\(02\)00402-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(02)00402-0).
- [66] C. MARTIN, D. BOUVARD et S. SHIMA. « Study of particle rearrangement during powder compaction by the Discrete Element method ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 51 (2003), p. 667-693. DOI : [10.1016/S0022-5096\(02\)00101-1](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00101-1).
- [67] C. MARTIN. « Unloading of powder compacts and their resulting tensile strength ». In : *Acta Materialia* 51.15 (2003), p. 4589-4602. DOI : [10.1016/S1359-6454\(03\)00296-9](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00296-9).
- [68] C. MARTIN. « Elasticity, fracture and yielding of cold compacted metal powders ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004), p. 1691-1717. DOI : [10.1016/j.jmps.2004.03.004](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2004.03.004).
- [69] C. MARTIN et D. BOUVARD. « Isostatic compaction of bimodal powder mixtures and composites ». In : *International Journal of Mechanical Sciences* 46.6 (2004), p. 907-927. DOI : [10.1016/j.ijmecsci.2004.05.012](https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2004.05.012).
- [70] Y. SHENG et al. « Numerical studies of uniaxial powder compaction process by 3D DEM ». In : *Engineering Computations* 21 (2004), p. 304-317. DOI : [10.1108/02644400410519802](https://doi.org/10.1108/02644400410519802).
- [71] O. SKRINJAR et P. LARSSON. « On discrete element modelling of compaction of powders with size ratio ». In : *Computational Materials Science* 31 (2004), p. 131-146. DOI : [10.1016/j.commatsci.2004.02.005](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.02.005).
- [72] P. JAMES. « Particle deformation during cold isostatic pressing of metal powders ». In : *Powder Metallurgy* 20 (1977), p. 199-204. DOI : [10.1179/pom.1977.20.4.199](https://doi.org/10.1179/pom.1977.20.4.199).
- [73] J. JÉRIER et al. « Numerical simulations for isostatic and die compaction of powder by the discrete element method ». In : *AIP Conference Proceedings* 1145 (2010), p. 457-460. DOI : [10.1063/1.3179961](https://doi.org/10.1063/1.3179961).
- [74] B. HARTHONG et al. « Modeling of high-density compaction of granular materials by the Discrete Element Method ». In : *International Journal of Solids and Structures* 46 (2009), p. 3357-3364. DOI : [10.1016/j.ijsolstr.2009.05.008](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.05.008).
- [75] A. PERSSON et G. FRENNING. « An experimental evaluation of discrete element simulations of confined powder compression using an extended truncated-sphere model ». In : *Powder Technology* 284 (2015), p. 257-264. DOI : [10.1016/j.powtec.2015.06.053](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.06.053).
- [76] M. GONZALEZ et A. CUITIÑO. « A nonlocal contact formulation for confined granular systems ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (2012), p. 333-350. DOI : [10.1016/j.jmps.2011.10.004](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2011.10.004).
- [77] R. RANSING et al. « Powder compaction modelling via the discrete and finite element method ». In : *Materials and Design* 21 (2000), p. 263-269. DOI : [10.1016/S0261-3069\(99\)00081-3](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(99)00081-3).
- [78] D. CANTOR et al. « Compaction Model for Highly Deformable Particle Assemblies ». In : *Physical Review Letters* 124 (2020), p. 208003. DOI : [10.1103/PhysRevLett.124.208003](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.208003).
- [79] M. CÁRDENAS-BARRANTES et al. « Micromechanical description of the compaction of soft pentagon assemblies ». In : *Physical review E* 103 (2021), p. 062902. DOI : [10.1103/PhysRevE.103.062902](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.062902).

- [80] M. CÁRDENAS-BARRANTES et al. « Three-dimensional compaction of soft granular packings ». In : *Soft Matter* 18 (2022), p. 312. DOI : [10.1039/D1SM01241J](https://doi.org/10.1039/D1SM01241J).
- [81] J. BARÉS et al. « Softer than soft : diving into squishy granular matter ». In : *Papers in Physics* 14 (2022), p. 140009. DOI : [10.1103/10.4279/PIP.140009](https://doi.org/10.1103/10.4279/PIP.140009).
- [82] S. NEZAMABADI et al. « Implicit frictional-contact model for soft particle systems ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 83 (2015), p. 72-87. DOI : [10.1016/j.jmps.2015.06.007](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.06.007).
- [83] S. NEZAMABADI et al. « MPM with frictional contact for application to soft particulate materials ». In : *Procedia Engineering* 175 (2017), p. 141-147. DOI : [10.1016/j.proeng.2017.01.044](https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.01.044).
- [84] S. NEZAMABADI et al. « Modeling soft granular materials ». In : *Granular Matter* 19 (2017), p. 8. DOI : [10.1007/s10035-016-0689-y](https://doi.org/10.1007/s10035-016-0689-y).
- [85] S. NEZAMABADI et al. « Modelling the compaction of plastic particle packings ». In : *Computational Particle Mechanics* 9 (2021), p. 45-52. DOI : [10.1007/s40571-021-00391-4](https://doi.org/10.1007/s40571-021-00391-4).
- [86] T.-L. VU, S. NEZAMABADI et S. MORA. « Effects of particle compressibility on structural and mechanical properties of compressed soft granular materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 146 (2021), p. 104201. DOI : [10.1016/j.jmps.2020.104201](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104201).
- [87] A. GURSON. « Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth : Part 1—Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media ». In : *Journal of Engineering Materials and Technology* 99 (1977), p. 2-15. DOI : [10.1115/1.3443401](https://doi.org/10.1115/1.3443401).
- [88] D. GETHIN, X. YANG et R. LEWIS. « A two dimensional combined discrete and finite element scheme for simulating the flow and compaction of systems comprising irregular particulates ». In : *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 11 (2003), p. 101-114. DOI : [10.1016/j.cma.2005.10.025](https://doi.org/10.1016/j.cma.2005.10.025).
- [89] A. PROCOPIO et A. ZAVALIANGOS. « Simulation of multi-axial compaction of granular media from loose to high relative densities ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 53 (2005), p. 1523-1551. DOI : [10.1016/j.jmps.2005.02.007](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2005.02.007).
- [90] Y. CHEN, D. IMBAULT et P. DORÉMUS. « Numerical Simulation of Cold Compaction of 3D Granular Packings ». In : *Materials Science Forum* 534-536 (2007), p. 301-304. DOI : [10.4028/www.scientific.net/MSF.534-536.301](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.534-536.301).
- [91] Y. CHEN. « Contribution à la modélisation de la compression des poudres par une méthode d'éléments discrets maillés ». Thèse de doct. Institut polytechnique de Grenoble, 2008.
- [92] G. FRENNING. « An efficient finite/discrete element procedure for simulating compression of 3D particle assemblies ». In : *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 197 (2008), p. 4266-4272. DOI : [10.1016/j.cma.2008.05.002](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.05.002).
- [93] G. FRENNING. « Compression mechanics of granule beds : A combined finite/discrete element study ». In : *Chemical Engineering Science* 65 (2010), p. 2464-2471. DOI : [10.1016/j.ces.2009.12.029](https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.12.029).
- [94] K. LEE, J. LEE et B. KIM. « Densification simulation of compacted Al powders using multi-particle finite element method ». In : *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* 19 (2009), s68-s75. DOI : [10.1016/S1003-6326\(10\)60247-6](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(10)60247-6).
- [95] J. ZHANG. « A study of compaction of composite particles by multi-particle finite element method ». In : *Composites Science and Technology* 69.13 (2009), p. 2048-2053. DOI : [10.1016/j.compscitech.2008.11.020](https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2008.11.020).

- [96] B. HARTHONG, D. IMBAULT et P. DORÉMUS. « The study of relations between loading history and yield surfaces in powder materials using discrete finite element simulations ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (2012), p. 784-801. DOI : [10.1016/j.jmps.2011.11.009](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2011.11.009).
- [97] I. SCHMIDT, T. KRAFT et H. RIEDEL. « Numerical homogenisation of elasto-plastic granule assemblies using discretised Particles ». In : *Proceedings of the Euro PM2008*. European Powder Metallurgy Association. 2008, p. 169-173. URL : <https://publica.fraunhofer.de/handle/publica/360338>.
- [98] I. SCHMIDT et al. « Simulation of the material behaviour of metal powder during compaction ». In : *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E : Journal of Process Mechanical Engineering* 224 (2010), p. 187-194. DOI : [10.1243/09544089JPME325](https://doi.org/10.1243/09544089JPME325).
- [99] I. SCHMIDT. « Numerical homogenisation of an elasto-plastic model-material with large elastic strains : macroscopic yield surfaces and the Eulerian normality rule ». In : *Computational mechanics* 48 (2011), 579–590. DOI : [10.1007/s00466-011-0601-x](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0601-x).
- [100] R. HILL. « On Constitutive Macro-Variables for Heterogeneous Solids at Finite Strain ». In : *Proc. R. Soc. Lond. A* 326 (1972), p. 131-147. DOI : [10.1098/rspa.1972.0001](https://doi.org/10.1098/rspa.1972.0001).
- [101] R. HILL. « On macroscopic effects of heterogeneity in elasto-plastic media at finite strain ». In : *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 95 (1984), p. 481-494. DOI : [10.1017/S0305004100061818](https://doi.org/10.1017/S0305004100061818).
- [102] P. LOIDOLT, M. ULZ et J. KHINAST. « Modeling yield properties of compacted powder using a multi-pArticle finite element model with cohesive contacts ». In : *Powder Technology* 336 (2018), p. 426-440. DOI : [10.1016/j.powtec.2018.06.018](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.06.018).
- [103] P. LOIDOLT, M. ULZ et J. KHINAST. « Prediction of the anisotropic mechanical properties of compacted powders ». In : *Powder Technology* 345 (2019), p. 589-600. DOI : [10.1016/j.powtec.2019.01.048](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.01.048).
- [104] G. GUSTAFSSON, H. HÄGGBLAD et P. JONSÉN. « Multi-pArticle finite element modelling of the compression of iron ore pellets with statistically distributed geometric and material data ». In : *Powder Technology* 239 (2013), p. 231-238. DOI : [10.1016/j.powtec.2013.02.005](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.02.005).
- [105] F. GÜNER, O. CORA et H. SOFUOĞLU. « Numerical modeling of cold powder compaction using multi pArticle and continuum media approaches ». In : *Powder Technology* 271 (2015), p. 238-247. DOI : [10.1016/j.powtec.2014.11.008](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.11.008).
- [106] F. GÜNER et H. SOFUOĞLU. « Effects of Process Parameters on Copper Powder Compaction Process Using Multi-PARTICLE Finite Element Method ». In : *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering* 295 (2018). DOI : [10.1088/1757-899X/295/1/012027](https://doi.org/10.1088/1757-899X/295/1/012027).
- [107] I. SCHMIDT, A. TRONDL et T. KRAFT. « Yielding and failure of an assembly of frictional elasto-plastic pArticles : A computational RVE study ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 154 (2021), p. 104496. DOI : [10.1016/j.jmps.2021.104496](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104496).
- [108] A. LOVE. *A Treatise of Mathematical Theory of Elasticity*. Cambridge University Press, 1927. ISBN : 1107618096.
- [109] J. WEBER. « Recherches concernant les contraintes intergranulaires dans les milieux pulvérulents ». In : *Bulletin de Liaison des Ponts et Chaussées* 20 (1966), p. 3-20.
- [110] F. HUANG et al. « Multi-particle FEM simulation of 2D compaction on binary Al/SiC composite powders ». In : *Powder Technology* 314 (2017), p. 39-48. DOI : [10.1016/j.powtec.2017.03.017](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.03.017).

- [111] Y. ZOU, X. AN et R. ZOU. « Investigation of densification behavior of tungsten powders during hot isostatic pressing with a 3D multi-pArticle FEM approach ». In : *Powder Technology* 361 (2020), p. 297-305. DOI : [10.1016/j.powtec.2019.08.014](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.08.014).
- [112] D. WANG et al. « Multi-pArticle FEM modelling on hot pressing of TiC-316L composite powders ». In : *Powder Technology* 361 (2020), p. 389-399. DOI : [10.1016/j.powtec.2019.07.064](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.07.064).
- [113] M. LI et al. « Multi-pArticle FEM modeling on hot isostatic pressing of Ti6Al4V powders ». In : *International Journal of Mechanical Sciences* 196 (2021), p. 106288. DOI : [10.1016/j.ijmecsci.2021.106288](https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2021.106288).
- [114] A. DEMIRTAS et G. KLINZING. « Understanding die compaction of hollow spheres using the multi-pArticle finite element method (MPFEM) ». In : *Powder Technology* 391 (2021), p. 34-45. DOI : [10.1016/j.powtec.2021.06.004](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2021.06.004).
- [115] S. GATOULLAT et al. « Meso modelling for composite preform shaping – Simulation of the loss of cohesion of the woven fibre network ». In : *Composites : Part A* 54 (2013), p. 135-144. DOI : [10.1016/j.compositesa.2013.07.010](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.07.010).
- [116] Q. NGUYEN et al. « Mesoscopic scale analyses of textile composite reinforcement compaction ». In : *Composites : Part B* 44 (2013), p. 231-241. DOI : [10.1016/j.compositesb.2012.05.028](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.05.028).
- [117] A. CHARMETANT, E. VIDAL-SALLÉ et P. BOISSE. « Hyperelastic modelling for mesoscopic analyses of composite reinforcements ». In : *Composites Science and Technology* 71 (2011), p. 1623-1631. DOI : [10.1016/j.compscitech.2011.07.004](https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2011.07.004).
- [118] K. JOHNSON, K. KENDALL et A. ROBERTS. « Surface Energy and the Contact of Elastic Solids ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A* 324 (1971), p. 301-313. DOI : [10.1098/rspa.1971.0141](https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141).
- [119] B. DERJAGUIN, V. MULLER et Y. TOPOROV. « Effect of Contact Deformations on the Adhesion of PArticles ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 53.2 (1975), p. 314-326. DOI : [10.1016/0021-9797\(75\)90018-1](https://doi.org/10.1016/0021-9797(75)90018-1).
- [120] V. MULLER, B. DERJAGUIN et Y. TOPOROV. « On two methods of calculation of the force of sticking of an elastic sphere to a rigid plane ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 7 (1983), p. 251-259. DOI : [10.1016/0166-6622\(83\)80051-1](https://doi.org/10.1016/0166-6622(83)80051-1).
- [121] V. MULLER, V. YUSHCHENKO et B. DERJAGUIN. « On the Influence of Molecular Forces on the Deformation of an Elastic Sphere and Its Sticking to a Rigid Plane ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 77.1 (1980), p. 91-101. DOI : [10.1016/0021-9797\(80\)90419-1](https://doi.org/10.1016/0021-9797(80)90419-1).
- [122] V. M. MULLER, V. YUSHCHENKO et B. DERJAGUIN. « General Theoretical Consideration of the Influence of Surface Forces on Contact Deformations and the Reciprocal Adhesion of Elastic Spherical PArticles ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 92.1 (1983), p. 92-101. DOI : [10.1016/0021-9797\(83\)90119-4](https://doi.org/10.1016/0021-9797(83)90119-4).
- [123] D. MAUGIS. « Adhesion of Spheres : The JKR-DMT Transition Using a Dugdale Model ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 150.1 (1992), p. 243-269. DOI : [10.1016/0021-9797\(92\)90285-T](https://doi.org/10.1016/0021-9797(92)90285-T).
- [124] S. MESAROVIC et K. JOHNSON. « Adhesive contact of elastic-plastic spheres ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48 (2000), p. 2009-2033. DOI : [10.1016/S0022-5096\(00\)00004-1](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(00)00004-1).
- [125] S. MESAROVIC. « Mapping the elastic-plastic contact and adhesion ». In : *Multiscale Deformation and Fracture in Materials and Structures* (2000), p. 71-85. DOI : [10.1007/0-306-46952-9_5](https://doi.org/10.1007/0-306-46952-9_5).

- [126] O. SKRINJAR et P. LARSSON. « On the local contact behaviour in regular lattices of composite powders ». In : *Journal of material process technology* 184 (2007), p. 312-318. DOI : [10.1016/j.jmatprotec.2006.11.099](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2006.11.099).
- [127] O. SKRINJAR, P. LARSSON et B. STORÅKERS. « Local contact compliance relations at compaction of composite powders ». In : *Journal of applied mechanics* 74 (2007), p. 164-168. DOI : [10.1115/1.2165240](https://doi.org/10.1115/1.2165240).
- [128] E. OLSSON et P. LARSSON. « On force–displacement relations at contact between elastic–plastic adhesive bodies ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61 (2013), p. 1185-1201. DOI : [10.1016/j.jmps.2013.01.004](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.01.004).
- [129] N. AUDRY, B. HARTHONG et D. IMBAULT. « Comparison between periodic and non-periodic boundary conditions in the multi-particle finite element modelling of ductile powders ». In : *Powder Technology* (2023). DOI : [10.1016/j.powtec.2023.118871](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.118871).
- [130] K. SCHNEIDER, B. KLUSEMANN et S. BARGMANN. « Fully periodic RVEs for technological relevant composites : not worth the effort ! ». In : *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 12 (2017), p. 471-484. DOI : [10.2140/jomms.2017.12.471](https://doi.org/10.2140/jomms.2017.12.471).
- [131] V. SMILAUER et al. *Yade documentation*. The Yade Project, 2021. DOI : [10.5281/zenodo.5705394](https://doi.org/10.5281/zenodo.5705394).
- [132] F. SIDOROFF. *Le site à Sido*. 2009. URL : <http://sitasido.ec-lyon.fr/accueil.php>.
- [133] J. GARRIGUES. *Cinématique des milieux continus*. 2022. URL : <http://jean.garrigues.perso.centrale-marseille.fr/File/cinematique.pdf>.
- [134] I. AZEHAF. « Modélisation du comportement mécanique et de la perméabilité des renforts tissés ». Thèse de doct. Université de Lyon, 2017. URL : lamcos.insa-lyon.fr/files/theses/1145-these.pdf.
- [135] H. HERTZ. « Über die berührung fester elastischer körper ». In : *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92 (1881), p. 156-171. DOI : [10.1515/crll.1882.92.156](https://doi.org/10.1515/crll.1882.92.156).
- [136] D. GRIERSON, E. FLATER et R. CARPICK. « Accounting for the JKR–DMT transition in adhesion and friction measurements with atomic force microscopy ». In : *J. Adhesion Sci. Technol.* 19.3–5 (2005), 291–311. DOI : [10.1163/1568561054352685](https://doi.org/10.1163/1568561054352685).
- [137] X. SHI et Y. ZHAO. « Comparison of various adhesion contact theories and the influence of dimensionless load parameter ». In : *J. Adhesion Sci. Technol.* 18.1 (2004), 55–68. DOI : [10.1163/156856104322747009](https://doi.org/10.1163/156856104322747009).
- [138] D. TABOR. « Surface forces and surface interactions ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 58.1 (1977), p. 2-13. DOI : [10.1016/0021-9797\(77\)90366-6](https://doi.org/10.1016/0021-9797(77)90366-6).
- [139] C. ARGENTO, A. JAGOTA et W. CARTER. « Surface formulation for molecular interactions of macroscopic bodies ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45.7 (1997), p. 1161-1183. DOI : [10.1016/S0022-5096\(96\)00121-4](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(96)00121-4).
- [140] A. JAGOTA et C. ARGENTO. « An Intersurface Stress Tensor ». In : *Journal of colloid and interface science* 191 (1997), p. 326-336. DOI : [10.1006/jcis.1997.4933](https://doi.org/10.1006/jcis.1997.4933).
- [141] N. YU et A. POLYCARPOU. « Adhesive contact based on the Lennard–Jones potential : a correction to the value of the equilibrium distance as used in the potential ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 278 (2004), p. 428-435. DOI : [10.1016/j.jcis.2004.06.029](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2004.06.029).
- [142] J. GREENWOOD et J. WILLIAMSON. « Contact of nominally flat surfaces ». In : *Proceedings of the Royal Society of London* 295.1442 (1966), p. 300-319. DOI : [10.1098/rspa.1966.0242](https://doi.org/10.1098/rspa.1966.0242).

- [143] J. GREENWOOD et J. TRIPP. « The Contact of Two Nominally Flat Rough Surfaces ». In : *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* 185.1 (1970), p. 625-633. DOI : [10.1243/PIME_PROC_1970_185_069_02](https://doi.org/10.1243/PIME_PROC_1970_185_069_02).
- [144] K. FULLER et D. TABOR. « The effect of surface roughness on the adhesion of elastic solids ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A*.345 (1975), p. 327-342. DOI : [10.1098/rspa.1975.0138](https://doi.org/10.1098/rspa.1975.0138).
- [145] W. CHANG, I. ETSION et D. BOGY. « An Elastic-Plastic Model for the Contact of Rough Surfaces ». In : *Journal of Tribology* 109 (1987), p. 257-263. DOI : [10.1115/1.3261348](https://doi.org/10.1115/1.3261348).
- [146] W. CHANG, I. ETSION et D. BOGY. « Adhesion Model for Metallic Rough Surfaces ». In : *Journal of Tribology* 110 (1988), p. 50-56. DOI : [10.1115/1.3261574](https://doi.org/10.1115/1.3261574).
- [147] Y. ZHAO et L. CHANG. « A Model of Asperity Interactions in Elastic-Plastic Contact of Rough Surfaces ». In : *Journal of Tribology* 123 (2001), p. 857-864. DOI : [10.1115/1.1338482](https://doi.org/10.1115/1.1338482).
- [148] J. ABDO et K. FARHANG. « Elastic-plastic contact model for rough surfaces based on plastic asperity concept ». In : *International Journal of Non-Linear Mechanics* 40 (2005), 495 – 506. DOI : [10.1016/j.ijnonlinmec.2004.08.003](https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2004.08.003).
- [149] P. SAHOO et A. BANERJEE. « Asperity interaction in elastic-plastic contact of rough surfaces in presence of adhesion ». In : *Journal of physics D : applied physics* 38 (2005), 2841–2847. DOI : [10.1088/0022-3727/38/16/016](https://doi.org/10.1088/0022-3727/38/16/016).
- [150] J. PULLEN et J. WILLIAMSON. « On the plastic contact of rough surfaces ». In : *Proceedings of the Royal Society of London* 327 (1972), p. 159-173. DOI : [10.1098/rspa.1972.0038](https://doi.org/10.1098/rspa.1972.0038).
- [151] J. WILLIAMSON et R. HUNT. « Asperity persistence and the real area of contact between rough surfaces ». In : *Proceedings of the Royal Society of London* 327 (1972), p. 147-157. DOI : [10.1098/rspa.1972.0037](https://doi.org/10.1098/rspa.1972.0037).
- [152] D. TABOR. *The Hardness of Metals*. Oxford University Press, 1951. ISBN : 9780198507765.
- [153] V. BÉRARD et al. « Dry powder inhaler : influence of humidity on topology and adhesion studied by AFM ». In : *International Journal of Pharmaceutics* 232 (1-2) (2002), p. 213-224. DOI : [10.1016/S0378-5173\(01\)00913-9](https://doi.org/10.1016/S0378-5173(01)00913-9).
- [154] W. LODE. « Versuche über den Einfluß der mittleren Hauptspannung auf das Fließen der Metalle Eisen, Kupfer und Nickel ». In : *Zeitschrift für Physik* 36 (1926), p. 913-939. DOI : [10.1007/BF01400222](https://doi.org/10.1007/BF01400222).
- [155] P. DORÉMUS et G. PUENTE. « La compression à froid ». In : *Métallurgie des poudres*. Sous la dir. de D. BOUVARD. Hermes Science, 2002, p. 61-122. ISBN : 2746202999.
- [156] P. DORÉMUS. « Model input data - Failure ». In : *Modelling of powder die compaction*. Sous la dir. de P. R. BREWIN et al. Springer, 2008, p. 95-103. DOI : [10.1007/978-1-84628-099-3](https://doi.org/10.1007/978-1-84628-099-3).
- [157] R. HILL. « A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 6 (1958), p. 236-249. DOI : [10.1016/0022-5096\(58\)90029-2](https://doi.org/10.1016/0022-5096(58)90029-2).
- [158] D. BIGONI et T. HUECKEL. « Uniqueness and localization - I. Associative and non-associative elastoplasticity ». In : *International Journal of Solids and Structures* 28 (1991), p. 197-213. DOI : [10.1016/0020-7683\(91\)90205-T](https://doi.org/10.1016/0020-7683(91)90205-T).
- [159] D. BIGONI et T. HUECKEL. « Uniqueness and localization - II. Coupled elastoplasticity ». In : *International Journal of Solids and Structures* 28 (1991), p. 215-224. DOI : [10.1016/0020-7683\(91\)90206-U](https://doi.org/10.1016/0020-7683(91)90206-U).

-
- [160] T. DESOYER et F. CORMERY. « On uniqueness and localization in elastic-damage materials ». In : *International Journal of Solids and Structures* 31 (1994), p. 733-744. DOI : [10.1016/0020-7683\(94\)90149-X](https://doi.org/10.1016/0020-7683(94)90149-X).
- [161] F. DARVE et al. « Failure in geomaterials : continuous and discrete analyses ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193 (2004), p. 3057-3085. DOI : [10.1016/j.cma.2003.11.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.11.011).
- [162] G. BUSCARNERA et C. di PRISCO. « Discussing the definition of the second-order work for unsaturated soils ». In : *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics* 36 (2010), p. 36-49. DOI : [10.1002/nag.991](https://doi.org/10.1002/nag.991).
- [163] F. NICOT et al. « From microscopic to macroscopic second-order work in granular assemblies ». In : *Mechanics of materials* 39 (2007), p. 664-684. DOI : [10.1016/j.mechmat.2006.10.003](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2006.10.003).
- [164] F. NICOT, F. DARVE et H. D. V. KHOA. « Bifurcation and second-order work in geomaterials ». In : *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 31 (2009), p. 1007-1032. DOI : [10.1002/nag.762](https://doi.org/10.1002/nag.762).
- [165] F. NICOT et al. « Second-order work, kinetic energy and diffuse failure in granular materials ». In : *Granular Matter* 13 (2010), p. 19-28. DOI : [10.1007/s10035-010-0219-2](https://doi.org/10.1007/s10035-010-0219-2).
- [166] R. WAN et al. « Diffuse instabilities with transition to localization in loose granular materials ». In : *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics* 37 (2012), p. 1292-1311. DOI : [10.1002/nag.2085](https://doi.org/10.1002/nag.2085).
- [167] R. WAN et X. GONG. « Bifurcation and degradation of geomaterials in the new millennium ». In : Conference proceedings, 2015. Chap. Hierarchy of failure indicators in the failure analysis of geomaterials. DOI : [10.1007/978-3-319-13506-9_28](https://doi.org/10.1007/978-3-319-13506-9_28).
- [168] F. GUSTAFFSON. « Determining the initial states in forward-backward filtering ». In : *Transactions on signal processing* 46 (1996), p. 988-992. DOI : [10.1109/78.492552](https://doi.org/10.1109/78.492552).



Définition du fichier d'entrée de la simulation en éléments finis sous *Abaqus*

L'annexe A présente la structure du fichier d'entrée utilisé par le logiciel Abaqus pour la définition du modèle en éléments finis. Le cas de l'utilisation d'une subroutine utilisateur VUINTERACTION est également présenté.

Le logiciel *Abaqus* utilise un fichier d'entrée (d'extension .inp) pour la définition complète du problème éléments finis à résoudre. Ce fichier sert de base à la simulation numérique. Il permet de définir la géométrie, les matériaux, les interactions de contact, la discrétisation, les CL ainsi que la méthode de résolution numérique à utiliser lors de la simulation en éléments finis. Ce fichier d'entrée peut être écrit directement, ou généré à l'aide de l'interface graphique *Abaqus/CAE*. Il débute en indiquant le nom de la simulation effectuée et du modèle éléments finis auquel il réfère. La version utilisée ainsi que différentes options de pré-traitement sont également spécifiées (figure A.1).

```
*Heading
** Job name: 50sph Model name: 50sph
** Generated by: Abaqus/CAE 2020.HF9
*Preprint, echo=NO, model=NO, history=NO, contact=NO
```

FIGURE A.1 – Initialisation du fichier d'entrée d'*Abaqus*.

Une fois ces lignes d'entête écrites, les différentes parties du modèle sont précisées (figure A.2). Dans le cadre d'une modélisation en éléments finis multi-particules, chaque partie correspond à une particule. Les nœuds associés à chaque partie sont pour cela définis. Chaque nœud est pour cela affecté à un identifiant et ses coordonnées initiales sont précisées dans un repère local associé à la partie considérée. Une fois le type d'éléments précisé, la table de connectivité est définie. Cette table permet de spécifier, pour chaque élément fini, la liste des nœuds le constituant. Des sous-ensembles de nœuds ou d'éléments peuvent ensuite être définis dans l'optique d'être ultérieurement utilisés, pour l'application des CL, pour la création de couplages, pour la définition de surfaces, où encore pour l'export de données de post-traitement. Enfin, une section est associée à la partie créée. Dans le cas présent, les parties sont associées à des sections solides homogènes, constituées d'un matériau nommé "LEAD" défini ultérieurement.

```
** PARTS
**
*Part, name=SPH_0000
*Node
    1,      0.,      0.,      0.
    2,      0.,      0.147147,  0.
    3, -0.0380844474,  0.142133087,  0.
    [...]
*Element, type=C3D8R
    1, 104, 105, 365, 357, 8, 9, 87, 86
    2, 105, 106, 366, 365, 9, 10, 88, 87
    3, 106, 14, 95, 366, 10, 1, 11, 88
    [...]
*Nset, nset=SPH_0000-REFPT_, internal
    562,
*Nset, nset=_PICKEDSET14, internal, generate
    1, 561, 1
*Elset, elset=_PICKEDSET14, internal, generate
    1, 432, 1
** Section: Section-1-_PICKEDSET14
*Solid Section, elset=_PICKEDSET14, material=LEAD
,
*End Part
[...]
```

FIGURE A.2 – Définition des différentes parties du modèle.

Les différentes parties créées sont ensuite introduites au sein de l'assemblage éléments finis (figure A.3). La position de chaque partie est pour cela précisée dans le repère global associé au modèle. Dans le cas présent, les trois nœuds auxiliaires utilisés pour l'application des CL ne sont affectés à aucune partie et sont donc directement créés au sein de l'assemblage.

Des ensembles contenant la liste des éléments appartenant aux surfaces extérieures de chaque partie sont ensuite automatiquement générés. Plus précisément, plusieurs sous-ensembles sont générés en fonction de l'orientation des éléments en surface afin de pouvoir connaître, grâce à

```

** ASSEMBLY
**
*Assembly, name=Assembly
**
*Instance, name=SPH_0000, part=SPH_0000
    0.617656,    0.477128,    0.443537
*End Instance
[...]
**
*Node
    1, -0.426542073,    0.426543802,    0.426543087
    2,  0.426542073,   -0.426543802,    0.426543087
    3,  0.426542073,    0.426543802,   -0.426543087
*Nset, nset=SPH_0000_RP, instance=SPH_0000
562,
[...]
*Nset, nset=XREF
1,
*Nset, nset=YREF
2,
*Nset, nset=ZREF
3,
*Nset, nset=SPH_0000_COUPLING, internal, instance=SPH_0000
    1,  9, 10, 11, 12, 14, 15, 34, 56, 57, 63, ...
*Elset, elset=_SPH_0000_S2, internal, instance=SPH_0000
109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, ...
*Elset, elset=_SPH_0000_S3, internal, instance=SPH_0000
37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 91, 92, ...
*Elset, elset=_SPH_0000_S4, internal, instance=SPH_0000
28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 46, 47, ...
[...]
*Surface, type=ELEMENT, name=SPH_0000
_SPH_0000_S4, S4
_SPH_0000_S3, S3
_SPH_0000_S2, S2
[...]
*Surface, type=NODE, name=SPH_0000_COUPLING_CNS_, internal
SPH_0000_COUPLING, 1.
[...]
** Constraint: COUPLAGE_CLP_SPH_0000_RP_SPH_0000_XINF_RP
*Equation
3
SPH_0000_RP, 1, -1.
SPH_0000_XINF_RP, 1, 1.
XREF, 1, 1.
[...]
** Constraint: SPH_0000
*Coupling, constraint name=SPH_0000, ref node=SPH_0000_RP, surface=SPH_0000_COUPLING_CNS_
*Distributing, weighting method=CUBIC
[...]
*End Assembly

```

FIGURE A.3 – Définition de l'assemblage.

la table de connectivité, la liste des nœuds appartenant aux surfaces extérieures des différentes parties. Par exemple, des éléments tétraédriques quadratiques, constitués de dix nœuds et de quatre facettes, seront numérotés suivant le schéma de la [figure A.4](#), les indices 1 à 10 correspondant à l'ordre de rangement des nœuds de l'élément considéré dans la table de connectivité.

En créant un ensemble d'éléments appartenant à la surface, *Abaqus* crée en fait (dans le cas des éléments tétraédriques) quatre sous-ensembles d'éléments distincts contenant la liste des éléments appartenant à la surface, en rangeant les éléments dans un de ces quatre sous-ensembles, en fonction du numéro de la facette de l'élément appartenant à la surface. En fonction du sous-ensemble, il est alors possible, à l'aide de la [figure A.4](#) et de la table de connectivité, de connaître le numéro des six nœuds de chaque élément appartenant effectivement à la surface. Le lecteur pourra se référer à la documentation du logiciel *Abaqus* concernant le cas des éléments hexaédriques ou pour plus de détails. Enfin, c'est également dans cette partie que les différents couplages du modèle (tels que les équations de couplage et couplages de distribution utilisés pour l'application des CL)

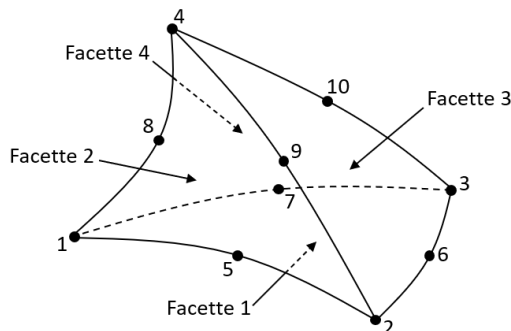


FIGURE A.4 – Numéro des facettes associées à un élément tétraédrique quadratique, en fonction de l'ordre de rangement des nœuds dans la table de connectivité [45].

sont précisés.

Les lois utilisées pour modéliser le comportement des matériaux constitutifs des parties sont ensuite définies (figure A.5). Dans le cas présent, la densité (exprimée en $t.mm^{-3}$), les propriétés élastiques (module de Young exprimé en MPa et coefficient de Poisson), ainsi que les propriétés plastiques (limite d'élasticité en MPa en fonction de la déformation plastique) sont précisées.

```

** MATERIALS
**
*Material, name=LEAD
*Density
 1e-08,
*Elastic
10000., 0.435
*Plastic
 5., 0.
 5.098, 7.8e-07
 5.266, 1.25e-05
 5.477, 6.328e-05
 5.722, 0.0002
[...]
```

FIGURE A.5 – Création des matériaux.

Vient ensuite le tour des lois de contact entre les différentes parties du modèle. Dans un premier temps, les propriétés de contact sont introduites (figure A.6). Les paramètres des lois de contact sont précisés (ici, seulement un coefficient de frottement de Coulomb $\mu = 0.1$) et l'algorithme de gestion des contacts est défini.

```

** INTERACTION PROPERTIES
**
*Surface Interaction, name=IntProp-1
*Friction
 0.1,
*Surface Behavior, pressure-overclosure=HARD
```

FIGURE A.6 – Création des lois de contact : cas d'une propriété prédéfinie par le logiciel *Abaqus*.

Dans le cas de la définition d'une interaction de surface personnalisée, faisant appel à une sous-routine utilisateur *VUINTERACTION*, les lignes précédentes sont remplacées par celles de la figure A.7, où "name" fait référence au nom du fichier fortran contenant la sous-routine utilisateur (ici appelé *vuinteraction.f* et présenté annexe B), "depvar" au nombre de variables d'état utilisées par la sous-routine, "properties" au nombre de paramètres associés à l'interaction et tracking thickness à la distance maximale jusqu'à laquelle des surfaces sont considérées comme pouvant potentiellement être en contact. Les paramètres associés à cette interaction sont ensuite précisés. Ils correspondent, avec la sous-routine actuelle, à la raideur de pénalité, à l'énergie de surface, à la

limite d'élasticité des aspérités du modèle de Pullen [150], à la distance d'interaction maximale δ_{max} et au coefficient de frottement. Dans le cas présent, une raideur prise comme nulle indique que la raideur par défaut du logiciel *Abaqus* (s'adaptant au pas de temps) est à considérer.

```
** INTERACTION PROPERTIES
**
*Surface Interaction, name=vuinteraction,user=interaction,depvar=1,properties=5, tracking thickness=0.00022
0.0, 0.001, 5.0, 0.0002, 0.1
```

FIGURE A.7 – *Création des lois de contact : cas d'une propriété définie à l'aide d'une subroutine utilisateur.*

Dans un second temps, ces propriétés sont affectées aux contacts entre les surfaces des différentes parties du modèle (figure A.8). Dans le cas présent, chaque paire de particules pouvant potentiellement entrer en contact est définie, tel qu'expliqué section 2.4. La propriété de contact (nommée "IntProp-1" dans le cas de la figure A.6) est alors appliquée comme loi de contact entre ces différentes paires de particules. Le nom de la propriété d'interaction est à remplacer par "vuinteraction" dans le cas de la propriété définie à l'aide de la subroutine utilisateur *VUINTERACTION* (figure A.7).

```
** INTERACTIONS
**
** Interaction: Int-1
*Contact, op=NEW
*Contact Inclusions
SPH_0000 , SPH_0001
SPH_0000 , SPH_0044_ZINF
SPH_0000 , SPH_0033_XSUP_ZINF
[...]
*Contact Property Assignment
, , IntProp-1
** -----
```

FIGURE A.8 – *Définition des interactions de contact.*

Les différentes étapes de la simulation numérique (nommées *step*) sont ensuite définies (figure A.9). La méthode ainsi que les paramètres de la résolution numérique (notamment le *Mass Scaling*) associés à l'étape considérée sont précisés dans cette partie.

```
** STEP: Step-1
**
*Step, name=Step-1, nlgeom=YES
*Dynamic, Explicit
, 1.
*Bulk Viscosity
0.06, 1.2
** Mass Scaling: Semi-Automatic
** Whole Model
*Fixed Mass Scaling, dt=3e-06, type=below min
```

FIGURE A.9 – *Création d'un step, correspondant à une étape de la simulation numérique.*

Pour chacune de ces étapes, les déplacements ou forces appliqués à certains nœuds du maillage peuvent alors être imposés comme CL pour conduire à la déformation de l'assemblage modélisé. Les amplitudes en fin de *step* sont pour cela précisées, et une rampe d'amplitude est définie (figure A.10). Dans le cas présent, une amplitude "SMOOTH" est utilisée afin de réduire les vibrations numériques aux changements de *step* en évitant les accélérations infinies.

Enfin, les grandeurs physiques utiles au post-traitement ainsi que l'échantillonnage sont précisées (figure A.11). Le déplacement de chaque nœud est sauvegardé afin de pouvoir représenter la géométrie de l'assemblage dans la configuration déformée. Par ailleurs, les forces et déplacements des trois nœuds auxiliaires, les coordonnées et déplacements des centres de masse de chacune des

```
** BOUNDARY CONDITIONS
**
*Amplitude, name=AMP-1, definition=SMOOTH STEP
  0., 0., 1., 1.
**
** Name: Disp-BC-1 Type: Displacement/Rotation
*Boundary, amplitude=AMP-1
XREF, 1, 1, -0.361115
** Name: Disp-BC-2 Type: Displacement/Rotation
*Boundary, amplitude=AMP-1
XREF, 2, 2
** Name: Disp-BC-3 Type: Displacement/Rotation
*Boundary, amplitude=AMP-1
XREF, 3, 3
** Name: Disp-BC-4 Type: Displacement/Rotation
[...]
```

FIGURE A.10 – Définition des CL appliquées au modèle, lors du step considéré.

parties, ainsi que les forces de contact entre toutes les paires de surfaces sont sauvegardés afin d'être utilisés en post-traitement dans le calcul des contraintes et déformations mésoscopiques. Enfin, les différentes énergies associées au modèle et enregistrées par défaut par *Abaqus* sont également sauvegardées, ceci notamment afin de valider les choix du *Mass Scaling* et de définir les critères de plasticité et de rupture.

```
** OUTPUT REQUESTS
**
*Restart, write, number interval=1, time marks=NO
**
** FIELD OUTPUT: F-Output-1
**
*Output, field, number interval=100
*Node Output
U,
*Element Output, directions=YES
S,
**
** FIELD OUTPUT: F-Output-2
**
*Node Output, nset=XREF
RF, U
**
** FIELD OUTPUT: F-Output-3
**
*Node Output, nset=YREF
RF, U
**
** FIELD OUTPUT: F-Output-4
**
*Node Output, nset=ZREF
RF, U
**
** HISTORY OUTPUT: H-Output-SPH_0000
**
*Output, history, time interval=0.01
*Integrated Output, elset=SPH_0000
COORDCOM1, COORDCOM2, COORDCOM3, UCOM1, UCOM2, UCOM3
[...]
**
*Output, history, time interval=0.01
*Contact Output, Surface=SPH_0000, Second Surface=SPH_0003_ZSUP
CFT
[...]
**
** HISTORY OUTPUT: H-Output-1
**
*Output, history, variable=PRESELECT
*End Step
```

FIGURE A.11 – Définition des variables de sortie à sauvegarder, lors du step considéré.

B

Subroutine utilisateur implémentée pour la création d'une loi de contact adhésif.

L'annexe B présente le principe de fonctionnement de la subroutine utilisateur VUINTERACTION, utilisée pour l'implémentation de la loi de contact adhésif développée [section 3.3](#).

Le logiciel éléments finis *Abaqus* autorise l'implémentation de fonctionnalités personnalisées à l'aide d'algorithmes appelés *subroutines utilisateur*. Ces algorithmes, écrits en langage *Fortran 77*, permettent l'extension des fonctionnalités de base du logiciel. Ils autorisent notamment l'implémentation de lois de comportement, de lois de contact, de conditions aux limites ou encore de chargements adaptés à des besoins très spécifiques, non pris en charge directement par *Abaqus*. Cette fonctionnalité offre donc aux utilisateurs une grande flexibilité pour la modélisation et l'analyse numérique de systèmes complexes.

La subroutine utilisateur *VUINTERACTION*, présentée ci-dessous, permet la définition des interactions de surface au sein du modèle éléments finis, dans le cas d'une modélisation explicite. Cette subroutine est appelée à chaque incrément de temps (au total 12 fois par incrément) afin de déterminer, en chaque nœud de surface du maillage éléments finis, les efforts transmis par les interactions de contact entre une surface "maître" et une surface "esclave". La surface maître correspond à la surface primaire avec laquelle d'autres surfaces viennent en contact et est utilisée pour la définition des conditions de contact. La surface esclave, quant à elle, correspond à la surface entrant en contact avec la surface maître. Dans le cas présent, aucune particule n'ayant de caractéristiques particulières vis à vis des autres, un algorithme symétrique de gestion des contacts, intervertissant le rôle des surfaces maître et esclave, est utilisé.

A chaque appel de la subroutine, un ensemble de points de proximité est pour cela défini. Ces points correspondent aux points de chaque facette de la surface maître les plus proches des nœuds de la surface esclave. Une épaisseur de suivi (*tracking thickness*), correspondant à la distance maximale de prise en compte des interactions de contact, est pour cela lue dans le fichier d'entrée d'*Abaqus* présenté annexe A. Cette épaisseur doit être minimisée pour optimiser l'efficacité numérique, tout en s'assurant de capturer l'intégralité des points de proximité pouvant effectivement entrer en contact à l'incrément considéré. Le lecteur pourra se référer à la documentation du logiciel *Abaqus* [45] pour plus de détails. Dans le cas présent, l'interaction de contact agissant jusqu'à une distance δ_{max} , une épaisseur de suivi supérieure à δ_{max} est à considérer.

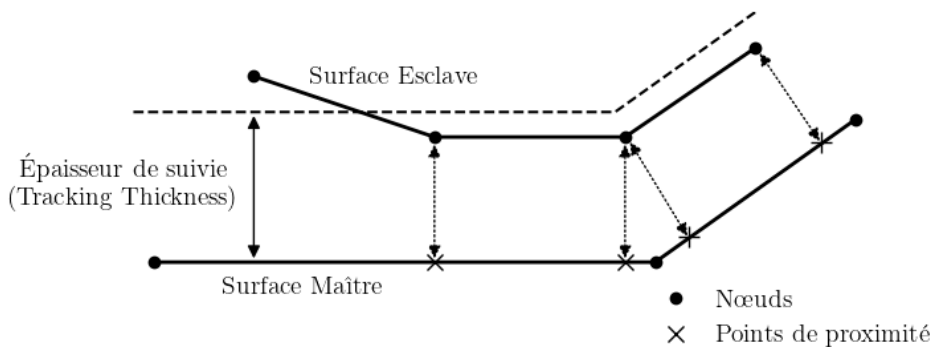


FIGURE B.1 – Représentation schématique de la gestion définition des points de proximité pour la gestion des contacts.

Les efforts de contact sont alors calculés de manière incrémentale en chacun de ces points de proximité, avant d'être interpolés aux nœuds de la surface maître considérée. Des repères de coordonnées locaux (exprimés en chaque point de proximité) sont pour cela définis et les vecteurs contraintes à l'incrément de temps actuel sont calculés à partir de la connaissance des vecteurs contraintes à l'incrément de temps précédent et de la loi de contact. La convention qu'une contrainte normale positive correspond à une pression dirigée sur la surface est utilisée.

La loi de contact présentée section 3.3 est pour cela utilisée. Les paramètres de la loi de contact (à savoir la raideur de pénalité k , l'énergie d'adhésion γ , la limite d'élasticité des aspérités σ_y , la distance maximale d'interaction δ_{max} ainsi que le coefficient de frottement de Coulomb μ) sont pour cela lus dans le fichier d'entrée d'*Abaqus* présenté annexe A. La valeur du degré de contact α

associée à chaque point de proximité est stockée entre deux appels consécutifs de la subroutine à l'aide d'une variable d'état. Cette précaution est prise afin d'éviter la réinitialisation de l'adhésion lors de la phase de décharge causée par l'hystérésis de la loi de contact : à chaque appel de la subroutine, la valeur du degré de contact est tout d'abord lue depuis la variable d'état, modifiée suivant le modèle de contact, puis stockée dans la variable d'état dans l'optique de pouvoir être utilisée lors de l'appel suivant. Il a été observé que le logiciel *Abaqus* réinitialise les variables d'état aux changements de *Step*. Ce constat justifie la nécessité d'effectuer la décharge et la recharge du système modélisé au sein d'un seul et même *Step* pour l'obtention des surfaces de rupture, afin d'éviter la réinitialisation du degré de contact α en début de recharge. Enfin, l'incrément de dissipation d'énergie par frottement est calculé en chaque point de proximité. Ces valeurs contribuent au calcul de l'énergie du système dissipée par frottement, utile pour la définition du critère de rupture.



Détermination des grandeurs mésoscopiques associées au milieu granulaire

L'annexe C présente plus en détail 1. le calcul de la déformation mésoscopique associée au VEP par une minimisation en moindres carrés et 2. le calcul de la contrainte mésoscopique associée au VEP à l'aide de la formule de Love-Weber [108, 109]. Le lecteur pourra se référer aux travaux de Teil [6] pour plus de détails.

Sommaire

C.1	Détermination du tenseur gradient des déplacements mésoscopiques	XXVI
C.2	Détermination du tenseur des contraintes mésoscopiques	XXVII

C.1 Détermination du tenseur gradient des déplacements mésoscopiques

Soit un ensemble discret constitué de N points matériels α (dans le cas présent, les centres de masse des particules), de position initiale \underline{X}^α et de déplacement simulé \underline{u}^α . Le tenseur \underline{H} minimisant la quantité χ^2 défini [équation C.1](#) est alors recherché.

$$\chi^2 = \sum_{\alpha=1}^N \|\underline{u}(\underline{X}^\alpha) - \underline{u}^\alpha\|^2 \quad (\text{C.1})$$

Afin d'inclure le mouvement de corps rigide sous forme d'une simple multiplication de matrices, le gradient des déplacements modifiés $\tilde{\underline{H}}$ défini ci-dessous ([équation C.2](#)) est introduit, avec $\tilde{\underline{u}}$ le vecteur déplacement modifié, $\tilde{\underline{x}}$ le vecteur position modifié et $\underline{u}^0 = (u_1^0 \ u_2^0 \ u_3^0)$ le vecteur déplacement moyen associé au VEP.

$$\tilde{\underline{u}} = \tilde{\underline{H}} \cdot \tilde{\underline{x}} \text{ avec } \tilde{\underline{u}} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ 1 \end{pmatrix}, \tilde{\underline{x}} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } \tilde{\underline{H}} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & u_1^0 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & u_2^0 \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & u_3^0 \\ u_1^0 & u_2^0 & u_3^0 & \tilde{H}_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

L'équation [C.1](#) peut alors être réécrite :

$$\chi^2 = \sum_{\alpha=1}^N \|\tilde{\underline{H}} \cdot \tilde{\underline{x}}^\alpha - \tilde{\underline{u}}^\alpha\|^2 \quad (\text{C.3})$$

où $\tilde{\underline{x}}^\alpha$ dénote le vecteur position modifié associé à un point matériel donné α du volume de contrôle et $\tilde{\underline{u}}^\alpha$ son vecteur déplacement modifié. La nullité de la dérivée de χ^2 par rapport à \tilde{H}_{lm} , $(l, m) \in [1, 4] \times [1, 4]$ amène à :

$$\sum_{k=1}^4 \left(\tilde{H}_{lk} \cdot \sum_{\alpha=1}^N \tilde{x}_k^\alpha \tilde{x}_m^\alpha \right) = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{x}_m^\alpha \tilde{u}_l^\alpha \quad (\text{C.4})$$

Cette équation pouvant être réécrite :

$$\tilde{\underline{H}} = \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{A}}^{-1} \quad (\text{C.5})$$

en introduisant les matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ de la manière suivante :

$$\forall i, j = 1, 2, 3, 4 : \begin{cases} A_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{x}_i^\alpha \tilde{x}_j^\alpha \\ B_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{u}_i^\alpha \tilde{x}_j^\alpha \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

$\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ peuvent être déterminés grâce à la connaissance des vecteurs déplacement modifié $\tilde{\underline{u}}^\alpha$ et position modifiée $\tilde{\underline{x}}^\alpha$ associés aux centres de masse de chaque particule α appartenant au VEP¹. Ces deux grandeurs peuvent directement être exportées du logiciel *Abaqus* à l'aide des variables de sortie *COORDCOM* et *UCOM* associées à chaque particule. Le gradient des déplacements \underline{H} est finalement directement déduit du gradient des déplacements modifiés $\tilde{\underline{H}}$ ($\forall i, j = 1, 2, 3 : H_{ij} = \tilde{H}_{ij}$).

1. Idéalement, il serait plus précis d'appliquer l'[équation C.6](#) aux vecteurs positions et déplacements modifiés associés à chaque nœud du maillage éléments finis pour le calcul des matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$. Il a été décidé de ne l'appliquer qu'aux centres de masse des particules dans l'optique de réduire le nombre de fichiers de sortie générés par *Abaqus*, facilitant ainsi le stockage et accélérant le post-traitement des données.

C.2 Détermination du tenseur des contraintes mésoscopiques

La contrainte mésoscopique homogénéisée associée à un milieu hétérogène de volume V est définie par :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \check{\sigma}_{ij} dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} x_j t_i d\Gamma \quad (\text{C.7})$$

avec Γ la surface fermée délimitant le volume V , $\check{\sigma}_{ij}$, x_j et t_i les composantes, respectivement, du tenseur des contraintes locales, du vecteur position initiale associé à un point matériel et du vecteur contrainte locale. Cette dernière égalité peut être obtenue à l'aide du théorème de Green-Ostrogradski ou du principe des puissances virtuelles. Soit maintenant un volume V contenant un nombre entier N de particules α (i.e. la surface Γ inclut des surfaces de contact mais ne coupe aucune particule). En notant n_α le nombre de contacts associés à chaque particule α , l'équation C.7 peut alors être réécrite :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \int_{\Gamma_\alpha} x_j t_i d\Gamma_\alpha = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{c=1}^{n_\alpha} \int_{\Gamma_c} x_j t_i d\Gamma_c \quad (\text{C.8})$$

avec Γ_α la surface extérieure associée à la particule α et Γ_c la surface de contact associée au contact c de la particule α . Cette dernière égalité est obtenue en faisant l'hypothèse qu'aucune contrainte n'est appliquée ($t_i = 0$) sur Γ_α en dehors de la surface de contact Γ_c . En introduisant maintenant $x_j = x_j^\alpha + r_j^\alpha$, où x_j^α correspond à la position d'un point arbitraire de la particule α , l'équation C.8 peut alors être réécrite :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{c=1}^{n_\alpha} \left[\int_{\Gamma_c} x_j^\alpha t_i d\Gamma_c + \int_{\Gamma_c} r_j^\alpha t_i d\Gamma_c \right] = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N x_j^\alpha \sum_{c=1}^{n_\alpha} f_i^c + \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{c=1}^{n_\alpha} \int_{\Gamma_c} r_j^\alpha t_i d\Gamma_c \quad (\text{C.9})$$

avec $\underline{f}^c = \int_{\Gamma_c} \underline{t} d\Gamma_c$ la force de contact transmise à la particule α par l'intermédiaire du contact c .

En considérant que la particule α est à l'équilibre, $\sum_{c=1}^{n_\alpha} \underline{f}_i^c = 0$ et la première partie du terme de droite de l'équation disparaît. Considérons à présent deux particules α et β en contact :

$$\int_{\Gamma_c} r_j^\alpha t_i^{\beta \rightarrow \alpha} d\Gamma_c + \int_{\Gamma_c} r_j^\beta t_i^{\alpha \rightarrow \beta} d\Gamma_c = \int_{\Gamma_c} \ell_j^{\beta \rightarrow \alpha} t_i d\Gamma_c = f_i^{\beta \rightarrow \alpha} \ell_j^{\beta \rightarrow \alpha} \quad (\text{C.10})$$

où $\underline{\ell}^{\beta \rightarrow \alpha} = \underline{x}^\alpha - \underline{x}^\beta = \underline{r}^\alpha - \underline{r}^\beta$ est le vecteur branche, $\underline{t} = \underline{t}^{\beta \rightarrow \alpha}$ le vecteur contrainte correspondant à l'action de la particule β sur la particule α , $\underline{t}^{\alpha \rightarrow \beta} = -\underline{t}^{\beta \rightarrow \alpha}$ le vecteur contrainte correspondant à l'action de la particule α sur la particule β , et $\underline{f}^{\beta \rightarrow \alpha}$ le vecteur force correspondant à l'action de contact de la particule β sur la particule α . Il est alors possible de renuméroter la somme de l'équation C.9, en sommant sur les contacts indépendamment des particules. Considérons qu'il y a n contacts inter-particules au sein du volume V , dont n_e étant des contacts "externes" (entre une particule faisant partie de V et une particule externe) et $n - n_e$ des contacts "internes" (entre deux particules du volume V). Concernant les contacts internes, l'équation C.10 s'applique directement et l'équation C.9 peut être réécrite de la manière suivante (équation C.11) en utilisant les notations k à la place de $\beta \rightarrow \alpha$ et e pour les contacts extérieurs.

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{n-n_e} f_i^k \ell_j^k + \frac{1}{V} \sum_{e=1}^{n_e} \int_{\Gamma_e} r_j^e t_i^e d\Gamma_e \quad (\text{C.11})$$

où \underline{r}^e est la position d'un point matériel vis à vis du point de référence de la particule associée au contact e , \underline{t}^e le vecteur contrainte appliquée par l'intermédiaire du contact e , et Γ_e la surface du

contact extérieur (i.e. la surface de contact entre la particule en contact et un solide extérieur ne faisant pas partie de V).

Comme vu ci-dessus, un contact k contribue à la contrainte mésoscopique sous la forme $f_i^k t_j^k$ si et seulement si l'action et la réaction sont toutes deux considérées. Dans le modèle MPFEM, les contacts entre une particule à l'intérieur du VEP et une particule à l'extérieur du VEP n'entrent pas dans cette catégorie. Il est toutefois possible d'appliquer l'équation 2.6 telle quelle dans le cas d'un empilement périodique. En effet, considérons le cas de deux particules α^+ et β^- appartenant au VEP, localisées aux limites opposées x^+ et x^- respectivement. Dans le modèle numérique, le contact entre la particule α^+ et β^- est pris en compte grâce à la création d'une particule β^+ correspondant au clône de la particule β^- et entrant en contact avec la particule α^+ . Si la contrainte est calculée en incluant la particule β^+ , l'équation 2.6 reste valide, étant donné que le contact entre α^+ et β^- (qui en théorie existe à travers la périodicité mais qui n'est pas inclus dans la simulation) est remplacé par un contact identique entre α^+ et β^+ . Considérons maintenant que la particule α^+ est également dupliquée en α^- venant en contact avec β^- . Dans ce cas, le contact entre les particules α et β est doublé, étant donné qu'à la fois (α^+, β^+) et (α^-, β^-) forment des paires de contacts. Si ces deux contacts sont inclus dans la somme de l'équation 2.6, le calcul des contraintes devient erroné. En d'autres termes, seul l'un de ces deux contacts doit être inclus dans la somme.

Par ailleurs, dans le présent travail, tous les échantillons numériques sont initialement périodiques. Cependant, dans le cas de conditions aux limites non-périodiques, la périodicité se perd au cours de la transformation et le calcul des contraintes mésoscopiques devient alors approximatif.

Dans le cas de CLP, les forces nodales de contact sont distribuées sur l'ensemble des contacts du modèle, y compris sur les contacts entre particules coquilles dupliquées ayant des forces de contact non-nulles en raison des équations de couplage. De telles forces de contact non-nulles entre particules coquilles sans raideur mécanique sont en fait associées aux contacts périodiques entre les particules solides appartenant au VEP. Dans ce cas, l'intégralité des contacts doit être pris en compte dans l'équation 2.6.

Pour résumer sous un angle différent, il est également possible de remarquer que le travail interne peut à la fois être calculé à partir des forces de contact et déplacement des particules ou à partir des déformations et contraintes des particules. Dans le cas où seulement des particules coquilles sont ajoutées au VEP (comme c'est le cas en périodicité totale), étant donné que les particules coquilles ne développent pas de travail de déformation, l'intégralité des forces de contact contribue alors nécessairement au travail de déformation du VEP. Dans le cas où des particules solides sont ajoutées au modèle à l'extérieur du VEP, une partie des forces de contact avec des particules dupliquées contribue nécessairement au travail de déformation des particules dupliquées n'appartenant pas au VEP, et ne doit par conséquent pas être prise en compte dans le calcul de la contrainte mésoscopique associée au VEP.

D

Caractérisation micromécanique expérimentale du milieu granulaire

L'annexe D présente une méthode de caractérisation micromécanique expérimentale du milieu granulaire. Les résultats préliminaires obtenus lors de cette thèse ainsi que les perspectives quant à une validation micromécanique du principe de la loi de contact sont présentés.

Des essais micromécaniques de compression/traction à l'aide de l'outillage *FemtoTools FT-MTA03* présenté [figure D.1](#) ont été réalisés afin de caractériser le comportement mécanique des particules constitutives du milieu granulaire et d'étudier le phénomène de développement de l'adhésion à l'échelle particulaire. Ce dispositif expérimental permet la réalisation d'essais micromécaniques de résolution spatiale 0.1 nm, grâce à une cellule de force de 200 mN et de résolution en force 0.5 mN.

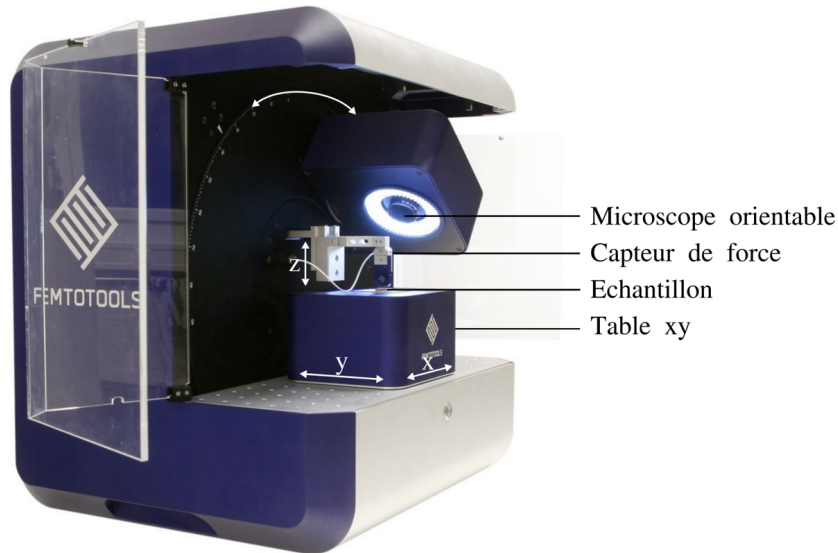


FIGURE D.1 – Photographie de l'outillage FemtoTools FT-MTA03 utilisé pour la caractérisation micromécanique du contact à l'échelle particulaire.

Un essai de compression uniaxiale entre deux particules de cuivre de rayon $r = 65 \mu\text{m}$ l'une contre l'autre, suivi d'un essai de traction uniaxiale, a été réalisé, dans l'optique de caractériser la poudre utilisée et de mesurer l'adhésion développée lors de la compression. Des particules ont pour cela été saupoudrées sur un fin film de colle à réticulation ultraviolet (UV), préalablement déposé sur une lame de verre. La colle a ensuite été réticulée. D'autre part, une particule a été collée à la cellule de force 200 mN. Le capteur a pour cela été mis en contact avec une goutte de colle puis en contact avec la particule à tester ([figure D.2](#)).

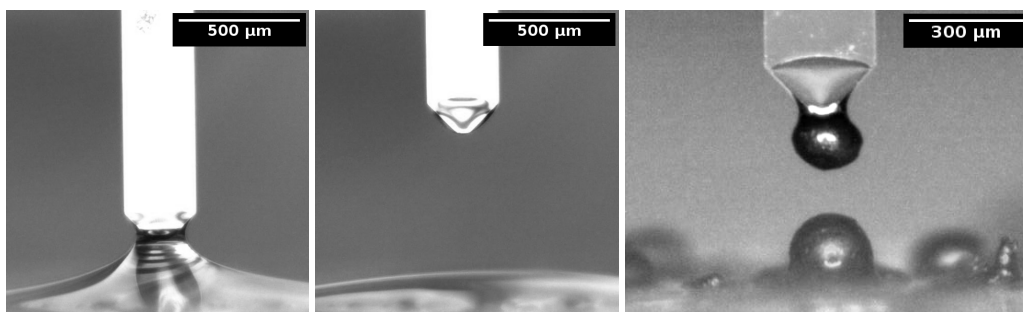


FIGURE D.2 – Images microscopiques du dépôt d'un point de colle à l'extrémité de la cellule de force et du dispositif expérimental.

Cette particule, tenant au capteur par capillarité, a ensuite été fixée par réticulation de la colle UV. Le microscope optique intégré à la *FemtoTools* a été positionné à l'horizontal lors des phases d'alignement du capteur et de la particule à coller, et d'alignement des particules à tester. Le réglage de l'alignement en profondeur (suivant la direction x sur la [figure D.1](#)) a été effectué grâce à la profondeur de champ du microscope intégré de la *FemtoTools* et à l'aide d'un second microscope de poche à longue portée *Dino-Lite* positionné le long de l'axe y .

Quatre cycles de compression/traction d'amplitude 200 mN ont ensuite été appliqués au dispositif. Une vitesse $\dot{\delta} = 0.1 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, une accélération $\ddot{\delta} = 25 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ et une fréquence d'acquisition $f = 20\text{Hz}$ ont pour cela été utilisées. La force F ainsi que le déplacement δ ont été mesurés. Les résultats présentés [figure D.3](#) semblent montrer la création d'adhésion entre les particules mises en contact. En approximant la surface de contact par l'équation [D.1](#), une contrainte d'adhésion d'environ 10 MPa semble être observée.

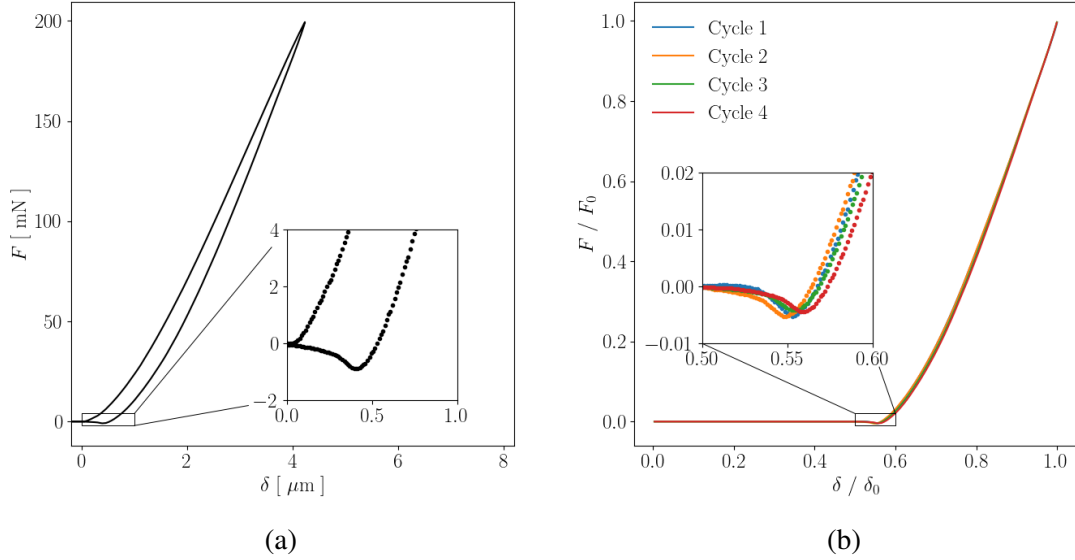


FIGURE D.3 – *Mesure micromécanique de la force et du déplacement au cours d'un essai de compression/traction entre deux particules de cuivre. (a) cycle complet et (b) décharges adimensionnelles. F_0 et δ_0 correspondant respectivement à la force et au déplacement en fin de compression.*

$$S = \pi a^2 = \pi \delta \left(r - \frac{\delta}{4} \right) \quad (\text{D.1})$$

Ces résultats obtenus semblent prometteurs quant à la caractérisation micromécanique des particules constitutives du milieu granulaire. Hélas, de tels résultats montrant une adhésion non nulle n'ont pas pu être reproduits. Aucun autre essai n'a révélé de pic d'adhésion. Il semble ainsi très probable qu'une fine pellicule de colle ait, dans le cas présent, enrobé l'échantillon et que l'adhésion mesurée corresponde en fait à celle de la colle partiellement réticulée. Il convient toutefois de noter que d'autres essais ont été réalisés en l'absence de colle et certains d'entre eux ont montré qu'il était possible de soulever une particule (et même deux) en la comprimant au préalable. Ces essais ne permettent pas de mesures quantitatives de l'adhésion, mais mettent toutefois en évidence l'existence d'une force d'adhésion de l'ordre du poids d'une particule (qu'il est possible d'estimer aux alentours de 10^{-7} N pour une sphère de rayon $65 \mu\text{m}$ en cuivre).

Dans le cas présent, la déformation des particules en contact reste faible et ne semble pas suffisante pour permettre le développement d'une adhésion quantifiable. Il serait dès lors intéressant de chercher à atteindre des états de contrainte plus élevés. Ceci pourrait se faire en étudiant des particules de dimension inférieure, constituées d'un matériau plus ductile, ou en utilisant un capteur de force permettant d'atteindre des efforts supérieurs. Cependant, même avec ces améliorations, un problème similaire à celui rencontré lors de l'essai présenté [section 3.5](#) pourrait survenir. En effet, les particules en contact n'étant pas confinées, la contrainte appliquée sera également limitée (à $\sigma \approx 3\sigma_y$), limitant ainsi le développement de l'adhésion.

