



**HAL**  
open science

# Modélisation du comportement des poudres métalliques à l'échelle du grain

Barthelemy Harthong

► **To cite this version:**

Barthelemy Harthong. Modélisation du comportement des poudres métalliques à l'échelle du grain. Mécanique [physics.med-ph]. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2010. Français. NNT: . tel-00545807

**HAL Id: tel-00545807**

**<https://theses.hal.science/tel-00545807>**

Submitted on 13 Dec 2010

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

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

**UNIVERSITÉ DE GRENOBLE**  
**INSTITUT POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE**

*N° attribué par la bibliothèque*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|

**THÈSE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE**  
**délivré par l'Institut Polytechnique de Grenoble**

*Spécialité : « Matériaux, Mécanique, Génie civil, Electrochimie »*

préparée au laboratoire **SOLS, SOLIDES, STRUCTURES, RISQUES**  
dans le cadre de l'**École Doctorale**

*« Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Energétique, Procédés, Production »*

préparée et soutenue publiquement par

**BARTHÉLÉMY HARTHONG**

le 21 Octobre 2010

**MODÉLISATION DU COMPORTEMENT DES**  
**POUDRES MÉTALLIQUES À L'ÉCHELLE DU GRAIN**

Directeur de thèse : PIERRE DORÉMUS

Co-directeur : DIDIER IMBAULT

**JURY**

|                         |                      |
|-------------------------|----------------------|
| M. Frédéric Dufour,     | Président            |
| M. Thierry Barrière,    | Rapporteur           |
| M. Jean-Claude Boyer,   | Rapporteur           |
| M. Christophe Martin,   | Examineur            |
| M. Abderrahim Michrafy, | Examineur            |
| M. Gérard Thomas,       | Examineur            |
| M. Pierre Dorémus,      | Directeur de thèse   |
| M. Didier Imbault,      | Codirecteur de thèse |



*“Les Anciens (...) firent beaucoup de cas de la Méchanique dans l’interprétation de la nature, & les modernes ont enfin, depuis quelques tems, rejetté les formes substantielles & les qualités occultes pour rappeler les Phénomènes naturels à des loix mathématiques.”*

*Isaac Newton, 1686.*



# Résumé

Le comportement mécanique des matériaux granulaires, et en particulier des poudres métalliques ductiles, peut être appréhendé par l'intermédiaire de simulations discrètes dans lesquelles les grains sont modélisés. Cette méthode a l'avantage de permettre l'exploration de chemins de chargement inaccessibles à une approche expérimentale. La méthode développée dans cette thèse consiste à modéliser des assemblages de sphères maillées dans le logiciel d'éléments finis ABAQUS pour effectuer des simulations en appliquant divers chemins de chargement.

La première partie de ce travail consiste à utiliser cette méthode pour enrichir la méthode des éléments discrets en l'étendant au domaine de la compression à haute densité relative. La méthode de simulations discrètes par éléments finis donne des informations précieuses sur les déformations non-linéaires des grains aux contacts. Ces informations permettent de proposer un modèle de contact qui gère les interactions complexes entre les différents contacts à haute densité relative. Par la suite, ce modèle est introduit dans le code d'éléments discrets YADE, et les résultats des deux méthodes peuvent être comparés.

Dans la seconde partie de cette thèse, un échantillon numérique est soumis à des sollicitations dans toutes les directions de l'espace des contraintes, pour obtenir les surfaces de charge macroscopiques. L'accent est mis sur l'évolution des surfaces de charge lors de chargements complexes, avec des changements de direction, afin d'obtenir des indications sur la mémoire du matériau. Enfin, l'observation de la microstructure de l'échantillon permet de comprendre les phénomènes micromécaniques qui sont à l'origine de l'évolution macroscopique des surfaces de charge.

**Mots-clés :** Méthode des éléments finis, Méthode des éléments discrets, Loi de contact, Matériaux granulaires, Surfaces de charge



# Abstract

The mechanical behaviour of granular materials, and, in particular, of metal powders, can be studied through discrete simulations, in which the material is modeled as an assembly of discrete particles. The method developed in this thesis consists in the modelling of a powder sample in the finite-element code ABAQUS, as an assembly of spherical meshed particles. The mechanical response of the sample to various loading paths is then simulated.

The first part of the present work uses this method to extend the discrete-element method to the modelling of high relative density compaction. The finite-element-based discrete simulations method gives useful information about the non-linear behaviour of the grains at contacts. This information allows the formulation of a contact model which describes the complex interactions between different contacts at high relative densities. This model is then implemented in the discrete-element code YADE, so that the results of both methods can be compared.

In the last part of this thesis, a numerical sample is submitted to loading paths in every direction of the stress space, to probe macroscopic yield surfaces. The focus is put on the evolution of yield surfaces with complex loading histories including changes in the loading direction, in order to obtain valuable indications on the materials' memory. Moreover, the micromechanical phenomena which cause the macroscopic evolution of yield surfaces can be understood through the observation of the microstructure.

**Keywords :** Finite-element method, Discrete-element method, Contact law, Granular materials, Yield surfaces



# Remerciements, 1.

La thèse que vous avez entre les mains est le résultat de trois années (trois années et demie, en comptant mon stage de Master) de travail, alternant tentatives et erreurs, échecs et réussites, périodes creuses et périodes productives.

A l'heure actuelle, il m'est absolument impossible de savoir quelle sera, plus tard, mon opinion à propos de cette thèse ; si je la considérerai comme un travail de débutant ou comme une référence valable.

J'ai essayé, simplement, de faire de mon mieux dans le temps imparti. Je voudrais donc profiter de la traditionnelle page de remerciements pour remercier ceux qui m'ont aidé.

Je remercie donc Pierre Dorémus pour les connaissances et les méthodes qu'il m'a transmises, ainsi que pour les choix qu'il m'a suggérés pendant la thèse (ses conseils s'étant révélés indiscutablement plus judicieux que mes propres idées).

Je remercie Didier Imbault pour l'aide qu'il m'a apporté, qui m'a été très utile à certains moments.

Je remercie Thierry Barrière et Jean-Claude Boyer pour avoir rapporté cette thèse, et pour leur suggestions. Un merci particulier à M. Boyer qui m'a permis de corriger une erreur importante dans le manuscrit. Merci également à Frédéric Dufour qui a présidé mon jury de thèse, ainsi qu'à Christophe Martin, Gérard Thomas et Abderrahim Michrafy, pour avoir accepté d'être examinateurs. Merci à tous pour vos suggestions, vos critiques constructives, et pour la discussion que nous avons pu avoir.

Merci au Dr. Jerônimo Zanette, qui m'a permis, je pense, de doubler la quantité de résultats de cette thèse.

Merci à Jean-François Jérier qui fut mon principal collaborateur, et qui, je l'espère, le sera encore. Merci également à Vincent Richefeu et Bruno Chareyre pour leur aide, leur temps et leur expertise.

Merci à Yuan Chen pour m'avoir transmis son savoir-faire, et pour m'avoir aidé et guidé tout au début.

Merci à Frédéric Donzé, pour son aide et sa disponibilité, et aussi pour les perspectives qu'il m'offre.

Je remercie encore les informaticiens qui s'occupent des moyens de calcul du laboratoire.

Je me permets de ne pas remercier la hotline d'ABAQUS, car si elle m'a permis d'avancer un peu (lentement!) et de comprendre un certain nombre de choses, elle ne m'a pas permis, au final, de faire converger mes calculs.

## Remerciements, 2.

Si cette thèse est le résultat de trois ans de travaux, elle est aussi le résultat de trois ans de fréquentation des obscurs locaux du laboratoire 3S-R. Et dans ces obscurs locaux vivent ensemble des ombres, au rythme de l'avancée de leurs travaux respectifs. Je voudrais les remercier pour leur soutien ; je n'avais jamais connu autant de gens sympathiques en même temps (peut-être que je vous ressemble trop ? Aïe!).

Dans le désordre, merci à :

- Thomas, Sylvain, Alex, encore Zanoche, les membres d'Hydroquest, et les légistes, Johnny, Laurianne, pour m'avoir si souvent supporté au RU ;
- Nico, pour le ravitaillement en carburant ;
- Benoît, pour son humour discutable et ses photos de kangourou ;
- Cyril, pour les plus belles randos que j'aie jamais faites, ce qui n'est pas peu dire (et les plus beaux TP aussi) ;
- Guilherme, pour sa science des proverbes ;
- Mumu, pour m'avoir aidé à ranger le bureau de Yannick ;
- Yannick, pour sa conversation sans pareille ;
- Olivier, pour m'avoir initié au (vrai) travail ;
- Mamadou, pour tout ce qu'il m'a raconté de l'Afrique ;
- Jean-Sébastien, Jérôme, les stagiaires, pour les meilleurs barbecues de mon passage au labo ;

- Luc, pour son dévouement que je ne saurai jamais reproduire ;
- Ye, le plus bruyant des Chinois ;
- Lucie, pour m’avoir supporté ;
- Ludo, pour tout ce que nous n’avons pas pu faire ensemble ;
- Aude, pour son cactus ;
- Florent, pour m’avoir légué un exemplaire de sa thèse ;
- Pierre, pour m’avoir fait visiter son pays ;
- Hà, la plus bruyante des Vietnamiennes ;
- Vincent, parce qu’il est Franc-Comtois ;
- Jérôme, le futur Japonais, parce qu’il est sympathique.

Je voudrais encore faire deux remarques. Premièrement, cette liste n’est pas exhaustive. Je remercie aussi tous ceux que j’ai oubliés, et je leur demande de bien vouloir m’en excuser. Deuxièmement, je voudrais remercier encore ceux qui m’ont supporté (dans tous les sens du terme) sans avoir rien à voir avec le laboratoire : les amis, la famille.

Et merci enfin à Line pour avoir été la première à me faire comprendre qu’un et un ne font pas forcément deux.

# Table des matières

|   |             |
|---|-------------|
| <b>Résumé.</b>  | <b>iii</b>  |
| <b>Abstract.</b>  | <b>v</b>    |
| <b>Remerciements, 1.</b>  | <b>vii</b>  |
| <b>Remerciements, 2.</b>  | <b>x</b>    |
| <b>Table des matières.</b>  | <b>xii</b>  |
| <b>Principales notations et abréviations.</b>   | <b>xvii</b> |
| <b>Introduction générale.</b>   | <b>1</b>    |
| <b>1 Généralités.</b>   | <b>5</b>    |
| 1.1 Généralités sur la compression des poudres. . . . .   | 6           |
| 1.2 Élastoplasticité en milieu continu. . . . .   | 8           |
| 1.2.1 Définitions des tenseurs de contrainte et de déformation. . . . .                               | 8           |
| 1.2.2 Exemple de loi de comportement élastoplastique écrouissable. . . . .                            | 9           |
| 1.2.3 Quelques résultats expérimentaux sur les poudres métalliques. . . . .                           | 17          |
| 1.2.4 Quelques éléments de la modélisation des surfaces de charge de type Drucker-Prager Cap. . . . . | 23          |
| 1.2.5 Limites de l'approche expérimentale. . . . .  | 25          |
| 1.3 Modélisation discrète. . . . .  | 26          |
| 1.3.1 Modélisation du contact élastoplastique. . . . .  | 28          |
| 1.3.2 La méthode des éléments discrets (DEM). . . . .   | 30          |
| 1.3.3 La méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM). . . . .                                 | 32          |
| 1.3.4 Validation expérimentale de la méthode des éléments finis multi-particules. . . . .             | 34          |
| 1.3.5 Vers un modèle continu. . . . .   | 36          |
| 1.4 Synthèse. . . . .   | 39          |
| <b>2 Loi de contact pour les hautes densités.</b>   | <b>41</b>   |
| 2.1 Introduction et démarche. . . . .   | 42          |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 2.2      | Formulation de la loi haute-densité. . . . .  | 44        |
| 2.2.1    | Éléments de modélisation pour la simulation par la méthode des éléments finis. . . . .              | 44        |
| 2.2.2    | Analyse des phénomènes en haute densité. . . . .  | 47        |
| 2.2.3    | Principe de la formulation de la loi haute-densité. . . . .   | 48        |
| 2.2.4    | Définition de la densité relative locale. . . . .   | 49        |
| 2.2.5    | Paramètres de la loi haute-densité. . . . .   | 50        |
| 2.2.6    | Décomposition de la raideur de contact. . . . .   | 51        |
| 2.2.7    | Forme finale de la loi haute-densité. . . . .   | 53        |
| 2.3      | Validation locale de la loi haute-densité. . . . .  | 56        |
| 2.3.1    | Résultats sur un arrangement cubique simple et comparaison avec les résultats de Storåkers. . . . . | 56        |
| 2.3.2    | Détection du contact à haute densité relative : exemple d'une cellule cubique centrée. . . . .      | 60        |
| 2.3.3    | Force de contact dans une configuration aléatoire. . . . .  | 63        |
| 2.3.4    | Conclusion sur la validation locale de la loi haute-densité. . . . .                                | 68        |
| 2.4      | Validation à l'échelle macroscopique. . . . .   | 69        |
| 2.4.1    | Implémentation de la loi haute-densité dans YADE. . . . .   | 69        |
| 2.4.2    | Simulations par éléments discrets. . . . .  | 71        |
| 2.4.3    | Quelques éléments pour aller plus loin. . . . .   | 75        |
| 2.5      | Conclusion. . . . .   | 81        |
| <b>3</b> | <b>Étude de l'évolution des surfaces de charge.</b>   | <b>83</b> |
| 3.1      | Introduction . . . . .  | 84        |
| 3.2      | Méthode. . . . .  | 85        |
| 3.2.1    | Rappel des principes de la méthode et tracé des surfaces de charge. . . . .                         | 85        |
| 3.2.2    | Choix de l'échantillon. . . . .   | 88        |
| 3.2.3    | Critère de plasticité. . . . .  | 92        |
| 3.3      | Surfaces de charge. . . . .   | 95        |
| 3.3.1    | Compression monotone en matrice ou isotrope. . . . .  | 95        |
| 3.3.2    | Modification d'une surface de charge par changement de direction du chemin de chargement. . . . .   | 98        |
| 3.3.3    | Synthèse des résultats. . . . .   | 103       |
| 3.4      | Analyse micromécanique. . . . .   | 105       |
| 3.4.1    | Remarque préliminaire sur les liens entre anisotropie et surface de charge. . . . .                 | 105       |
| 3.4.2    | Chemin de chargement, anisotropie de structure et anisotropie des surfaces de charge. . . . .       | 108       |
| 3.4.3    | Écrouissage cinématique rotatif : rotation des surfaces de charge. . . . .                          | 112       |
| 3.4.4    | Vers une modélisation. . . . .  | 117       |
| 3.5      | Conclusion. . . . .   | 119       |

*TABLE DES MATIÈRES*

xv

**Conclusion générale.**

**120**

**Bibliographie.**

**122**



# Principales notations et abréviations

Cette liste concerne uniquement les notations qui sont utilisées de manière récurrente. Elle n'est pas exhaustive ; les notations utilisées ponctuellement étant définies en même temps, il n'est pas nécessaire de les reproduire ici.

|                                     |  |
|-------------------------------------|--|
| $\varepsilon$                       | Tenseur de déformation logarithmique de Hencky.  |
| $\varepsilon_{ij}$                  | Composante $(i, j)$ du tenseur de déformation de Hencky.   |
| $\varepsilon_i$                     | Déformation principale du tenseur de déformation de Hencky, relative à la direction $i$ ( $i = 1, 2, 3$ ).   |
| $D$                                 | Tenseur des vitesses de déformation, cf. Chapitre 1, §1.2.2.   |
| $D_{ij}$                            | Composante $(i, j)$ du tenseur des vitesses de déformation.  |
| $\sigma$                            | Tenseur de contraintes de Cauchy.  |
| $\sigma_{ij}$                       | Composante $(i, j)$ du tenseur de contraintes de Cauchy.   |
| $\sigma_i$                          | Contrainte principale du tenseur de contraintes de Cauchy, relative à la direction $i$ ( $i = 1, 2, 3$ ).  |
| $\sigma_{eq}$                       | Contrainte équivalente de Von Mises.<br>cf. Chapitre 1, équation (1.4).  |
| $\sigma_0$                          | Limite élastique initiale.<br>cf. Chapitre 1, équation (1.30).   |
| $\sigma_Y$                          | Limite élastique courante.<br>cf. Chapitre 1, §1.2.2 et, en particulier, équation (1.6).   |
| $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$ | Contraintes principales dans le repère axisymétrique $(r, \theta, z)$ . En général, on aura dans cette thèse $\sigma_r = \sigma_\theta = \sigma_1 = \sigma_2$ et $\sigma_z = \sigma_3$ . |
| $P$                                 | Pression moyenne.<br>cf. Chapitre 1, équations (1.31) et (1.33).   |
| $Q$                                 | Contrainte déviatoire (algébrique).<br>cf. Chapitre 1, équations (1.32) et (1.34).   |

|               |   |
|---------------|---|
| $K$           | Paramètre matériau relatif à l'écroutissage.<br>cf. Chapitre 1, §1.2.2.   |
| $n$           | Paramètre matériau relatif à l'écroutissage.<br>cf. Chapitre 1, §1.2.2.   |
| $E$           | Module d'élasticité.  |
| $\nu$         | Coefficient de Poisson.   |
| $f$           | Coefficient de frottement.  |
| $R$           | Rayon d'une sphère.   |
| $R_i$         | Rayon d'une sphère identifiée par l'indice $i$ .  |
| $R_{ij}$      | Rayon équivalent entre deux sphères de rayons $R_i$ et $R_j$ en contact.<br>cf. Chapitre 1, équation (1.37).  |
| $F$           | Force de contact, sans indice (car généralement mesurée entre une sphère et un plan de contact dans les simulations par éléments finis dans des arrangements périodiques).  |
| $h$           | Déplacement relatif équivalent au rapprochement des centres de deux sphères, sans indice (idem, dans ce cas $h$ est deux fois le déplacement relatif entre le plan de contact et le centre de la sphère).                                       |
| $F_{ij}$      | Force de contact entre les sphères $i$ et $j$ .   |
| $h_{ij}$      | Déplacement relatif entre les sphères $i$ et $j$ .  |
| $\rho$        | Densité relative locale d'une sphère.<br>cf. Chapitre 2, équation (2.2).  |
| $\rho_i$      | Densité relative locale de la sphère $i$ .  |
| $\rho_{ij}$   | Densité relative locale moyenne, définie pour le contact entre deux sphères $i$ et $j$ .<br>cf. Chapitre 2, équation (2.3).   |
| $D$           | Densité relative globale d'un empilement aléatoire ou d'un massif de poudre (pour les empilements périodiques $D = \rho$ ). $D$ diffère de $\mathbf{D}$ (en gras), qui désigne le tenseur des vitesses de déformation (cf. Chapitre 1, §1.2.2). |
| $S_{ij}^{pl}$ | Raideur de la loi haute-densité (correspondant à la phase plastique).<br>cf. Chapitre 2, équation (2.9).  |

- $S_1$  Partie de  $S_{ij}^{pl}$  relative à l'indentation plastique et fonction uniquement de  $h_{ij}/R$ .  
cf. Chapitre 2, équation (2.8).
- $S_2$  Partie de  $S_{ij}^{pl}$  relative à l'incompressibilité plastique du matériau constitutif des sphères, et fonction uniquement de  $\rho_{ij}$ .  
cf. Chapitre 2, équation (2.8).
- DEM** Discrete Element Method.  
Méthode des éléments discrets, présentée au Chapitre 1, §1.3.2.
- MPFEM** Multi-Particles Finite Element Method.  
Méthode des éléments finis multi-particules : Application de la méthode des éléments finis impliquant plusieurs particules maillées en contact (ici les grains de poudre). Cette méthode est décrite au Chapitre 1, §1.3.3.



# Introduction générale

Cette thèse porte sur la modélisation des milieux granulaires à travers une approche discrète, c'est-à-dire qu'elle se base sur des modélisations qui font intervenir des assemblages de particules qui interagissent par contact. Les approches discrètes cherchent à retrouver, en partant du comportement d'un grain, le comportement mécanique d'un matériau constitué d'un grand nombre de grains.

Cette approche s'oppose à l'approche dite continue, plus ancienne, qui consiste à considérer les matériaux granulaires comme des matériaux continus, de manière à établir directement des modèles de comportement dans le cadre de la mécanique des milieux continus, à partir d'observations expérimentales sur des échantillons de matériaux qui comportent eux-mêmes un grand nombre de grains.

L'approche discrète s'est imposée à cause de la complexité des matériaux granulaires et des difficultés techniques qui en résultent pour leur caractérisation expérimentale. La modélisation de tous les processus qui relient le comportement d'un grain au comportement d'un matériau granulaire implique la compréhension de tous les phénomènes qui interviennent ; et cette compréhension, soigneusement confrontée à l'expérience, est la clef de la modélisation des milieux granulaires.

Les modèles continus, néanmoins, sont encore loin d'être désuets ; à l'heure actuelle, ils sont couramment utilisés dans des codes d'éléments finis pour des applications industrielles. La modélisation discrète s'impose de plus en plus pour les problèmes d'écoulements granulaires, mais lorsqu'il s'agit de matériaux solides déformables, elle nécessite encore un temps de calcul et un développement importants.

C'est pourquoi jusqu'à aujourd'hui, l'approche discrète est plus envisagée comme un moyen d'obtenir des informations pour la formulation d'un modèle continu ; en quelque sorte, une alternative à l'expérimental.

Les matériaux granulaires étudiés dans cette thèse sont les poudres métalliques ductiles, qui se retrouvent dans un procédé industriel courant, qui permet de réduire le coût de fabrication de certaines pièces produites en grande série. Le principe du procédé est de

comprimer la poudre dans une matrice, qui donne à la pièce sa forme définitive ou quasi définitive, permettant ainsi une économie importante au niveau des phases d'usinage.

Ce procédé de mise en forme s'applique essentiellement aux poudres ductiles (fer, cuivre...) et aux poudres dures (carbures de tungstène, céramiques...). Nous nous restreindrons ici aux poudres ductiles, pour lesquelles le comportement du grain est celui d'un métal élastoplastique qui subit de grandes amplitudes de déformation. De plus, pour la compression à froid (cf. chapitre 1), ce comportement peut être considéré comme indépendant de la vitesse de déformation.

Ce contexte de la métallurgie des poudres oriente les recherches effectuées pour cette thèse. Naturellement, il implique que les grains sont modélisés par une loi de comportement appropriée pour les métaux ductiles. Il suppose de plus une restriction des chemins de chargement (peu de chargements cycliques, faible vitesse de chargement...), afin d'orienter la démarche de modélisation du matériau directement vers un modèle applicable aux poudres métalliques ductiles dans le cadre de ce procédé de mise en forme, tout en restant le plus simple possible.

Plus précisément, la démarche de cette thèse est orientée, d'une manière générale, vers la prédiction de la réponse mécanique des poudres à des sollicitations fortement déviatoires, qui peuvent se rencontrer très localement pendant la mise en forme. Malgré leur caractère fortement localisé, ces singularités s'avèrent importantes car ce sont elles qui sont à l'origine de problèmes de fissuration, et donc de défauts qui, à l'heure actuelle, mènent à l'élimination pure et simple des pièces sur lesquelles ils sont constatés.

Néanmoins, cette thèse est écrite de manière à se détacher le plus possible de ce contexte, afin qu'elle soit, autant que possible, accessible à des lecteurs issus d'autres domaines que celui de la métallurgie des poudres. Le contexte n'est donc abordé que de manière minimale, pour comprendre plus en détails les quelques éléments énoncés ci-dessus. Ainsi comprise, cette thèse est une étude non exhaustive du comportement des matériaux granulaires aux échelles locale et macroscopique.

Cette thèse fait suite à celle de Yuan Chen (Chen *et al.*, 2008), qui introduit une méthode de simulation numérique discrète avec des grains maillés, étudiés au travers de simulations avec la méthode des éléments finis. Les travaux de Yuan Chen ont montré, sur la base de résultats expérimentaux, la robustesse de cette méthode.

Dans cette thèse, cette dernière méthode de simulation discrète est appliquée :

- d'une part, à l'enrichissement d'une autre méthode de simulation discrète, plus ancienne et plus classique : la méthode des éléments discrets, basée sur des grains non maillés ;

- d'autre part, à l'étude directe du comportement macroscopique des milieux granulaires.

Ainsi le Chapitre 1 décrit le contexte et le positionnement de l'étude. Après une description succincte du contexte industriel de la métallurgie des poudres (ce sujet est déjà abordé avec force détails dans les thèses de Yuan Chen (Chen *et al.*, 2008) et de Jean-François Jérier (Jérier, 2010)), quelques notions de base de l'élastoplasticité seront rappelées. En particulier, l'accent est mis sur la plasticité de Von Mises, ainsi que les notions de surface de charge et d'écroûissage, qui sont à la base des développements du Chapitre 3. La notion de loi d'écoulement est également introduite pour situer le présent travail dans la démarche complète de formulation d'une loi de comportement élastoplastique. À partir de là, quelques résultats expérimentaux classiques concernant la caractérisation du comportement mécanique des poudres ductiles sont donnés, ainsi que des éléments d'un modèle de comportement utilisé en simulation numérique dans l'industrie des poudres, le Drucker-Prager Cap. Enfin, les deux méthodes de simulations discrètes utilisées sont présentées, en rappelant notamment les principaux résultats expérimentaux de Yuan Chen.

Le Chapitre 2 présente la formulation d'un modèle de contact pour la méthode des éléments discrets. Ce modèle de contact est inspiré de résultats de simulations par éléments finis sur des grains maillés. Il a pour but de permettre à la méthode des éléments discrets de simuler la compression des poudres ductiles jusqu'à très haute densité relative, en prenant en compte à la fois la diminution des porosités entre les grains au cours de la compression, et les interactions complexes entre grains voisins lorsque les zones de contact deviennent très proches. Les phénomènes en question sont analysés sur la base de configurations simplifiées, puis les détails de la formulation du modèle sont explicités. Le modèle est ensuite validé par des comparaisons avec les résultats des simulations par éléments finis, pour diverses configurations, des arrangements périodiques aux empilement aléatoires ; de la force de contact locale entre les grains aux contraintes macroscopiques sur des empilements aléatoires.

Le Chapitre 3 s'intéresse à la caractérisation des surfaces de charge des poudres métalliques à partir de simulations par éléments finis sur un échantillon comprenant un certain nombre de grains. Plus précisément, il cherche à caractériser l'évolution des surfaces de charge avec le chemin de chargement. Après la description de la méthode de caractérisation et des résultats sur plusieurs exemples de chemin de chargement, le Chapitre 3 explore les causes microscopiques des mécanismes observés sur les surfaces de charge. Il se basera pour cela sur l'observation de la microstructure de l'échantillon, en profitant de la richesse des informations fournies par les simulations par éléments finis.



# Chapitre 1

## Généralités sur la modélisation des poudres industrielles.

### Sommaire

|            |  |           |
|------------|--|-----------|
| <b>1.1</b> | <b>Généralités sur la compression des poudres.</b>   | <b>6</b>  |
| <b>1.2</b> | <b>Élastoplasticité en milieu continu.</b>   | <b>8</b>  |
| 1.2.1      | Définitions des tenseurs de contrainte et de déformation.                                  | 8         |
| 1.2.2      | Exemple de loi de comportement élastoplastique écrouissable.                               | 9         |
| 1.2.3      | Quelques résultats expérimentaux sur les poudres métalliques.                              | 17        |
| 1.2.4      | Quelques éléments de la modélisation des surfaces de charge de type Drucker-Prager<br>Cap. | 23        |
| 1.2.5      | Limites de l'approche expérimentale.   | 25        |
| <b>1.3</b> | <b>Modélisation discrète.</b>  | <b>26</b> |
| 1.3.1      | Modélisation du contact élastoplastique.   | 28        |
| 1.3.2      | La méthode des éléments discrets (DEM).  | 30        |
| 1.3.3      | La méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM).                                    | 32        |
| 1.3.4      | Validation expérimentale de la méthode des éléments finis multi-particules.                | 34        |
| 1.3.5      | Vers un modèle continu.  | 36        |
| <b>1.4</b> | <b>Synthèse.</b>   | <b>39</b> |

## 1.1 Généralités sur la compression des poudres.

Il existe plusieurs procédés pour la mise en forme des poudres métalliques. Nous ne nous intéresserons ici qu'à l'un d'entre eux, qui fait intervenir la compression à froid. Les étapes de base de la mise en forme sont alors le mélange des poudres, afin d'obtenir l'alliage souhaité ; la compression à froid, dans une matrice qui donne à la pièce sa forme finale ou presque ; puis le frittage, où la pièce est chauffée à une température inférieure à la température de fusion des constituants de la poudre. La pièce comprimée à froid présente une certaine cohésion, mais demeure fragile, et sa résistance est comparable à celle d'un morceau de sucre. A l'issue du frittage, les grains sont soudés entre eux et la pièce possède sa résistance mécanique finale. Dans certains cas, la pièce nécessite encore des reprises d'usinage, mais le gros intérêt du procédé réside dans l'économie des coûts d'usinage, qui permet de réduire considérablement le coût de production, lorsque les séries sont suffisamment grandes pour amortir le prix de la matrice.

Chacune de ces étapes fait l'objet d'efforts de recherche importants, de manière à maîtriser au mieux les dimensions et le comportement final des pièces ainsi obtenues, ainsi que l'ensemble du procédé de fabrication (dimensions des outils...). Le travail de cette thèse concerne uniquement la modélisation de la compression à froid.

Les poudres métalliques sont constituées, comme leur nom l'indique, de grains métalliques ; or la plupart des métaux ont la propriété d'être ductiles, c'est-à-dire qu'ils peuvent subir des déformations plastiques importantes avant rupture. Le comportement des poudres est donc le résultat des mêmes mécanismes que l'on retrouve dans tous les milieux granulaires, notamment le réarrangement et le frottement, mais également de la déformation plastique des grains, qui joue un rôle prépondérant dans la densification<sup>1</sup>. Un autre phénomène très important est la cohésion entre les grains. Cette cohésion peut avoir plusieurs origines, notamment l'accroche mécanique entre des grains aux formes complexes, la présence dans les poudres de lubrifiants ou liants qui peuvent agir comme une colle, ou encore des forces microscopiques, comme on peut l'observer entre deux boules d'argile ou deux gouttes d'eau.

La densification des poudres industrielles est usuellement caractérisée par la *densité relative*, qui est le rapport de la masse volumique courante de la poudre, constituée de grains et de pores, et de la masse volumique d'un corps dense constitué du même matériau que les grains. La densité relative est donc un nombre inférieur à 1, qui caractérise la compacité (ou, indirectement, la porosité) du milieu. Il est compris entre une valeur

---

1. La métallurgie des poudres concerne de très nombreuses nuances de poudres. Par exemple, des poudres métalliques (ductiles) et céramiques (dures) sont couramment utilisées. Suivant la composition des poudres étudiées, la déformation plastique prend plus ou moins d'importance. Si elle est le mécanisme prépondérant, par exemple, dans les poudres de fer, elle a moins d'importance pour les matériaux durs (qui sont couramment mis en forme par la métallurgie des poudres), comme les carbures de tungstène ou les céramiques.

initiale qui correspond à la poudre lâche, et la valeur de 1 qui correspond à un état complètement dense, sans porosité.

Ainsi la densification des poudres métalliques peut être grossièrement décrite par les étapes suivantes (Fischmeister et Artz, 1983) :

- Réarrangement : à faible densité relative, les grains ont tendance, plus qu'à se déformer, à se déplacer les uns par rapport aux autres, pour former un arrangement plus compact. Cette étape est fortement influencée par le frottement et par la morphologie des particules : plus le frottement est faible, plus le réarrangement est facile. De même, plus les particules ont des formes complexes, plus le réarrangement est difficile. Ces mécanismes expliquent les efforts de recherche des industriels dans l'élaboration des poudres, en particulier l'adjonction de lubrifiants pour faciliter le réarrangement et diminuer les efforts de compression tout en obtenant une répartition de densité relative plus homogène.
- Déformation plastique : les grains subissent ensuite des déformations plastiques importantes, qui referment progressivement les pores autour des grains. Suivant le chargement appliqué, ces déformations peuvent s'accompagner de contraintes de cisaillement plus ou moins fortes au niveau des surfaces de contact entre grains, de telle sorte que le frottement (et donc la lubrification) ou la cohésion peuvent jouer un rôle important. En particulier, la cohésion joue ici un rôle essentiel, car elle peut être à l'origine de phénomènes de fissuration aussi gênants que difficiles à prédire.
- Enfin, on peut considérer un troisième état : lorsque la densité relative devient très proche de 1, la poudre tend vers un état asymptotique où son comportement en compression tend vers celui du matériau dense (généralement considéré comme plastiquement incompressible pour les métaux). Son comportement en traction et en cisaillement, par contre, demeure celui d'un matériau granulaire, et dépend très fortement de la cohésion entre les grains.

La compression est l'étape du procédé de fabrication dans laquelle la structure et la géométrie interne du matériau se forment. Les propriétés mécaniques finales du compact résultent, directement ou indirectement, de cette microstructure. La compréhension et la modélisation de ces phénomènes est donc un enjeu important, qui permettrait non seulement la maîtrise et l'optimisation du procédé, mais aussi la fabrication de matériaux avancés, par le contrôle de la porosité, de la composition et de la répartition de la composition.

## 1.2 Élastoplasticité en milieu continu.

La première étape pour la modélisation des poudres métalliques est d'homogénéiser la poudre pour élaborer un modèle de type milieu continu. Dans cette thèse, le seul mécanisme de déformation qui sera pris en compte est l'élastoplasticité. Par conséquent, les paragraphes suivants vont préciser les quelques notions utilisées par la suite ainsi que les notations et grandeurs utilisées.

Nous proposons, plutôt qu'une longue introduction générale à l'élastoplasticité, d'introduire les concepts utiles à travers l'exemple détaillé du modèle de Von Mises élastoplastique écrouissable, qui est généralement approprié à la modélisation du comportement des métaux denses. Cette approche permet trois choses :

- d'expliquer ce modèle qui sera utilisé par la suite pour décrire le comportement mécanique du matériau constitutif des grains de poudre ;
- de restreindre notre propos aux quelques concepts de l'élastoplasticité qui seront effectivement utilisés dans cette thèse ;
- de situer les apports des chapitres suivants dans la démarche de formulation d'une loi de comportement élastoplastique à partir d'un exemple simple.

Enfin, quelques résultats expérimentaux de la littérature sur les poudres ainsi que les grandes lignes du modèle Drucker-Prager Cap (Drucker et Prager, 1952; Drucker *et al.*, 1957) classiquement utilisé dans l'industrie des poudres seront exposés.

### 1.2.1 Définitions des tenseurs de contrainte et de déformation.

L'amplitude des déformations impliquées dans notre problème, que ce soit pour la déformation de la poudre en tant que milieu continu ou pour la déformation des grains eux-mêmes, impose d'utiliser un tenseur de déformation non-linéaire. Le tenseur de déformation considéré ici est le tenseur de déformation logarithmique de Hencky gauche, noté  $\varepsilon$ . Il est défini de la manière suivante.

Soit  $F$  la matrice de la transformation linéaire tangente :

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j^0} \quad (1.1)$$

où  $x_j^0$  sont les coordonnées d'un point dans la configuration de référence, et  $x_i$  les coordonnées du même point dans la configuration déformée.

On peut démontrer que la transformation  $F$  est le produit d'une rotation et d'une déformation pure (*décomposition polaire*) :

$$F = R.U = V.R \quad (1.2)$$

$U$  est la déformation pure dite « à droite »,  $V$  la déformation pure « à gauche »,  $R$  la rotation.

Enfin le tenseur de Hencky gauche<sup>2</sup>  $\varepsilon$  est défini par :

$$\varepsilon = \ln V \quad (1.3)$$

Le tenseur des contraintes  $\sigma$  est le tenseur des contraintes de Cauchy.

### 1.2.2 Exemple de loi de comportement élastoplastique écrouissable.

La présentation, à titre d'exemple, du modèle élastoplastique de Von Mises écrouissable nous permet d'explicitier une loi de comportement complète, afin de mieux cerner la démarche de modélisation dans laquelle s'inscrit cette thèse. Par ailleurs ce modèle sera appliqué par la suite comme une des bases du travail de cette thèse, d'où l'intérêt de le décrire ici. Le développement s'attache donc à décrire le modèle tel qu'il sera utilisé, c'est-à-dire tel qu'il est implémenté dans le logiciel ABAQUS (ABAQUS, 2009a, §4.2.1 et §4.3.2).

Le modèle de Von Mises est basé sur les notions de surface de charge et de loi d'écoulement.

#### Surface de charge.

La surface de charge définit la frontière entre élasticité et plasticité. Elle se définit dans l'espace des contraintes principales, ce qui suppose que c'est l'état de contrainte seul qui détermine l'entrée en plasticité. Soit  $f$  la *fonction de charge*, qui caractérise cette surface, on rappelle que, pour un état de contraintes caractérisé par un point courant  $M(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ <sup>3</sup> :

- Si  $f(M) < 0$  (le point  $M$  est à l'intérieur de la surface) : on est dans le domaine élastique ;

---

2. Le tenseur de Hencky droit est défini par  $\ln U$ . En général, on utilise plutôt le tenseur gauche car il a l'avantage d'être objectif. Le même choix est fait ici, même s'il n'a pas une importance vitale.

3.  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  étant les contraintes principales

- Si  $f(M) = 0$  (le point  $M$  est sur la surface) : il y a déformation plastique ;
- Enfin  $f(M) > 0$  n'est pas possible. Si un point  $M$ , situé sur la surface, se déplace vers l'extérieur, il s'ensuit une modification de la surface de charge (écrouissage).

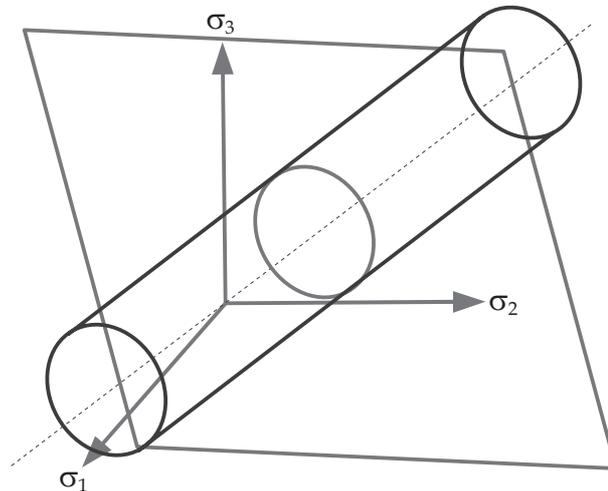


FIGURE 1.1 – Surface de charge de Von Mises.

La surface de charge de Von Mises est un cylindre dont l'axe est la droite hydrostatique (Figure 1.1). Cette géométrie impose que toute sollicitation le long de la droite hydrostatique correspond à une déformation élastique<sup>4</sup>, et qu'ainsi, seul l'écart de l'état de contraintes à la droite hydrostatique provoque la plastification. La distance entre le point  $M$  et la droite est caractérisée par la *contrainte équivalente de Von Mises*<sup>5</sup> :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \text{tr}(s^2)} \quad (1.4)$$

où  $s$  est le déviateur des contraintes :

$$s = \sigma - \frac{1}{3} \text{tr}(\sigma) \mathbf{I} \quad (1.5)$$

( $\mathbf{I}$  étant le tenseur identité).

La fonction  $f$  peut donc s'écrire :

$$f(\sigma) = \sigma_{eq} - \sigma_Y \quad (1.6)$$

4. L'impossibilité de plastifier le matériau avec une sollicitation hydrostatique s'avère assez bien vérifiée expérimentalement pour les métaux denses.

5. L'écart entre le point  $M$  et la droite est  $\sqrt{\text{tr}(s^2)}$ . Le facteur  $\sqrt{3/2}$  permet de comparer directement cette grandeur à la contrainte axiale en essai de traction-compression.

$\sigma_Y$  étant une grandeur propre au matériau, qui correspond, avec la définition (1.4), à la limite élastique en essai uniaxial.

La notion de surface de charge permet de définir un critère de plasticité. Ce critère dépend alors de l'état de contrainte. La détermination des déformations se fait ensuite par le biais de la *loi d'écoulement*.

### Loi d'écoulement.

Les déformations sont décomposées en déformation élastique et plastique. En grandes déformations, on suppose en général qu'un élément de matériau déformé peut être isolé et déchargé jusqu'à un état fictif libre de contraintes. La transformation pour obtenir cet état à partir de l'état déformé est notée  $(F^{el})^{-1}$ , de sorte que la transformation  $F$  est décomposée comme suit (ABAQUS, 2009a; Lubliner, 2006, par exemple) :

$$F = F^{el} F^{pl} \quad (1.7)$$

Le modèle implémenté dans ABAQUS simplifie cette relation à partir de l'hypothèse que les déformations élastiques sont petites<sup>6</sup>, pour obtenir une décomposition additive des vitesses de déformations :

$$D = D^{el} + D^{pl} \quad (1.8)$$

où  $D$  est le tenseur des vitesses de déformation, défini par :

$$D = \text{sym} [\dot{F}F^{-1}], \quad (1.9)$$

et de manière similaire :

$$D^{el} = \text{sym} [\dot{F}^{el} (F^{el})^{-1}], \quad (1.10)$$

et

$$D^{pl} = R^{el} \text{sym} [\dot{F}^{pl} (F^{pl})^{-1}] {}^t R^{el}, \quad (1.11)$$

$R^{el}$  étant la rotation issue de la décomposition polaire à gauche de  $F^{el}$  (cf. ABAQUS (2009a), §1.4.4 pour plus de détails).

Le tenseur des vitesses de déformations élastiques  $D^{el}$  est relié à  $\dot{\sigma}$  par la loi de Hooke (Landau et Lifchitz, 1967), avec le module d'Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ .

<sup>6</sup> cf. ABAQUS (2009a), §1.4.4. Les détails ne sont pas reproduits ici car cela imposerait un développement d'équations relativement lourd, et surtout, qui n'apporte rien à la suite de cette thèse.

Le tenseur des vitesses de déformations plastiques  $D^{pl}$  se détermine par la *loi de normalité* (ou *loi d'écoulement*). Cette loi de normalité exprime que la vitesse de déformation plastique est normale à la surface de charge. Elle peut être justifiée par le *principe du travail maximal* (Hill, 1950), qui se base sur les mécanismes de la plasticité dans les monocristaux, et qui s'avère bien vérifié pour les métaux denses (Rappaz *et al.*, 1998, pour plus de détails). La loi d'écoulement s'écrit ainsi :

$$D_{ij}^{pl} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \quad (1.12)$$

$\lambda$  étant à déterminer.

La relation (1.12) est souvent généralisée en remplaçant  $f$  par une autre fonction  $g$  appelée *potentiel*. Ainsi le vecteur incrément de déformation plastique n'est pas nécessairement normal à la surface de charge, en revanche il est normal à une autre surface qui représente le potentiel. La loi d'écoulement est dite associée au critère de plasticité lorsque  $f = g$ , et non associée dans le cas contraire. Cette formulation permet d'appliquer la relation (1.12) à d'autres types de matériau plus complexes. En particulier, cette démarche est fréquente dans le cas des matériaux granulaires, pour lesquels, a priori, le principe du travail maximal ne s'applique pas, et pour lesquels, toujours a priori, il n'y a aucune raison physique que la loi soit associée. En revanche, la difficulté expérimentale de la caractérisation du potentiel, liée notamment au fait qu'il n'est pas possible expérimentalement de séparer la déformation plastique de la déformation totale, justifie souvent l'utilisation des lois associées<sup>7</sup> dans la pratique.

En introduisant (1.6) dans (1.12), puis d'après (1.4), on obtient :

$$D_{ij}^{pl} = \lambda \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \sigma_{ij}} = \lambda \frac{3}{2} \frac{1}{\sigma_{eq}} s_{kl} \frac{\partial s_{kl}}{\partial \sigma_{ij}} \quad (1.13)$$

Or

$$\frac{\partial s_{kl}}{\partial \sigma_{ij}} = \delta_{ki} \delta_{jl} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (1.14)$$

$\delta_{ij}$  étant le symbole de Kronecker, et  $\text{tr } s = 0$  d'où :

$$D_{ij}^{pl} = \frac{3}{2} \frac{\lambda}{\sigma_{eq}} s_{ij} \quad (1.15)$$

---

7. On remarquera que la relation (1.12), que  $f$  soit la fonction de charge ou le potentiel, suppose que la vitesse de déformation plastique ne dépend pas de  $\dot{\sigma}$ . Autrement dit, pour un point situé sur la surface de charge, l'incrément de déformation plastique ne dépend ni de la direction, ni de l'amplitude de l'incrément de contrainte. D'autres théories de la plasticité, que nous n'évoquerons pas ici, prennent en compte la dépendance de  $\dot{\epsilon}^{pl}$  à  $\dot{\sigma}$ .

Ce résultat suppose que  $\sigma_Y$  est indépendant de l'état de contrainte, de sorte que  $\partial\sigma_Y/\partial\sigma_{ij} = 0$ . L'évolution de  $\sigma_Y$  est l'objet du paragraphe suivant.

La relation (1.15) assure que  $\text{tr}(\mathbf{D}^{pl}) = 0$ , ce qui signifie que la déformation plastique se fait à volume constant. Cette observation est en accord avec le principe qui relie la plasticité dans les métaux au mouvement des dislocations. Dans le cadre de cette thèse, cet aspect se révélera important car il implique l'incompressibilité plastique des matériaux de type Von Mises.

S'il y a déformation plastique nécessairement  $\sigma_{eq} = \sigma_Y$ . On peut donc écrire :

$$\sigma_Y^2 = \frac{3}{2}s_{ij}s_{ij} = \frac{3}{2}\left(\frac{2\sigma_Y}{3\lambda}\right)^2 D_{ij}^{pl}D_{ij}^{pl} \quad (1.16)$$

D'où la condition :

$$\lambda = \sqrt{\frac{2}{3}D_{ij}^{pl}D_{ij}^{pl}} \quad (1.17)$$

Cette quantité est la *vitesse de déformation plastique équivalente* et sera notée  $D_{eq}^{pl}$ .

Ainsi pour finir :

$$D_{ij}^{pl} = \frac{3}{2}\frac{D_{eq}^{pl}}{\sigma_Y}s_{ij} \quad (1.18)$$

Il reste donc à déterminer  $D_{eq}^{pl}$  ; la modélisation de l'érouissage va le permettre.

### Érouissage.

L'érouissage est une transformation de la surface de charge sous l'effet de la déformation plastique. Il est pris en compte par une dépendance de la fonction  $f$  à un ou plusieurs paramètres qui définissent « l'histoire » du chargement, et constituent la « mémoire » du matériau.

On distingue deux modèles généraux de l'érouissage (Figure 1.2). L'érouissage isotrope est une homothétie de la surface, l'érouissage cinématique est un déplacement de la surface dans l'espace des contraintes. Suivant les matériaux, on se rapproche plus de l'un ou de l'autre des modèles ; le plus souvent, le comportement est entre les deux. Quoiqu'il en soit, la détermination expérimentale de l'évolution des surfaces de charge est longue, complexe et chère ; et les modèles isotrope et cinématique décrivent chacun un type de mécanisme avec une interprétation géométrique assez simple.

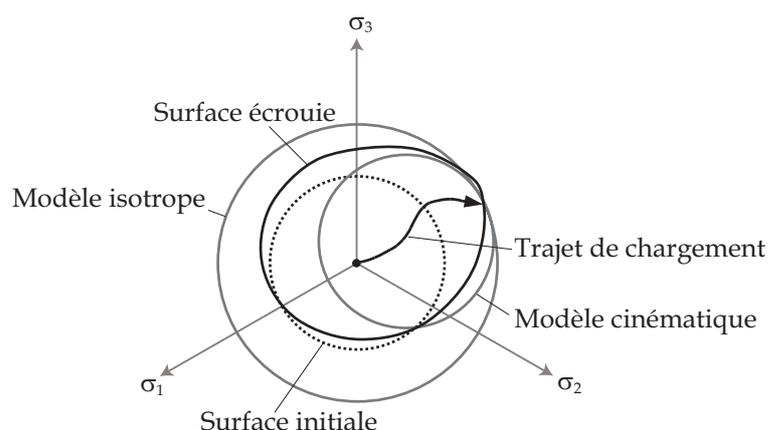


FIGURE 1.2 – Modification par écrouissage de la surface de charge dans le plan déviatoire.

Nous allons ici développer notre exemple en introduisant un écrouissage isotrope. Avec cette condition, la surface de charge de Von Mises reste un cylindre centré sur l'axe hydrostatique, mais son rayon augmente.

Dans ce modèle le seul paramètre d'histoire est la déformation plastique équivalente :

$$\varepsilon_{eq}^{pl} = \int_0^t D_{eq}^{pl} dt \quad (1.19)$$

Et  $\sigma_Y$  est simplement exprimé comme une fonction de  $\varepsilon_{eq}^{pl}$ . Par exemple :

$$\sigma_Y = K(\varepsilon_{eq}^{pl})^n \quad (1.20)$$

$K$  et  $n$  étant des paramètres matériau à déterminer expérimentalement.

On note que dans le cas particulier de la plasticité parfaite,  $\sigma_Y$  est une constante et il n'est alors plus possible de déterminer  $\varepsilon_{eq}^{pl}$  de manière unique.

La caractérisation expérimentale de l'écrouissage de ce modèle se fait naturellement sur un essai uniaxial. En effet, si  $\sigma$  et  $D$  sont, respectivement, la contrainte et la vitesse de déformation uniaxiales, la contrainte équivalente de Von Mises est  $\sigma_{eq} = |\sigma|$ , et  $D$  est la somme d'une vitesse de déformation élastique et d'une vitesse de déformation plastique :

$$D = D^{el} + D^{pl} \quad (1.21)$$

Les équations présentées plus haut mènent alors à :

$$D^{pl} = D_{eq}^{pl} \frac{\sigma}{|\sigma|} \quad (1.22)$$

et  $D^{el}$  se détermine par la loi élastique ( $D^{el} = \dot{\sigma}/E$  dans le cas de la loi de Hooke, en considérant les déformations élastiques petites). Les autres composantes du tenseur de déformation s'obtiennent de manière similaire.

En pratique, en supposant les déformations élastiques petites, la déformation plastique équivalente devient égale en norme à la déformation uniaxiale. De plus, lorsqu'il y a déformation plastique,  $\sigma_{eq} = \sigma_Y$ , et par conséquent la courbe d'écrouissage permet de calibrer la fonction d'écrouissage (1.20).

Par commodité, la fonction d'écrouissage utilisée est légèrement différente de (1.20). La vitesse de déformation  $D$  se décompose en une vitesse de déformation purement volumique  $D_v$  et une vitesse de déformation à volume constant  $D_d$  :

$$D = D_v + D_d \quad (1.23)$$

Ainsi  $D_v$  est purement élastique<sup>8</sup>, et  $D_d$  se décompose de la manière suivante :

$$D_d = D^{pl} + D_d^{el} \quad (1.24)$$

$D_d^{el}$  étant une vitesse de déformation élastique à volume constant.

La loi de Hooke donne les expressions classiques des deux tenseurs élastiques :

$$D_v = \frac{1 - 2\nu}{3E} \text{tr}(\dot{\sigma})I \quad (1.25)$$

$$D_d^{el} = \frac{2(1 + \nu)}{E} \dot{s} \quad (1.26)$$

On peut alors définir une vitesse de déformation équivalente de Von Mises par :

$$D_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \text{tr}(D_d^2)} \quad (1.27)$$

ainsi qu'une déformation équivalente :

$$\varepsilon_{eq} = \int_0^t D_{eq} dt \quad (1.28)$$

---

8. On rappelle que  $\text{tr}(D^{pl}) = 0$ ; la déformation plastique se fait à volume constant. Une déformation purement volumique est donc nécessairement purement élastique.

La loi d'érouissage utilisée ici est alors la suivante :

$$\sigma_Y = K(\varepsilon_{eq})^n \quad (1.29)$$

Ce choix permet de définir implicitement un domaine élastique initial en supprimant la condition  $\sigma_Y(\varepsilon^{pl} = 0) = 0$ . Cela est notamment utile pour l'implémentation du modèle dans un code d'éléments finis.

La limite élastique initiale  $\sigma_0$  est alors donnée par la condition suivante :

$$\sigma_0 = K\varepsilon_0^n = E\varepsilon_0 \quad (1.30)$$

où  $\varepsilon_0$  est la déformation équivalente atteinte lorsque la contrainte équivalente atteint la limite élastique initiale.

Cet exemple nous a permis d'introduire les notions que nous allons développer sur le comportement élastoplastique des poudres métalliques. D'une part, ce modèle de Von Mises, bien établi et approprié à la modélisation des métaux denses, est pertinent pour la modélisation du matériau des grains ; et d'autre part, les notions développées ici sont généralisables à la description macroscopique du comportement des poudres sur les bases de la mécanique des milieux continus.

En particulier, les notions de surfaces de charge, de loi d'écoulement et d'érouissage sont généralement retenues en première approche de la modélisation continue des poudres. On cherche alors dans un premier temps à caractériser la forme des surfaces de charge, puis l'érouissage, c'est-à-dire l'évolution des surfaces de charge en fonction du chemin de chargement. En particulier, les poudres sont compressibles, c'est-à-dire que la déformation plastique peut s'accompagner d'une diminution de volume (cette diminution de volume étant très importante, de l'ordre d'un facteur 2, dans le cadre de la compression à froid) ; les surfaces de charges associées au comportement des poudres ne pourront donc pas être invariantes par translation suivant l'axe  $P$ . Enfin, on recherche également à caractériser le potentiel<sup>9</sup>, qui permet de formuler la loi d'écoulement (associée ou non associée). Le prochain paragraphe porte sur la caractérisation expérimentale des surfaces de charge ; la détermination du potentiel ne sera pas développée car l'étude du potentiel n'est pas effectuée dans cette thèse.

---

9. Cette notion de potentiel, comme indiqué plus haut, est une généralisation de la loi d'écoulement issue des théories sur la plasticité dans les monocristaux. Elle suppose en particulier que la direction de l'incrément de déformation plastique ne dépend pas de la direction de l'incrément de contrainte, puisqu'elle ne dépend que du potentiel. Cette hypothèse est bien pratique, car elle permet l'écriture de la loi d'écoulement, et il est très délicat de la contredire par l'expérience, en raison des difficultés techniques.

### 1.2.3 Quelques résultats expérimentaux sur les poudres métalliques.

Le principe de la détermination expérimentale des surfaces de charge est relativement simple. Un échantillon de matériau dans un état donné (écroui ou pas) est soumis à des chemins de chargement qui balayent tout l'espace des contraintes. Une série de chargements/déchargements d'amplitudes croissantes selon chaque chemin permet de déterminer le point d'entrée en plasticité à partir d'un seuil de déformation résiduelle après déchargement (généralement 0,1-0,2%). L'ensemble de ces points dans l'espace des contraintes forme la surface de charge.

La difficulté consiste à mettre en place des dispositifs expérimentaux qui permettent d'appliquer aux échantillons un grand nombre de chemins de chargement. Pour les matériaux denses, on utilise par exemple des essais de traction-torsion ou de traction biaxiale. La très faible résistance et le comportement de type fragile des matériaux granulaires pour tous les chargements autres que compressifs rend ce type d'essai inapplicable dans le cas des matériaux en poudre compactés à froid. Ces derniers sont donc étudiés par l'intermédiaire de machines triaxiales, qui sont des dispositifs particulièrement chers et difficiles à mettre en œuvre.

Les machines triaxiales de révolution permettent de réaliser des chargements axisymétriques et donc de réaliser plusieurs chargements, tous compris dans un plan de l'espace des contraintes principales (plan qui correspond aux chargements axisymétriques, d'équation, par exemple,  $\sigma_1 = \sigma_2$ ). Un échantillon de poudre est placé dans un tube flexible en caoutchouc et introduit dans une cellule qui contient un fluide. Une presse assure ainsi la pression axiale et le fluide exerce en même temps une pression hydrostatique (Figure 1.3).

Le plan de l'espace des contraintes qui correspond au chargement axisymétrique est en général étudié en définissant les deux axes suivants :

- La pression moyenne  $P$ <sup>10</sup> :

$$P = \frac{1}{3} \text{tr}(\sigma) \quad (1.31)$$

- La contrainte déviatoire, ou contrainte de Von Mises  $\sigma_{eq}$ , décrite par l'équation (1.4),

---

10. Usuellement on utilise plutôt  $P = -1/3 \text{tr}(\sigma)$ . Le signe n'est qu'une question de convention. Ici on utilisera la convention de mécanique des sols où une contrainte est positive en compression, et la définition (1.31), afin de manipuler essentiellement des grandeurs positives.

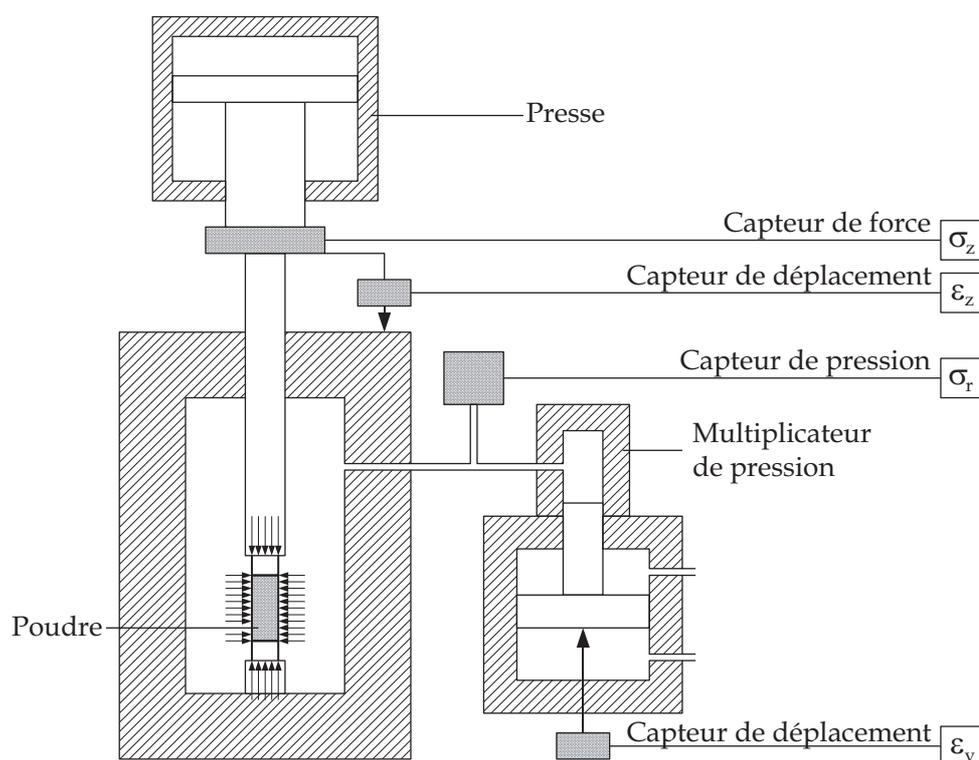


FIGURE 1.3 – Schéma de la machine triaxiale de révolution utilisée par Pavier (1998).

et généralement notée plutôt  $Q$  dans ce contexte :

$$Q = \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \text{tr}(s^2)} \quad (1.32)$$

$P$  décrit donc une contrainte hydrostatique et  $Q$  une contrainte purement déviatoire. Dans le cas d'un état de contrainte axisymétrique défini par les contraintes principales  $\sigma_z$  et  $\sigma_r$ , ces deux contraintes prennent les valeurs suivantes :

$$P = \frac{1}{3}\sigma_z + \frac{2}{3}\sigma_r \quad (1.33)$$

$$Q = |\sigma_z - \sigma_r| \quad (1.34)$$

Fréquemment on enlève la valeur absolue dans (1.34), ce qui permet de décrire partiellement une surface qui n'est pas symétrique par rapport à l'axe  $P$ .

Le domaine élastique de la poudre lâche est quasi inexistant. La caractérisation du

comportement mécanique nécessite donc de réaliser d'abord un chargement initial pour consolider l'échantillon. De plus, le comportement élastoplastique des poudres métalliques est fortement dépendant du chemin de chargement initial. Les chemins retenus classiquement sont la compression hydrostatique et la compression en matrice (Figure 1.4)<sup>11</sup>. La démarche consiste donc à précomprimer l'échantillon suivant le chemin initial choisi, puis à décharger légèrement en s'assurant qu'on reste dans le domaine élastique ainsi créé, et enfin, à recharger dans toutes les directions possibles (Figure 1.5a).

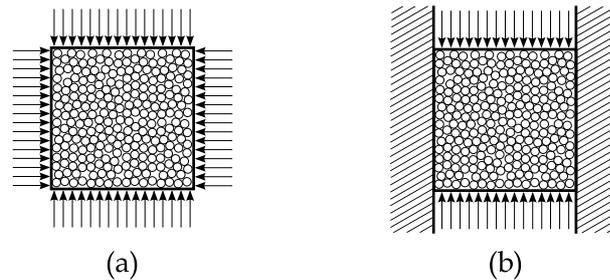


FIGURE 1.4 – Chargements couramment utilisés. (a) Compression hydrostatique. (b) Compression en matrice (ou œdométrique).

Il n'y a pas de critère de plasticité universel pour les poudres<sup>12</sup>. On utilise souvent une déformation axiale ou radiale résiduelle de l'ordre de 0,1% (ou les deux, selon le chargement), c'est le cas de Akisanya *et al.* (1997), Sridhar et Fleck (2000) et Schneider et Cocks (2002). Avec de tels critères, et en raison de la sensibilité du comportement au chargement initial, il est nécessaire de conserver le même échantillon pour obtenir une surface de charge. Il faut donc s'assurer de ne pas (ou plutôt, presque pas) plastifier l'échantillon lors des recharges.

Pour ces raisons techniques, la plasticité des poudres est fréquemment abordée de manière plus simple. La densité relative (ou la déformation volumique) est choisie comme critère de plasticité. Ainsi les surfaces isodensité sont assimilées aux surfaces de charge. Souvent même, la surface de charge est de plus considérée comme indépendante du chemin suivi (elle ne dépend alors que de la densité relative atteinte lors du premier chargement). Avec ces simplifications, on peut, avec chaque échantillon initial, réaliser un chemin de chargement différent, et tracer ensuite les courbes isodensité (Figure 1.5b). Cette démarche a été utilisée par Pavier (1998).

Il est clair que le fait de supposer les surfaces de charge indépendantes du chemin suivi est une hypothèse contraignante. Les résultats expérimentaux montrent clairement

11. La compression en matrice peut être réalisée artificiellement dans une cellule triaxiale en comprimant l'échantillon par petits incréments de pression axiale et radiale, en s'assurant que la déformation axiale reste égale à la déformation volumique. La déformation radiale reste ainsi à peu près nulle. Le chemin de chargement ainsi obtenu correspond à une compression en matrice, mais sans frottement entre la poudre et la matrice (Akisanya *et al.*, 1997; Schneider et Cocks, 2002).

12. au sens de la détection expérimentale de la plasticité.

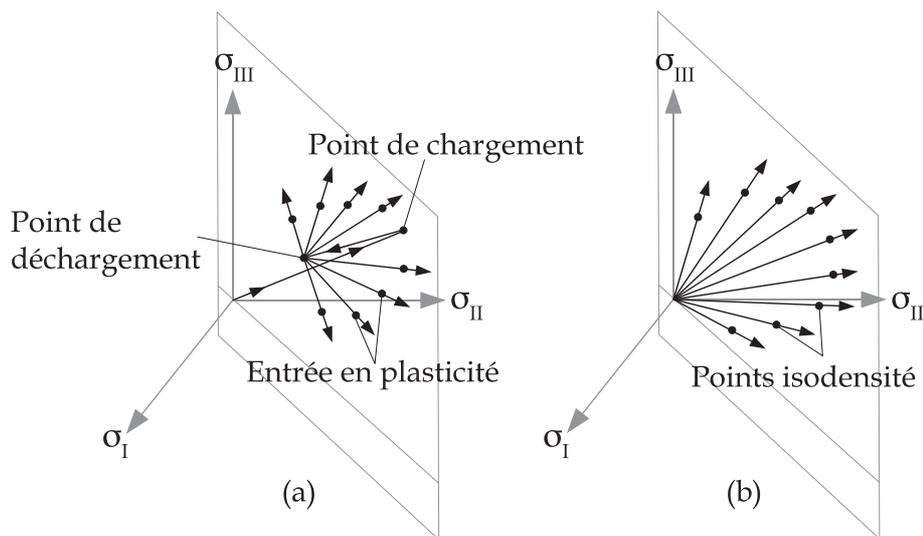


FIGURE 1.5 – Obtention des surfaces de charge. (a) Méthode générale : chargement initial, décharge élastique, recharge dans toutes les directions. (b) Obtention de courbes isodensité.

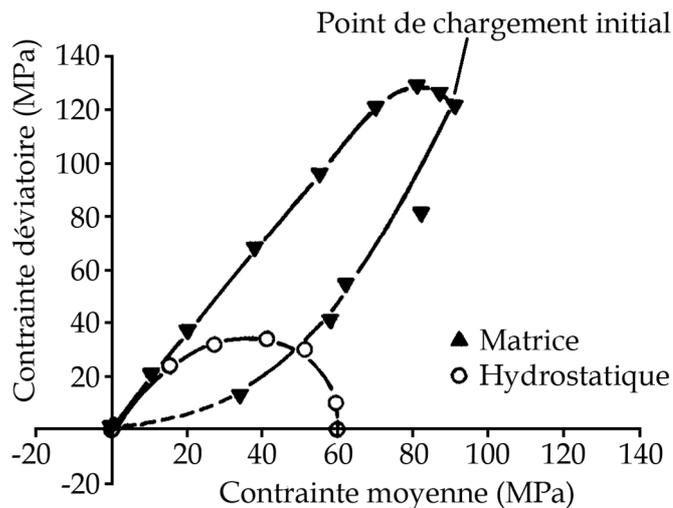


FIGURE 1.6 – Surfaces de charge obtenues par Akisanya *et al.* (1997) pour une compression hydrostatique et une compression en matrice, avec une poudre de cuivre à grains sphériques. La densité relative correspondant aux deux points de chargement est de 0,8.

l'influence du chemin de chargement. Akisanya *et al.* (1997) et Sridhar et Fleck (2000) montrent qu'à densité relative équivalente, le chemin en matrice et le chemin hydrostatique créent des surfaces complètement différentes (Figure 1.6). De plus, il apparaît que pour un même point de chargement, le chemin de chargement influence le comportement du compact, au moins pour les densités moyennes (Pavier, 1998). Cet effet est illustré sur la Figure 1.7, où les familles d'isodensités sont nettement influencées par le trajet de

chargement imposé pour atteindre la même densité relative.

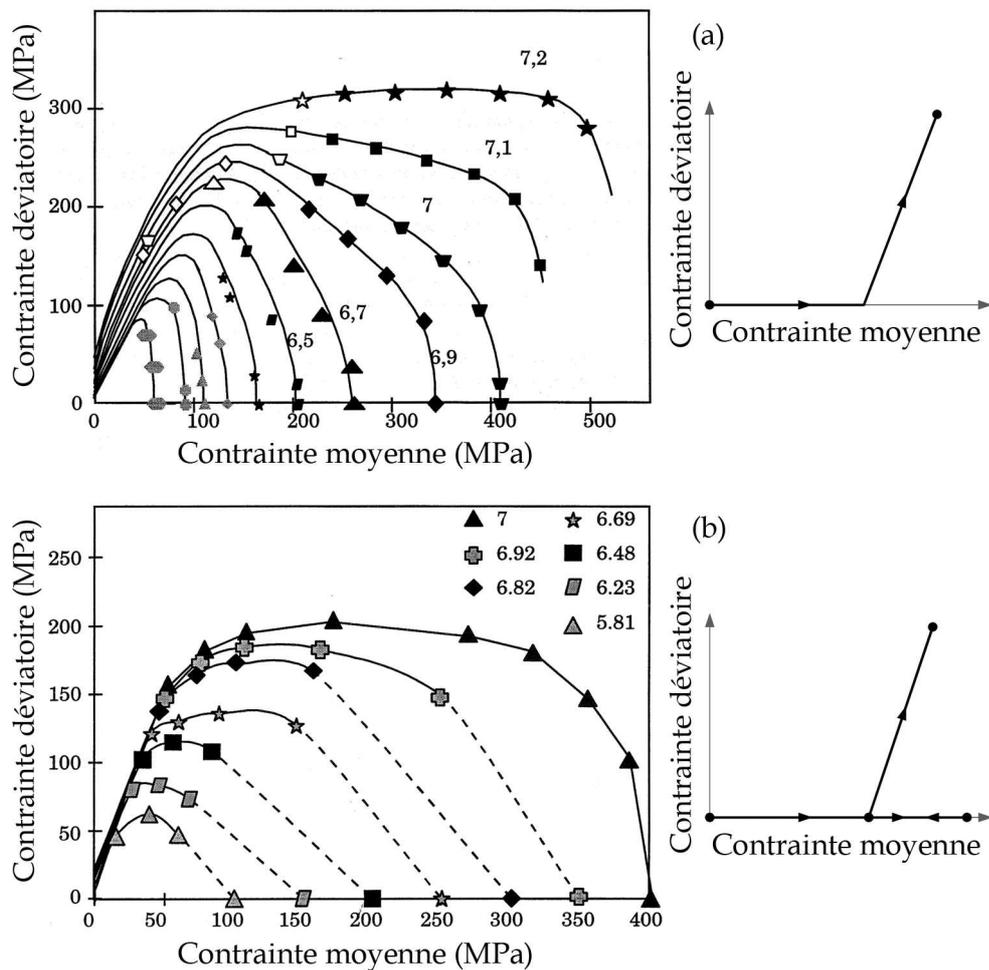


FIGURE 1.7 – Courbes isodensité obtenues sur une poudre de fer par Pavier (1998) suivant deux chargements : (a) essai « normalement consolidé », chargement hydrostatique puis axial à pression constante ; (b) essai « surconsolidé », charge hydrostatique, décharge hydrostatique partielle puis recharge axiale à pression constante. Les différences entre les deux familles d’isodensités illustrent la sensibilité des poudres au chemin de chargement. La densité de 7,2 correspond à une densité relative de 0,98.

Néanmoins, la complexité de l’approche expérimentale rend délicate la recherche des liens entre chemin de chargement et surface de charge. L’un des objectifs principaux de cette thèse est précisément d’apporter des solutions et des éléments nouveaux à ce problème.

Plus récemment, Schneider et Cocks (2002) ont étudié l’influence du type de poudre sur les surfaces de charge. Un exemple de leurs résultats est donné par la figure 1.8. S’il n’est pas surprenant que le matériau constitutif des grains influence les surfaces de charge

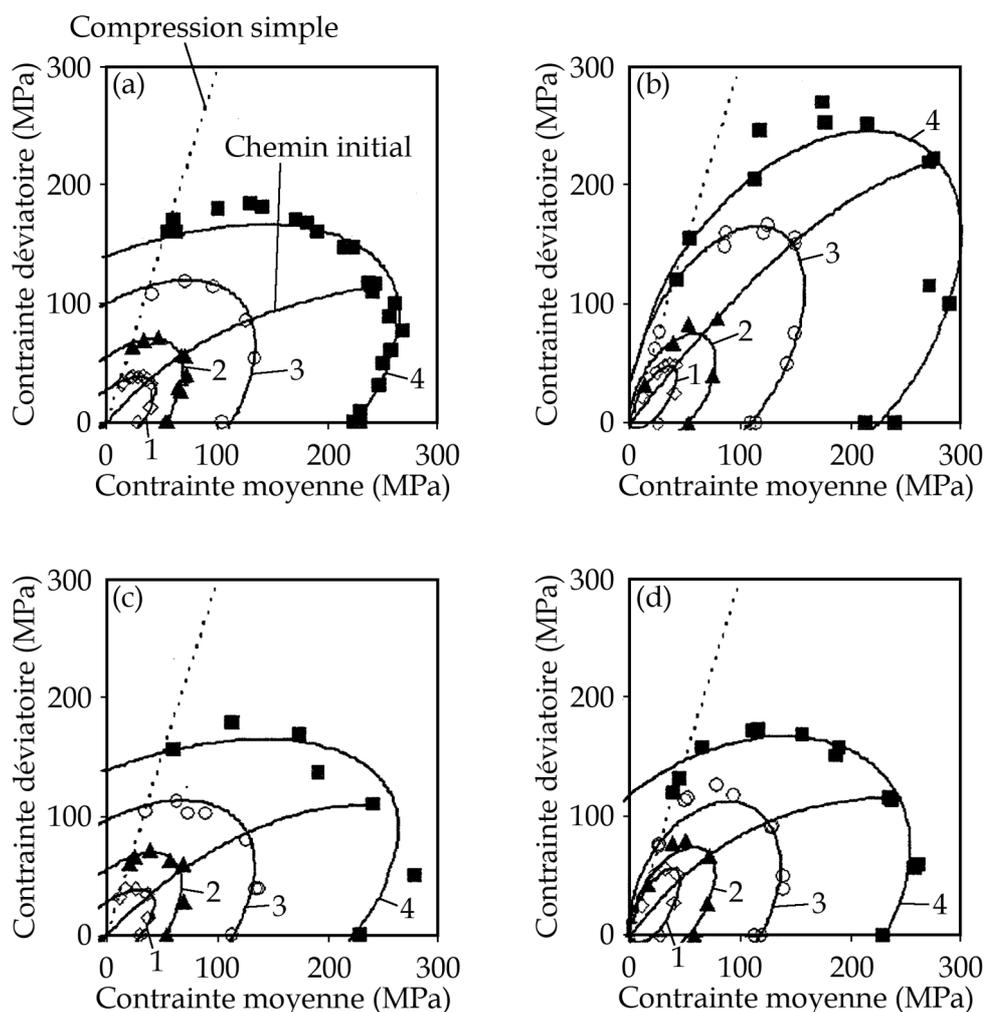


FIGURE 1.8 – Surfaces de charge obtenues par Schneider et Cocks (2002) pour : (a) poudre de fer, grains irréguliers, (b) poudre de fer, grains sphériques, (c) poudre de cuivre, grains irréguliers, (d) poudre de cuivre, grains sphériques. La numérotation de 1 à 4 correspond à une densité croissante. La densité la plus élevée correspond à une densité relative d'environ 0,8, sauf pour (d), 0,9.

(par exemple, leur taille), il semble en particulier que la forme des grains ait une influence importante sur la forme de la surface, même si les différences sont également dues à une différence de composition, notamment dans le cas des poudres de fer (Schneider et Cocks, 2002).

La liste de résultats donnée ici est loin d'être exhaustive, mais elle illustre bien le type de résultats expérimentaux que l'on peut obtenir. Les résultats sont limités par des problèmes techniques qui limitent la pression dans la cellule triaxiale, ou tout simplement par le procédé lui-même, qui limite le nombre de chemins de chargement possibles.

Les quelques résultats expérimentaux présentés ici sont relativement différents les uns des autres. En particulier, Akisanya *et al.* (1997) et Schneider et Cocks (2002) ont utilisé l'approche illustrée par la Figure 1.5a, qui donne une idée plus fidèle de la dépendance des surfaces au chemin de chargement. Néanmoins leurs études sont limitées à des densités relatives assez faibles (de l'ordre de 0,8). La démarche de Pavier (1998) donne moins d'informations mais fournit des données sur le comportement des poudres à très haute densité relative.

En dernière remarque, les vecteurs incréments de déformation plastique peuvent être obtenus avec ce type de méthode (Akisanya *et al.*, 1997; Pavier, 1998) en négligeant les déformations élastiques. Ils permettent alors de tracer les surfaces isopotentielles. Ce point n'est pas détaillé ici car cet aspect n'est pas abordé dans cette thèse, qui se limite à la mise en place d'une méthode de modélisation et à l'étude des surfaces de charge.

#### 1.2.4 Quelques éléments de la modélisation des surfaces de charge de type Drucker-Prager Cap.

Si des modèles bien plus élaborés existent notamment en mécanique des sols, il s'avère que dans l'industrie des poudres, le modèle Drucker-Prager Cap (Drucker et Prager, 1952; Drucker *et al.*, 1957) reste une référence pour la simulation numérique basée sur une approche de matériau continu. Il est disponible dans les codes commerciaux d'éléments finis, en particulier ABAQUS (2009b). De nombreux travaux ont porté sur la simulation directe de la mise en forme de pièces par la méthode des éléments finis intégrant le modèle de Drucker-Prager Cap (PM Modnet Modelling Group, 1999; Jonsén et Häggblad, 2005; Gethin, 1992; Falgon *et al.*, 2005, par exemple)

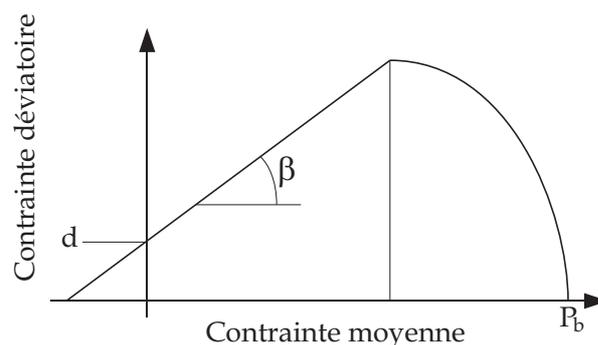


FIGURE 1.9 – Surfaces de charge et de rupture correspondant à la modélisation Drucker-Prager Cap.

Le nom « Drucker-Prager Cap » ne réfère en réalité pas à un modèle de comportement, mais simplement à la forme des surfaces de charge. L'espace des contraintes est divisé

en deux zones : l'une correspond à des chargements dilatants<sup>13</sup> ; dans cette zone est définie une surface de rupture de forme conique. Ce cône est une droite dans le plan  $(P, Q)$ , appelée droite de Drucker-Prager. La deuxième zone correspond aux chargements contractants<sup>14</sup>, et on y définit une surface de charge en forme d'ellipsoïde, le Cap (Figure 1.9).

De nombreuses variantes de ce modèle existent : on définit quelquefois une troisième zone entre les deux précédentes, avec une surface de transition, qui assure une transition douce entre les deux surfaces de rupture et de plasticité (ABAQUS, 2009b) ; la ligne de rupture peut être courbe ou définie en plusieurs tronçons (Chtourou *et al.*, 2002). Azami et Khoei (2006) introduisent une dépendance du troisième invariant. Dans le contexte de cette thèse, nous retenons surtout que l'évolution des surfaces de charge (l'écroutissage) est décrite par une seule variable d'histoire, la déformation volumique plastique :

$$\varepsilon_v^{pl} = \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) \quad (1.35)$$

La déformation volumique plastique  $\varepsilon_v^{pl}$  est directement reliée à la densité relative. Ainsi les surfaces sont indépendantes du chemin suivi, et ne dépendent que de la valeur courante de la densité relative. L'évolution des surfaces est donc décrite par l'évolution des trois paramètres indiqués sur la figure 1.9 en fonction de  $\varepsilon_v^{pl}$ .

Enfin, suivant les variantes, les lois d'écoulement peuvent être associées ou non associées, mais nous ne reviendrons plus sur ce point.

Les surfaces Drucker-Prager Cap ont notamment la propriété d'être symétriques par rapport à l'axe  $P$ . Cette symétrie est compatible avec la formulation d'un modèle isotrope<sup>15</sup>. En se basant sur les résultats expérimentaux du paragraphe 1.2.3, on peut considérer qu'elles peuvent prétendre modéliser le comportement d'une poudre qui a été écroutie selon un chargement hydrostatique, mais sont en contradiction évidente avec les surfaces issues d'une compression en matrice (voir la Figure 1.6 par exemple).

La forme des surfaces de charge associée à la compression en matrice implique que l'amplitude de contraintes nécessaire pour plastifier le matériau est plus grande suivant un chargement à dominante axiale ( $Q > 0$ ,  $\sigma_z > \sigma_r$ , voir Équation (1.34)) que suivant un chargement plutôt radial ( $Q < 0$ ,  $\sigma_r > \sigma_z$ ). En d'autres termes, il est plus « facile » de plastifier avec un chargement radial qu'axial. Cela est ordinairement relié à l'anisotropie de la structure du matériau induite par l'anisotropie du chargement (Fleck, 1995, par exemple).

---

13. qui imposent une augmentation du volume de l'échantillon.

14. qui imposent une diminution du volume de l'échantillon.

15. L'isotropie du matériau n'implique pas la symétrie de la surface de charge autour de l'axe des  $P$ . Elle impose en revanche son invariance lorsque par permutation des trois contraintes principales. Ceci est abordé plus en détails dans la Chapitre 3.

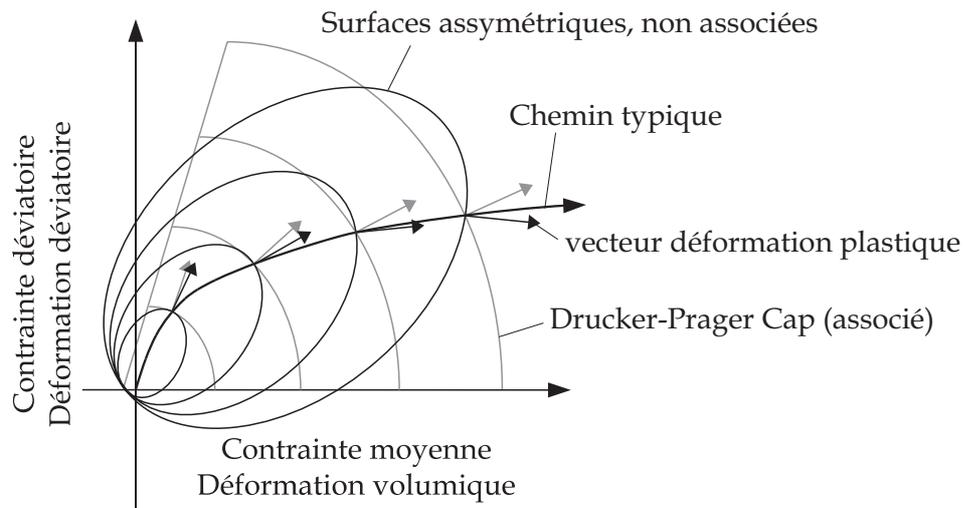


FIGURE 1.10 – L’incapacité des surfaces Drucker-Prager Cap à reproduire l’influence du chemin de chargement peut mener à des erreurs importantes sur les valeurs de contraintes ou de déformations calculées pour des chemins de chargement complexes.

Les surfaces Drucker-Prager Cap ne reproduisent pas l’assymétrie des surfaces de charge par rapport à l’axe  $P$  (Figure 1.10). Cette incapacité à représenter correctement le comportement lié à la compression en matrice est d’autant plus problématique que cette dernière est à la base de presque tous les procédés industriels, en raison de sa simplicité de mise en œuvre. Les chemins de chargement rencontrés dans les pièces industrielles peuvent être de toute sorte, en raison notamment des particularités géométriques, mais ils sont globalement centrés sur le chemin en matrice (Frachon, 2002).

De plus, il n’est pas possible de prendre en compte un effet du chemin de chargement avec une seule variable d’écrouissage. Pour représenter l’anisotropie de la surface en fonction du chemin de chargement, il faut introduire au moins les coordonnées dans l’espace des contraintes du point de chargement, soit trois variables scalaires<sup>16</sup> ; et pour reproduire l’effet du chemin pour un même point de chargement, mis en évidence par Pavier (1998), il faut ajouter encore au moins une variable qui caractérise le chemin.

### 1.2.5 Limites de l’approche expérimentale.

Le modèle Drucker-Prager Cap est particulièrement simple, mais il permet déjà une approche de la densification des poudres, et il est globalement considéré comme satisfaisant, en particulier, pour la prédiction de la répartition de densité dans les pièces industrielles (Frachon, 2002). C’est cette simplicité qui lui donne tout son intérêt. La com-

16. On peut trouver dans Oda et Nakayama (1989) une extension du critère de Drucker-Prager à des matériaux granulaires anisotropes.

plexité des phénomènes qui influencent la densification des milieux granulaires, et leur nombre, rend l'écriture d'un modèle précis très délicate. Le nombre de paramètres qui apparaîtrait imposerait une démarche de calibration expérimentale peu réaliste, et empêcherait ainsi toute application industrielle d'un tel modèle. Il est donc nécessaire, pour obtenir un modèle le plus simple possible, de bien cerner les phénomènes à prendre en compte et ceux qu'il est possible de négliger.

Cette démarche dépend des applications envisagées et des matériaux utilisés. Néanmoins, un problème en particulier s'avère à la fois très gênant et peu maîtrisé, c'est celui de la fissuration qui survient pendant la compression. Actuellement, les industriels mettent en place des systèmes pour repérer les fissures afin d'éliminer les pièces défectueuses (Jonuscheit et Ernst, 2008, par exemple), mais les outils de prédiction font défaut. La fissuration survient lorsque la poudre est localement soumise à un chargement très déviatoire ou en traction<sup>17</sup>. La première étape nécessaire pour résoudre ce problème de modélisation est d'être capable de prédire l'évolution du comportement du matériau pour des chemins de chargement complexes, de manière à quantifier la résistance du matériau à l'endroit et à l'instant où la fissuration risque de se produire. Or, comme il a été vu plus haut, c'est précisément pour ce type de chargement que les données expérimentales font défaut, en raison des difficultés techniques.

Les limites de cette approche continue, basée sur des essais expérimentaux, résident donc dans le peu de chemins accessibles, et dans le coût de mise en œuvre de dispositifs expérimentaux complexes. Ainsi, pour contourner ce problème, les chercheurs se sont attelés à un travail de longue haleine, qui consiste à modéliser le grain de poudre, et les interactions entre grains, jusqu'à être capable, par la compréhension des phénomènes impliqués à l'échelle du grain, de reproduire et d'expliquer les phénomènes macroscopiques observés expérimentalement. Seule cette compréhension peut vraiment permettre d'obtenir des résultats fiables sur des chemins de chargement qui ne peuvent pas être réalisés expérimentalement.

C'est dans cette démarche que s'inscrit cette thèse. Même si elle n'aborde pas la fissuration, le but est de contribuer aux avancées de la modélisation discrète des milieux granulaires, et d'en tirer des éléments du comportement élastoplastique macroscopique des matériaux granulaires ductiles.

### 1.3 Modélisation discrète.

La modélisation discrète présente, par rapport à l'approche expérimentale, l'inconvénient d'accumuler des simplifications, au niveau de la modélisation de chaque phénomène

---

17. Des études détaillées des mécanismes de fissuration existent bien entendu, aussi bien numériques, par exemple, Iwashita et Oda (2000), qu'expérimentales, comme McDonald *et al.* (2009)

micromécanique. En revanche, elle présente également plusieurs avantages. Premièrement, le fait de se placer dans le cadre de théories ou de simulations numériques permet de découpler les phénomènes. Par exemple, il est possible de supprimer le frottement et d'observer de quelle manière celui-ci influe sur le comportement macroscopique d'un ensemble de grains. Deuxièmement, il est possible, dans une certaine mesure, d'observer les phénomènes à l'échelle granulaire lors d'une simulation, et donc d'avoir accès à des informations que la technologie ne permet pas de mesurer (contraintes, déformations locales...). Troisièmement, il est possible d'étudier des chemins de chargements théoriques ou simulés, qui ne sont pas réalisables expérimentalement.

Le principe de la modélisation discrète consiste en tout premier lieu, à modéliser un grain, c'est-à-dire donner au grain une forme et un matériau constitutif, puis à modéliser l'interaction entre les grains. Les premiers modèles micromécaniques sont basés sur l'utilisation de relations empiriques pour définir la surface moyenne des contacts, le nombre moyen de contacts par particule et la force de contact moyenne sur les particules. Le modèle proposé par Fischmeister et Artz (1983) décrit les efforts de compression jusqu'à haute densité. Le modèle développé puis amélioré par Fleck (Fleck *et al.*, 1992; Fleck, 1995) prédit des surfaces de charges associées aux compressions hydrostatique et en matrice, mais il est limité à des densités relatives faibles. Cette limite est due à la modélisation des contraintes aux contacts, qui n'est valide que si les contacts peuvent être considérés comme indépendants; c'est-à-dire que les différents contacts autour d'une même particule sont suffisamment éloignés les uns des autres pour qu'il n'y ait aucune influence d'un contact sur l'autre.

Dans ces modèles, les relations qui modélisent les efforts de contact ont une influence importante sur les résultats macroscopiques. La modélisation du contact entre deux corps solides est donc à la base de la modélisation discrète. Elle sera donc l'objet du paragraphe 1.3.1.

Par la suite, avec les progrès rapides du matériel informatique, la diminution du temps de calcul permet d'inclure directement les grains dans les modèles numériques. Deux méthodes numériques discrètes vont être développées ici, respectivement dans les paragraphes 1.3.2 et 1.3.3; il s'agit de la méthode des éléments discrets (DEM) (Cundall et Strack, 1979; Donzé *et al.*, 2009) et d'une application particulière de la méthode des éléments finis qui a émergé très récemment, et qui n'a pas encore de nom universellement admis. Elle sera désignée ici sous le nom de méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM) (Gethin *et al.*, 2001; Procopio et Zavaliangos, 2005). Cette dernière méthode a fait l'objet d'une validation expérimentale basée sur l'étude de la compression de sphères en plomb (Chen, 2008). Les principaux résultats de cette validation seront présentés dans le paragraphe 1.3.4, puis l'application des méthodes de simulation discrète en vue de l'élaboration d'un modèle continu sera évoquée au paragraphe 1.3.5.

### 1.3.1 Modélisation du contact élastoplastique.

Le problème du contact mécanique remonte au moins à 1882, lorsque Hertz publia la solution du problème du contact entre deux corps élastiques. Sa solution est limitée à un problème purement linéaire, isotrope, en petites déformations et sans frottement, mais elle a depuis été complétée (Johnson, 1985). Dans les poudres, les contacts entre grains sont élastoplastiques et les déformations élastiques sont généralement négligeables devant les déformations en jeu, de sorte que le problème est nettement plus complexe. Le contact élastoplastique a été abordé dans plusieurs théories, qui sont à la base des premiers modèles micromécaniques de la compression des poudres.

Ce problème a été abordé dans un autre contexte que celui de la densification des poudres. Il s'agit de l'interprétation théorique des tests de dureté (Tabor, 1951; Johnson, 1970), et en particulier du test de Brinell. Hill *et al.* (1989) proposent une théorie complète sur l'interprétation du test de Brinell, dans laquelle le matériau est modélisé par un modèle hyperélastique. Les développements qui ont suivi ont notamment abouti aux travaux de Biwa et Storåkers (1995) puis Storåkers *et al.* (1997) qui correspondent respectivement à un matériau rigide-plastique et rigide-viscoplastique. Dans Storåkers *et al.* (1997), le résultat valable pour les tests de dureté (un indenteur rigide en contact avec un demi-espace déformable) est étendu à l'indentation de deux solides déformables en contact. Nous allons présenter ici un résumé rapide des résultats de cette théorie dans le cadre restreint où nous l'appliquerons, c'est à dire dans le cadre de sphères constituées du même matériau, le comportement du matériau étant de plus indépendant de la vitesse de déformation.

Les notations utilisées dans la suite sont les suivantes (Figure 1.11). Pour un contact entre deux sphères  $i$  et  $j$ ,  $R_i$  et  $R_j$  sont les rayons des sphères ;  $F_{ij}$  est la composante normale de la force résultante de contact ;  $h_{ij}$ , le déplacement relatif des sphères<sup>18</sup> ; et  $a_{ij}$  le rayon de la surface de contact.

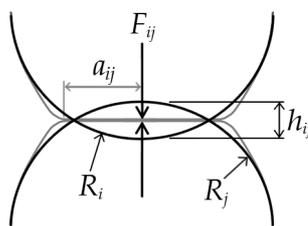


FIGURE 1.11 – Indentation de deux sphères, notations utilisées.

Dans ce cas, les principales hypothèses peuvent être résumées ainsi (Mesarovic et Fleck, 2000) :

18. défini par la variation de la distance entre les deux centres.

- Chaque sphère  $i$  est constituée d'un matériau rigide-plastique de type Von Mises, avec une relation d'érouissage définie par  $\sigma_Y = K(\varepsilon^{pl})^n$  (Équation (1.29) ou (1.20), les deux étant équivalentes puisque la déformation élastique est nulle);
- le rayon de la surface de contact est supposé petit comparé au rayon des sphères, de sorte que chaque sphère peut être considérée comme un demi-espace infini;
- les sphères sont approximées par un parabolôide de révolution, et les résultats reposent sur l'hypothèse des petites déformations.

L'évolution des surfaces de contact est obtenue par une étude purement cinématique. Pour deux sphères, la surface de contact est un cercle de rayon  $a_{ij}$  (Storåkers *et al.*, 1997, 1999) :

$$a_{ij}^2 = 2c^2 R_{ij} h_{ij} \quad (1.36)$$

avec  $R_{ij}$  défini par

$$\frac{1}{R_{ij}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (1.37)$$

Puis le paramètre  $c^2$  est déterminé par une étude par éléments finis :

$$c^2 = 1,43 \exp(-0,97n) \quad (1.38)$$

et la force de contact  $F_{ij}$  est obtenue en adimensionnalisant les quantités en jeu avec un choix approprié des paramètres :

$$\frac{F_{ij}}{\pi a_{ij}^2 K} = 2^n 3 \left( \frac{a_{ij}}{6R_{ij}} \right)^n \quad (1.39)$$

Les équations (1.36) et (1.39) permettent d'obtenir une relation force-déplacement :

$$\frac{F_{ij}}{\pi R_{ij}^2 K} = 2^{1-3n/2} 3^{1-n} c^{2+n} \left( \frac{h_{ij}}{R_{ij}} \right)^{1+n/2} \quad (1.40)$$

Une autre relation utile pour le présent développement est la pression moyenne de contact en fonction du déplacement relatif des particules :

$$\frac{F_{ij}}{\pi a_{ij}^2 K} = 2^{-3n/2} 3^{1-n} c^n \left( \frac{h_{ij}}{R_{ij}} \right)^{n/2} \quad (1.41)$$

Les études de Mesarovic et Fleck (1999) et Mesarovic et Fleck (2000) montrent que cette théorie est valide jusqu'à  $h_{ij}/R_{ij}$  de l'ordre de 0,1. Par comparaison, la théorie de Hertz est valide jusqu'à  $h_{ij}/R_{ij}$  de l'ordre de  $10^{-5}$  (Vu-Quoc *et al.*, 2001).

Cette théorie a rapidement été appliquée à des modèles micromécaniques inspirés de Fleck *et al.* (1992). On peut citer notamment Larsson *et al.* (1996) et Storåkers *et al.* (1999). Ces derniers ont notamment obtenu des surfaces de charge et de dissipation visqueuse dans le cas de poudres composites, composées de sphères de matériaux différents. Les chargements sont alors appliqués de manière homogène à toutes les particules, sous la forme d'un champ de déformation quelconque, mais uniformément réparti.

### 1.3.2 La méthode des éléments discrets (DEM).

La méthode des éléments discrets est basée sur un principe relativement simple. Chaque « élément discret » est une sphère<sup>19</sup>, représentée par son centre et son rayon. Un empilement est alors décrit par une matrice contenant les trois coordonnées spatiales de tous les centres, ainsi que le rayon de chaque élément. Les codes d'éléments discrets possèdent donc des algorithmes de génération d'empilements basés sur divers principes (Jérier, 2010), que nous ne détaillons pas ici.

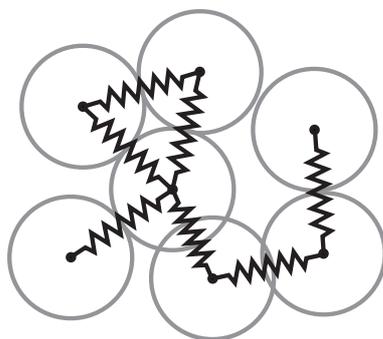


FIGURE 1.12 – Empilement de sphères en éléments discrets.

L'interaction entre les éléments discrets est décrite par plusieurs équations (au moins une équation vectorielle), qui relie le déplacement relatif des sphères à une force de contact, à la condition que les éléments soient en contact. Cette relation, représentée sur la Figure 1.12 par des ressorts, sera dénommée *loi de contact*.

Ainsi le déplacement relatif des sphères crée des forces de contact. Le principe du calcul est d'intégrer pour chaque pas de temps et chaque élément discret, l'équation de

19. Il est possible de prendre en compte des éléments non sphériques, il faut alors décrire la géométrie par un jeu d'équations analytiques, mais dans le cadre de cette thèse on se limitera au cas des éléments sphériques. La géométrie des particules intervient dans la recherche des contacts, et, indirectement, dans le calcul de la force de contact.

Newton, qui permet d'obtenir, à partir des forces et des moments créés par les forces, les déplacements relatifs pour le pas de temps suivant. En plus de la loi de contact, il est possible d'intégrer une loi de résistance à la rotation des éléments. Ce principe est résumé sur la Figure 1.13.

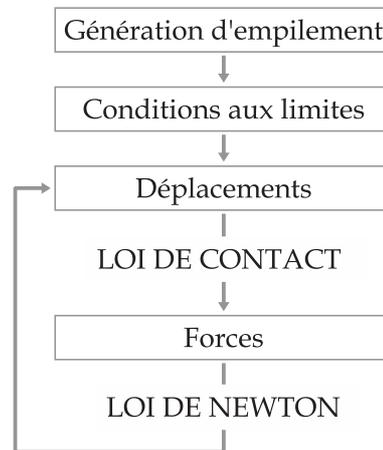


FIGURE 1.13 – Principe général de la méthode des éléments discrets.

Les éléments discrets étant indéformables, la méthode des éléments discrets s'applique d'abord à des problèmes d'écoulement granulaire, dans lesquels la déformation des particules physiques est négligeable (Vu-Quoc et Zhang, 1999; Vu-Quoc *et al.*, 2001; Wu *et al.*, 2003; Bierwisch *et al.*, 2009, par exemple). Néanmoins, les éléments discrets peuvent s'interpénétrer, et cette interpénétration modélise la déformation des particules. L'idée est venue ainsi d'adapter cette méthode à la densification des poudres industrielles. En effet, si la méthode des éléments discrets ne décrit pas plus la déformation des particules que les modèles inspirés de Fleck, elle a l'avantage considérable de prendre en compte naturellement le réarrangement et la réorganisation des grains. L'interpénétration des éléments est contrôlée par la loi de contact, de sorte que celle-ci est le point central de la méthode des éléments discrets.

Naturellement, les premières applications de la méthode des éléments discrets à la densification des poudres se sont basées sur la théorie de Storåkers *et al.* (1997). De telles études ont été menées par Heyliger et McMeeking (2001); Martin et Bouvard (2003); Martin *et al.* (2003); Martin (2004); Skrinjar et Larsson (2004). En particulier, Heyliger et McMeeking (2001) et Martin (2004) comparent les résultats de la méthode des éléments discrets et ceux des théories basées sur des champs de déformation homogènes. De plus, les mêmes auteurs ont obtenu des surfaces de charge avec cette méthode, ainsi que Pizette *et al.* (2010) avec une loi de contact semblable mais légèrement différente.

La méthode des éléments discrets permet naturellement la prise en compte de diverses distributions de taille, et de particules constituées de matériaux différents, pour peu que la loi de contact puisse les prendre en compte. Cette condition est remplie par l'utilisation

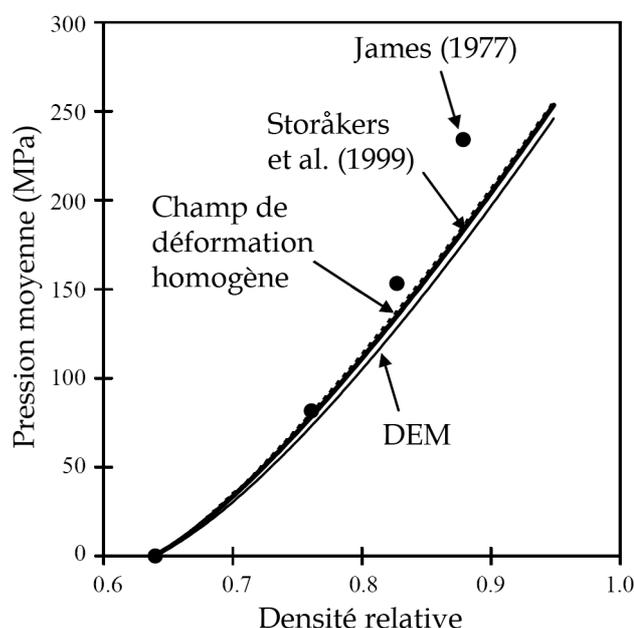


FIGURE 1.14 – Comparaison entre les résultats de Martin *et al.* (2003), Storåkers *et al.* (1999) et les résultats expérimentaux de James (1977). Cette figure issue de Martin *et al.* (2003) illustre la limite des méthodes utilisées par les auteurs précités à une densité relative de 0,8.

d'une loi de contact issue de la théorie de Storåkers *et al.* (1997), avec la restriction que le paramètre d'écroissage  $n$  soit le même pour tous les matériaux. En revanche, tous les résultats cités ici sont limités à une densité relative de l'ordre de 0,8 (Figure 1.14). Cette valeur est la limite couramment admise, au-delà de laquelle on considère que l'interaction entre les différents contacts d'une même particule n'est plus négligeable, c'est-à-dire que la force de contact entre les particules n'évolue plus de la même manière que la force de contact entre deux particules isolées. Au-delà de cette limite, il n'est donc plus possible d'utiliser une loi de contact basée sur l'hypothèse de contacts indépendants.

### 1.3.3 La méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM).

Du point de vue de la modélisation, le gros défaut des méthodes précédemment évoquées réside dans la loi de contact. Si les équations du contact élastique issues de la théorie de Hertz ont fait leurs preuves depuis maintenant bien longtemps, les solutions au problème du contact élastoplastique demeurent assez limitées au niveau de la taille des contacts et de la densité relative (Mesarovic et Fleck, 1999, 2000). Ainsi, dans le cadre de la densification des poudres métalliques ductiles, les équations qui décrivent le comportement des contacts sont aussi délicates à formuler que fondamentales pour la description des efforts macroscopiques à haute densité relative. En particulier, les équations issues

de Storåkers *et al.* (1997) ne sont valides que pour des contacts indépendants et de petites surfaces de contact.

La méthode des éléments finis multi-particules permet de pallier à cet inconvénient. Son principe repose sur la modélisation d'un empilement de particules maillées pour des simulations par la méthode des éléments finis. Ainsi, contrairement aux éléments discrets, où la forme des particules est décrite par des équations géométriques simplifiées, les particules maillées permettent, potentiellement, la prise en compte relativement aisée de formes plus complexes et plus réalistes. Ensuite, les interactions entre les particules maillées sont gérées par des conditions classiques de contact. La formulation la plus simple, qui est appliquée dans cette thèse, est fondée sur le principe suivant. Si la surface  $A$  est en contact avec la surface  $B$ , chaque nœud appartenant à la surface  $A$  se voit appliquer une force nulle, si cette distance est positive (les surfaces ne sont pas en contact); ou une force proportionnelle à la distance qui le sépare de  $B$ , si cette distance est négative (les surfaces s'interpénètrent). Ainsi, si la raideur de contact est suffisamment grande, l'interpénétration des surfaces est quasi nulle, ce qui permet une description simple et efficace du contact (ABAQUS, 2009b).

Le problème posé par le contact élastoplastique dans la méthode des éléments discrets est donc contourné. La déformation des grains étant prise en compte naturellement par la déformation du maillage, la modélisation intervient dans la description :

- des effets de frottement et/ou de cohésion au contact ;
- du comportement du matériau.

Dans la description du contact, contrairement à la méthode des éléments discrets, la surface de contact est prise en compte, ce qui simplifie considérablement la modélisation. Si l'on considère que le frottement ou la cohésion peuvent être pris en compte par des modèles simples, seule la loi constitutive du matériau des grains nécessite le recours à un modèle complexe. Toutefois, il est possible d'utiliser alors des lois constitutives classiques, issues de la mécanique des milieux continus, et dont on connaît bien les possibilités et les limites. De plus, les paramètres du matériau correspondent à des données dont le sens physique ainsi que la caractérisation expérimentale sont bien connus. Leur quantification est donc assez facile, à condition de pouvoir disposer d'échantillons de taille suffisamment grande, des matériaux qui composent les grains (ce qui, dans le cas des poudres, n'est pas toujours évident). Il en est de même pour la caractérisation du frottement. En revanche la cohésion est plus délicate à calibrer, en raison de ses causes multiples (notamment l'accroche mécanique entre les grains).

La méthode des éléments finis multi-particules permet ainsi de décrire de manière très précise à la fois le mouvement et la déformation des particules. Elle possède de

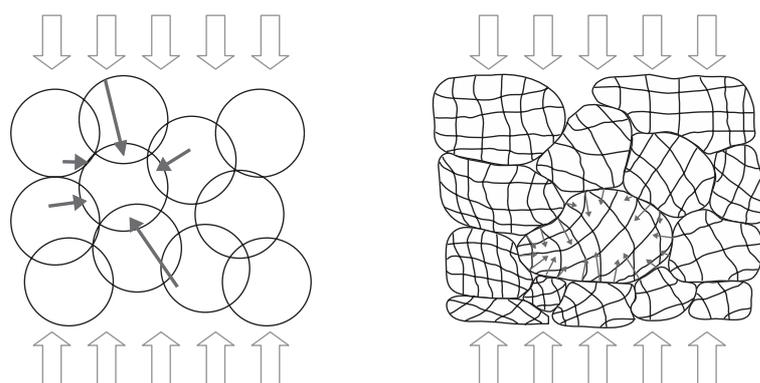


FIGURE 1.15 – Illustration de la méthode des éléments discrets et de la méthode des éléments finis multi-particules. Les flèches schématisent les forces auxquelles sont soumises une particule.

plus l'avantage de donner accès à une grande quantité d'informations à l'intérieur des particules (en particulier les champs de contraintes et de déformations), ce qui est un atout certain dans la compréhension des différents aspects de la densification. Elle a malheureusement un handicap considérable, celui du temps de calcul qui résulte du nombre d'éléments nécessaires pour mailler chaque particule. Le potentiel de la prise en compte de particules aux formes complexes est donc fortement limité par le nombre d'éléments nécessaires pour décrire ces formes, de même que le nombre de particules qu'il est possible de modéliser. Ainsi, les premières applications de cette méthode, notamment par Gethin *et al.* (2001), Gethin *et al.* (2003) ou Procopio et Zavaliangos (2005) se limitent à des études 2D d'empilements de cylindres. Par la suite Chen *et al.* (2006), puis Chen (2008) et Frenning (2008, 2010) ont appliqué cette méthode à des empilements de sphères 3D. Enfin Schmidt *et al.* (2008) ont obtenu des surfaces de charge à partir d'un assemblage de 50 sphères maillées.

### 1.3.4 Validation expérimentale de la méthode des éléments finis multi-particules.

Le travail de mon prédécesseur Yuan Chen au sein du laboratoire 3S-R est particulièrement intéressant pour la présente étude, parce qu'il présente une démarche de validation expérimentale de la méthode des éléments finis multi-particules. Nous allons donner ici les principales conclusions de cette étude. Tous les résultats de ce sous-paragraphe sont donc tirés de la thèse de Yuan Chen (Chen, 2008).

Cette étude expérimentale est fondée sur la comparaison de simulations par éléments finis d'empilements de sphères de plomb de taille macroscopique (de l'ordre de 10 mm de diamètre). Le choix du plomb se justifie par la possibilité de comprimer des échantillons

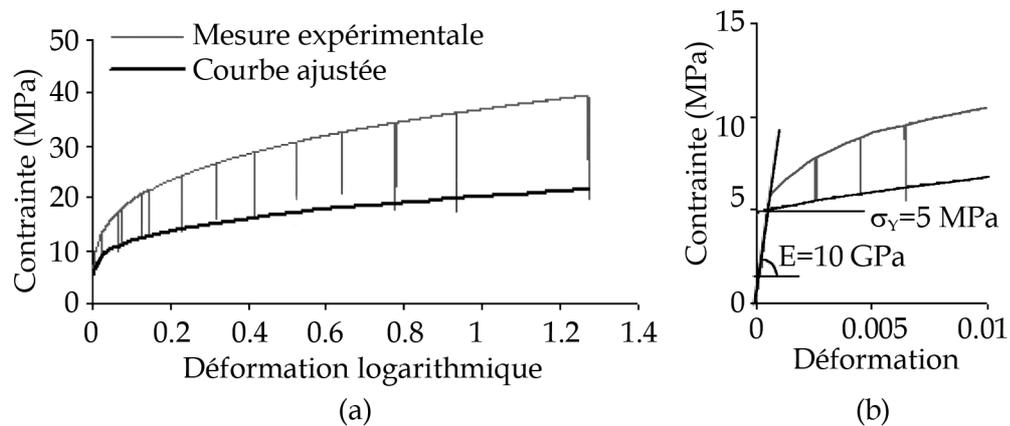


FIGURE 1.16 – Ajustement des paramètres matériau sur un essai de compression simple (Chen, 2008).

de tailles assez importantes avec des pressions raisonnables, qui peuvent être atteintes avec des presses conventionnelles. Par ailleurs, il s'agit d'un matériau qui supporte de grandes déformations plastiques avant rupture.

Dans les simulations, le comportement du plomb a été reproduit par un modèle de type Von Mises élastoplastique, et caractérisé à l'aide d'essais de compression simple sur des échantillons cylindriques. Le plomb, néanmoins, possède l'inconvénient d'avoir une sensibilité importante à la vitesse de déformation. Pour remédier à ce problème, les essais ont été effectués par une alternance de taux de déformations de l'ordre de  $10^{-3}$  à  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$  et de périodes de relaxation. L'ajustement des données est ensuite effectué sur le fond des pics de relaxation (Figure 1.16).

Par la suite, la simulation numérique est validée sur plusieurs essais. Un essai de compression simple d'une sphère entre deux plans (Figure 1.17a) est effectué, puis deux essais de compression en matrice cylindrique d'arrangements simples de neuf sphères identiques, dont l'un est présenté sur la Figure 1.17b. Lors de ces essais, les neuf sphères sont extraites de la matrice puis séparées, et la géométrie de la particule centrale est comparée à celle calculée par la simulation. La comparaison quantitative est effectuée par la mesure des angles entre deux facettes voisines (angles  $\beta$  et  $\theta$  sur la Figure 1.17b). Dans le cas de la Figure 1.17b, les résultats donnent pour l'expérience  $\theta = 92^\circ$  et  $\beta = 116^\circ$ , et pour la simulation  $\theta = 104^\circ$  et  $\beta = 117^\circ$ . La densité relative atteinte à la fin de l'essai est  $D = 0,97$ .

Enfin un empilement de 150 sphères de plomb est réalisé. Cet empilement est conçu à partir d'un algorithme de génération d'empilements issu du code d'éléments discrets PFC3D. Il est composé de sphères de trois diamètres différents. L'empilement a été conçu pour être stable par gravité, de manière à pouvoir reproduire expérimentalement le

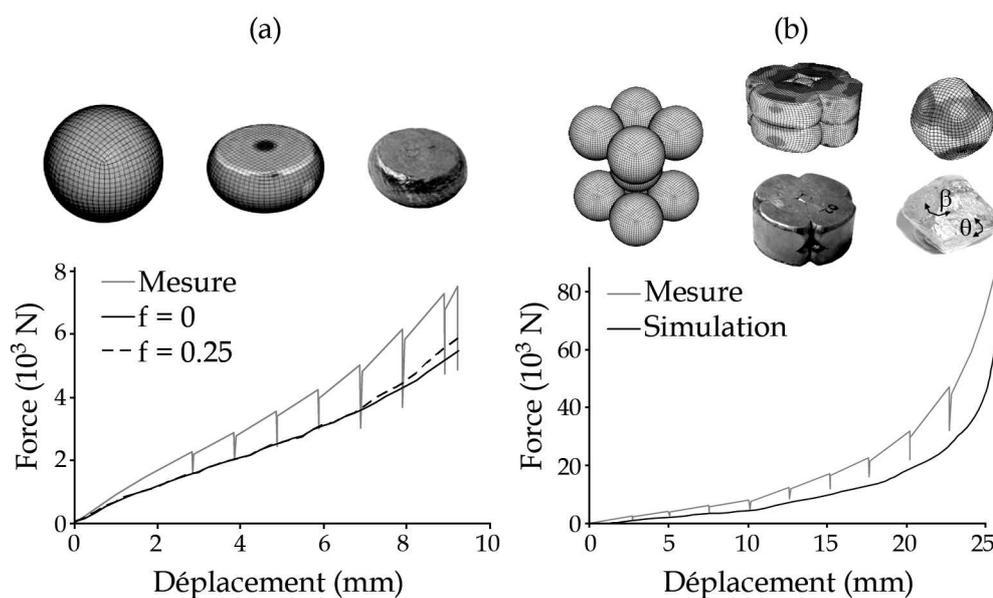


FIGURE 1.17 – Comparaison des résultats des simulations et des données expérimentales de Chen (2008). (a) Compression d’une sphère entre deux plans. Deux simulations sont présentées, avec et sans frottement sphère/plan. (b) Compression de 9 billes dans une matrice cylindrique. Pour la simulation, des coefficients de frottements de 0,25 entre les sphères et la matrice, et 0,1 entre les sphères ont été utilisés. Les angles  $\beta$  et  $\theta$  qui caractérisent la géométrie de la bille centrale après déformation ont été comparés.

même empilement que dans la simulation. En raison de la capacité de la presse utilisée, la densité finale de l’essai est limitée à 0,92. Néanmoins les résultats sont satisfaisants. De plus, la comparaison des géométries des échantillons numérique et expérimental après compression montre que les déplacements des particules sont relativement bien reproduits par la simulation (Figure 1.18), dans la mesure où on considère la difficulté à reproduire exactement l’empilement généré numériquement et à quantifier la position et le déplacement des grains.

La comparaison des résultats expérimentaux et des résultats issus de la méthode des éléments finis multi-particules sont donc plutôt satisfaisants, et nous nous basons sur ces résultats pour considérer désormais que cette méthode est robuste et fiable, et qu’elle peut être considérée comme une référence par rapport aux théories sur la densification des poudres ou à la méthode des éléments discrets.

### 1.3.5 Vers un modèle continu.

Au vu des quelques éléments présentés dans ce paragraphe, il apparaît que la méthode des éléments finis multi-particules est potentiellement très précise et fiable, mais qu’elle

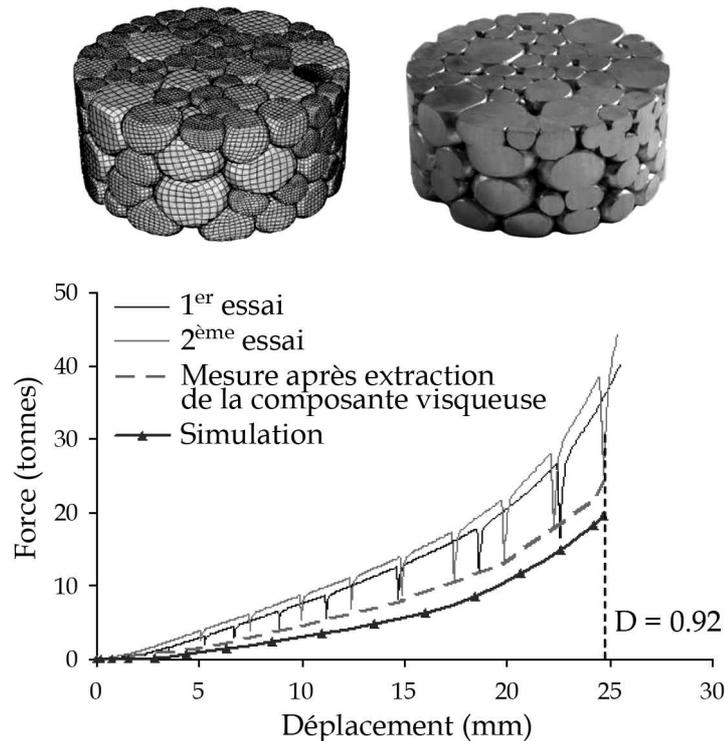


FIGURE 1.18 – Comparaison des résultats des simulations et des données expérimentales de Chen (2008), dans le cas de la compression en matrice cylindrique d’un empilement de 150 sphères de plomb de trois tailles différentes. La force relevée est la force sur le poinçon supérieur. Les valeurs de frottement utilisées dans la simulation sont les mêmes que pour la Figure 1.17b.

est limitée par un temps de calcul exorbitant lorsque l’on souhaite atteindre un nombre de particules un peu réaliste<sup>20</sup>. La méthode des éléments discrets est moins précise. La validité de ses prédictions est actuellement limitée à une densité relative de 0,8. En revanche, le temps de calcul est bien plus raisonnable, autorisant des simulations avec plusieurs milliers de sphères, sur plusieurs chemins de chargement, de manière à obtenir notamment des surfaces de charge (Heyliger et McMeeking, 2001; Martin, 2004; Pizette *et al.*, 2010). Ainsi, la méthode des éléments discrets pourrait représenter un compromis très intéressant entre précision et temps de calcul si elle était en mesure de décrire la densification jusqu’à des densités relatives élevées (supérieures à 0,9).

Néanmoins, si l’on se fixe l’objectif de réaliser des simulations de la mise en forme de pièces industrielles, les modèles continus conservent des avantages certains. D’une

20. Par exemple, Yuan Chen (Chen, 2008) a effectué des simulations sur des empilements jusqu’à 1500 sphères environ. Le temps de calcul correspondant, pour une seule simulation avec un chemin de chargement monotone en matrice, est de plusieurs semaines, sachant que pour en arriver là, le maillage sur chaque particule a été réduit considérablement. La simulation présentée sur la Figure 1.18 est effectuée avec un maillage plus fin, et le temps de calcul est alors aux environs d’un mois, avec seulement 150 sphères.

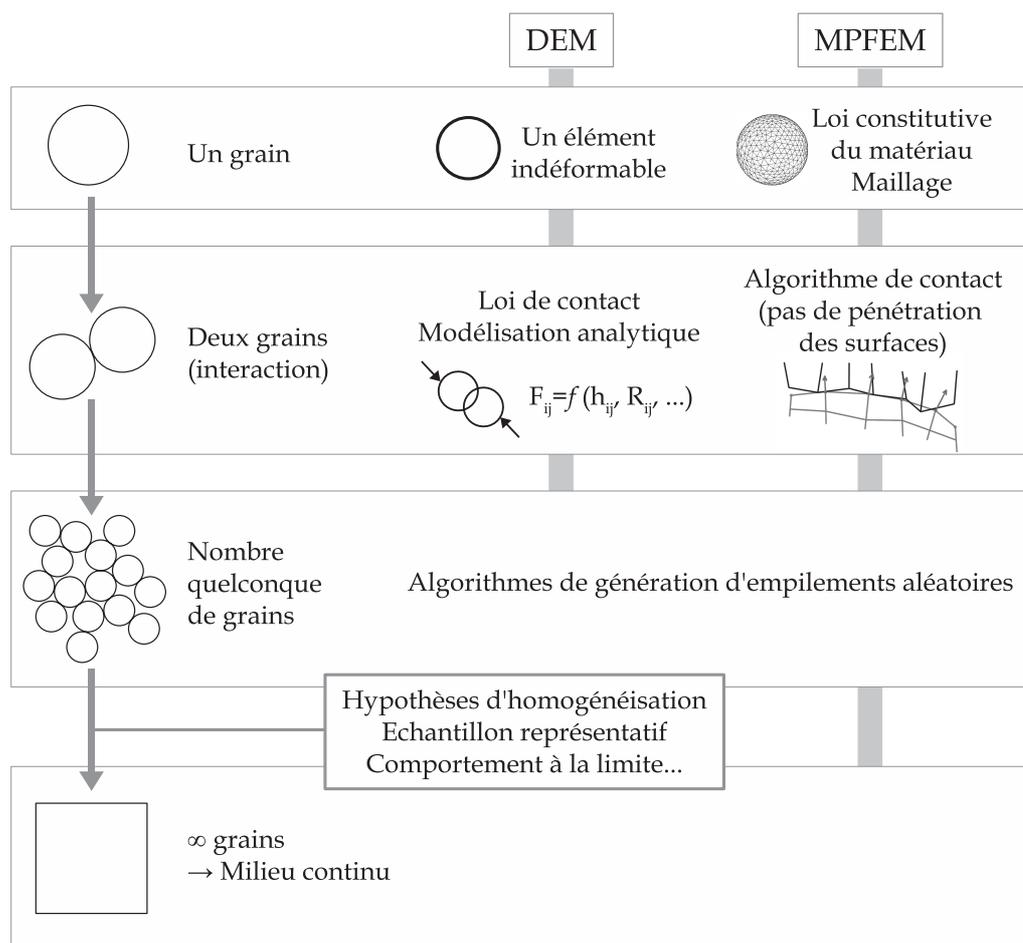


FIGURE 1.19 – Synthèse des deux approches de modélisation discrète. Les acronymes ‘DEM’ (Discrete Element Method) et ‘MPFEM’ (Multi-Particle Finite Element Method) sont définis respectivement aux paragraphes 1.3.2 et 1.3.3.

part, il est possible de les implémenter dans des codes commerciaux d’éléments finis<sup>21</sup>. D’autre part, ils peuvent représenter également un gain de temps de calcul par rapport aux éléments discrets.

Par conséquent, si la modélisation discrète n’est pas directement applicable à la simulation de pièces industrielles, elle peut par contre s’avérer très intéressante comme alternative peu coûteuse à la démarche expérimentale décrite au paragraphe 1.2. Les simulations discrètes peuvent permettre d’alimenter l’élaboration d’un modèle continu en donnant accès :

- aux chargements très déviatoires et aux histoires de chargements complexes inac-

21. Avec ABAQUS, par exemple, il est possible d’intégrer des lois de comportement définies par l’utilisateur, au moyen des sous-routines UMAT ou VUMAT (ABAQUS, 2009b).

cessibles à l'approche expérimentale ;

- à la compréhension des phénomènes granulaires, à la fois par le découplage des phénomènes et par les informations locales qu'elles permettent d'obtenir.

Une synthèse des deux méthodes de simulation discrète présentées est donnée par la Figure 1.19.

## 1.4 Synthèse.

Nous avons vu dans ce chapitre les enjeux de la modélisation du comportement mécanique des poudres. Un modèle continu, pour les matériaux en poudres, doit être un compromis entre la simplicité de mise en œuvre et la précision, de sorte qu'il soit utilisable dans un contexte industriel. Il doit donc être possible de le calibrer par une démarche expérimentale simple et peu coûteuse. Mais il doit aussi être en mesure de reproduire correctement les efforts et l'influence de chemins de chargement relativement complexes, notamment pour son application aux problèmes de fissuration pendant la phase de compression. Pour cette raison, il est nécessaire de pouvoir quantifier la réponse des matériaux à des histoires de chargement complexes.

L'approche la plus naturelle pour la formulation d'un modèle continu consiste à considérer directement la poudre comme un milieu continu, et à l'étudier expérimentalement, en observant la réponse d'un échantillon à plusieurs types de sollicitations et de chemin de chargement. Ces réponses sont autant d'indications pour la formulation d'un modèle continu. Mais, en plus de son prix de revient et du temps nécessaire à sa mise en place, la démarche expérimentale possède l'inconvénient considérable de ne donner accès qu'à peu de chemins de chargement. Ainsi, la modélisation discrète est une autre voie pour l'étude des poudres, peu coûteuse, et qui donne accès non seulement aux chemins de chargement recherchés, mais aussi à beaucoup d'informations sur la structure granulaire, en vue de comprendre les phénomènes qui interviennent à cette échelle dans la compression des poudres.

Parmi les différentes approches de modélisation discrète, la méthode des éléments finis multi-particules est la plus prometteuse :

- parce qu'elle permet une description très précise de la mécanique à l'échelle granulaire ;
- parce qu'elle évite la formulation de lois de contact, qu'ainsi elle peut potentiellement prendre en compte, de manière naturelle, des particules de toute géométrie

et de tous matériaux, et que les seuls paramètres à calibrer sont ceux du ou des matériaux constitutifs, du frottement et de la cohésion entre les grains ;

- parce qu'elle est facile à mettre en œuvre, et que le temps de calcul, actuellement exorbitant, qu'elle nécessite, est promis à diminuer significativement avec les progrès rapides de l'informatique.

En raison de son grand potentiel, cette méthode sera utilisée ici comme référence et son application sera le fil conducteur de cette thèse. Néanmoins, à l'heure actuelle, la méthode des éléments discrets demeure intéressante, en raison du gain en temps de calcul qu'elle représente. Deux axes apparaissent alors.

D'une part, il est possible d'appliquer la méthode des éléments finis multi-particules au développement de la méthode des éléments discrets, afin de l'étendre à la modélisation de la compression des poudre à haute densité. C'est l'objet du Chapitre 2.

D'autre part, il est possible d'appliquer les méthodes discrètes, et en particulier la méthode des éléments finis multi-particules, à l'élaboration d'une loi de comportement continue. Des éléments dans ce sens sont donnés au Chapitre 3.

## Chapitre 2

# Loi de contact pour les hautes densités.

### Sommaire

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| <b>2.1</b> | <b>Introduction et démarche.</b>  | <b>42</b> |
| <b>2.2</b> | <b>Formulation de la loi haute-densité.</b>   | <b>44</b> |
| 2.2.1      | Éléments de modélisation pour la simulation par la méthode des éléments finis.              | 44        |
| 2.2.2      | Analyse des phénomènes en haute densité.  | 47        |
| 2.2.3      | Principe de la formulation de la loi haute-densité.   | 48        |
| 2.2.4      | Définition de la densité relative locale.   | 49        |
| 2.2.5      | Paramètres de la loi haute-densité.   | 50        |
| 2.2.6      | Décomposition de la raideur de contact.   | 51        |
| 2.2.7      | Forme finale de la loi haute-densité.   | 53        |
| <b>2.3</b> | <b>Validation locale de la loi haute-densité.</b>   | <b>56</b> |
| 2.3.1      | Résultats sur un arrangement cubique simple et comparaison avec les résultats de Storåkers. | 56        |
| 2.3.2      | Détection du contact à haute densité relative : exemple d'une cellule cubique centrée.      | 60        |
| 2.3.3      | Force de contact dans une configuration aléatoire.  | 63        |
| 2.3.4      | Conclusion sur la validation locale de la loi haute-densité.                                | 68        |
| <b>2.4</b> | <b>Validation à l'échelle macroscopique.</b>  | <b>69</b> |
| 2.4.1      | Implémentation de la loi haute-densité dans YADE.   | 69        |
| 2.4.2      | Simulations par éléments discrets.  | 71        |
| 2.4.3      | Quelques éléments pour aller plus loin.   | 75        |
| <b>2.5</b> | <b>Conclusion.</b>  | <b>81</b> |

## 2.1 Introduction et démarche.

Le chapitre 1 a expliqué l'importance, pour les industriels, de la maîtrise du comportement mécanique des poudres, et ce jusqu'à haute densité relative. La haute densité relative, pour certaines poudres (fer par exemple), est synonyme de résistance mécanique, et constitue donc un objectif important à atteindre pour maîtriser le procédé au mieux.

Les méthodes discrètes présentées en 1.3.2 et 1.3.3 constituent des pistes intéressantes pour l'investigation du comportement des poudres à haute densité. Pour rappeler le paragraphe 1.4, la méthode des éléments discrets (§1.3.2) représente un compromis intéressant entre le temps de calcul exorbitant de la méthode des éléments finis multi-particules (§1.3.3) et la précision des résultats. Elle possède l'avantage d'être capable de prendre en compte naturellement le caractère granulaire et aléatoire des poudres.

S'il est possible de développer une loi de contact capable de reproduire le comportement des contacts entre grains en haute densité relative, alors la méthode des éléments discrets devient applicable au domaine des hautes densités relatives. La méthode des éléments finis multi-particules, si elle est inapplicable à la simulation de pièces industrielles, est tout à fait capable de fournir naturellement des informations riches sur la déformation des grains, les forces de contact, les interactions entre les contacts et, de manière générale, les mécanismes granulaires à prendre en compte en haute densité relative.

Nous avons cherché à combiner les avantages des deux méthodes, en utilisant les informations fournies par la méthode des éléments finis multi-particules pour formuler une loi de contact pour la méthode des éléments discrets en haute densité relative. Cette loi de contact, destinée à être valide en haute densité relative, sera désormais nommée *loi haute-densité*. La formulation et la validation de la loi haute-densité est l'objet du présent chapitre.

Pour caractériser l'effet de l'interaction entre les différents contacts autour d'une particule, nous avons choisi d'étudier un cas simple de chargement appliqué à une particule sphérique. Le choix s'est arrêté sur un arrangement de type cubique simple (Figure 2.1).

L'étude des résultats des simulations menées sur cet empilement tridimensionnel simple, en imposant plusieurs sollicitations simples, permet de déterminer quels sont les paramètres à prendre en compte pour l'écriture de la loi haute-densité, sous la forme d'une expression analytique de la force normale de contact.

Ensuite, le calage de la loi haute-densité est réalisé sur l'essai (numérique) de compression isotrope. L'influence du choix d'un empilement cubique simple en compression isotrope comme essai de calage sera discutée au paragraphe 2.2.7.

Enfin, après avoir proposé une expression analytique de la loi haute-densité, celle-ci

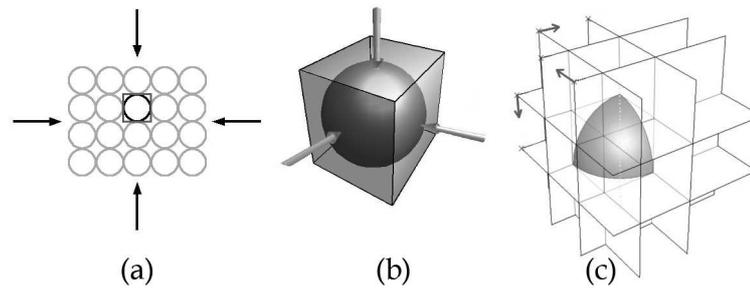


FIGURE 2.1 – Un empilement périodique cubique simple (a) est étudié par l'intermédiaire d'une cellule élémentaire (b), cellule qui peut encore être réduite par symétrie pour obtenir une modélisation pour un calcul par la méthode des éléments finis (c).

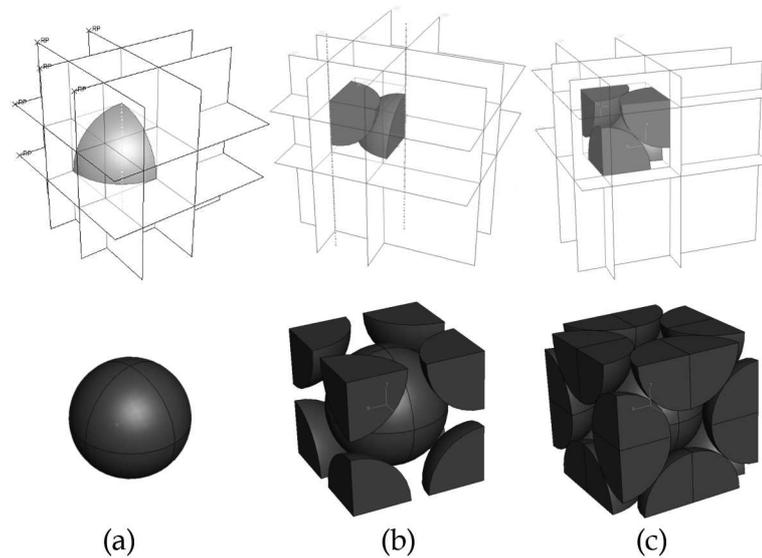


FIGURE 2.2 – Cellules périodiques étudiées et modèles correspondants pour les calculs par la méthode des éléments finis. (a) Cubique simple, (b) cubique centrée, (c) cubique à faces centrées.

sera validée par une comparaison entre les résultats qu'elle fournit et des simulations par éléments finis sur des arrangements plus complexes, de type cubique centré et cubique à face centrée (Figure 2.2), puis sur des empilements aléatoires, plus réalistes. Enfin, cette loi de contact sera introduite dans un code d'éléments discrets afin de la valider sur la base d'une comparaison DEM / MPFEM.

La Figure 2.3 synthétise cette démarche.

Une conséquence du choix d'utiliser des arrangements périodiques pour caler une loi de contact est que cette démarche n'est a priori valide que pour des empilements de

particules de même taille. On se restreint de plus à des particules de même matériau. La généralisation de ce travail à des cas plus complexes est laissée à des travaux futurs.

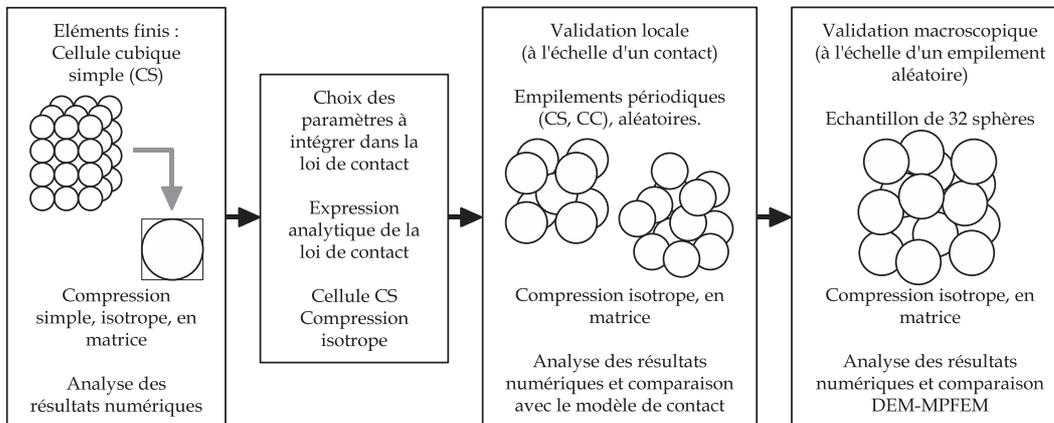


FIGURE 2.3 – Démarche d'élaboration de la loi haute-densité.

## 2.2 Formulation de la loi haute-densité.

### 2.2.1 Éléments de modélisation pour la simulation par la méthode des éléments finis.

#### Modèles.

Les simulations sont effectuées sur des empilements périodiques réduits autant que possible par périodicité et par symétrie. Les géométries intégrées dans les modèles éléments finis sont présentées sur la Figure 2.2.

Les contacts entre deux cellules voisines sont représentés par des contacts avec des plans rigides, qui représentent soit des conditions de symétrie soit des contacts entre deux sphères voisines.

En effet, en l'absence de frottement, un contact entre deux sphères déformables identiques est strictement équivalent à un contact entre une sphère déformable et un plan rigide. Cela est discuté dans la thèse de Yuan Chen (Chen, 2008).

Dans ce chapitre toutes les simulations sont réalisées sans frottement, afin d'étudier isolément la force normale de contact.

Les sphères étudiées ont un rayon  $R = 5$  mm.

**Matériau.**

Le matériau constitutif des sphères est représenté par un modèle de type Von Mises élastoplastique, avec écrouissage isotrope, dont le détail est présenté dans le paragraphe 1.2.2, avec la relation d'écrouissage  $\sigma_Y = K(\varepsilon_{eq})^n$  (Équation (1.29)).

La partie élastique est linéaire isotrope, décrite par la loi de Hooke (Landau et Lifchitz, 1967), avec un module d'élasticité  $E$  et un coefficient de Poisson  $\nu$ , et la limite élastique initiale donnée par  $\sigma_0 = K\varepsilon_0^n = E\varepsilon_0$  (Équation (1.30)).

On notera que la valeur initiale de la limite élastique a peu d'importance dans cette étude, car toutes les situations étudiées sont précédées d'une phase de plastification. La connaissance de la limite élastique courante est suffisante.

Le matériau est ainsi entièrement déterminé par les quatre constantes  $E$ ,  $\nu$ ,  $K$  et  $n$ . De plus, le plomb a été choisi comme matériau modèle, afin de faciliter une validation expérimentale de la même manière que dans les travaux antérieurs effectués au laboratoire 3S-R par Yuan Chen (Chen, 2008). Les valeurs attribuées aux quatre paramètres correspondent donc aux mesures expérimentales effectuées par Yuan Chen, en supprimant la partie visqueuse du comportement au moyen de périodes de relaxation pendant les essais :

$$\left\{ \begin{array}{l} E = 10\,000 \text{ MPa} \\ \nu = 0,435 \\ K = 20,5 \text{ MPa} \\ n = 0,24 \end{array} \right. \quad (2.1)$$

La relation d'écrouissage (1.29) utilisée ici, par contre, est légèrement différente de celle utilisée par Yuan Chen, de sorte que les paramètres  $K$  et  $n$  sont différents. Celle-ci est introduite dans ABAQUS au moyen d'une courbe d'écrouissage linéaire par morceaux.

**Conditions aux limites.**

Les chargements sont appliqués au moyen de plans rigides pilotés en déplacement. Les trois chargements qui seront rencontrés ici sont les suivants :

- la compression simple, où deux sphères isolées sont comprimées l'une contre l'autre (Figure 2.4a) ;
- la compression isotrope d'une cellule cubique simple (Figure 2.4b) ;

– la compression en matrice d’une cellule cubique simple (Figure 2.4c).

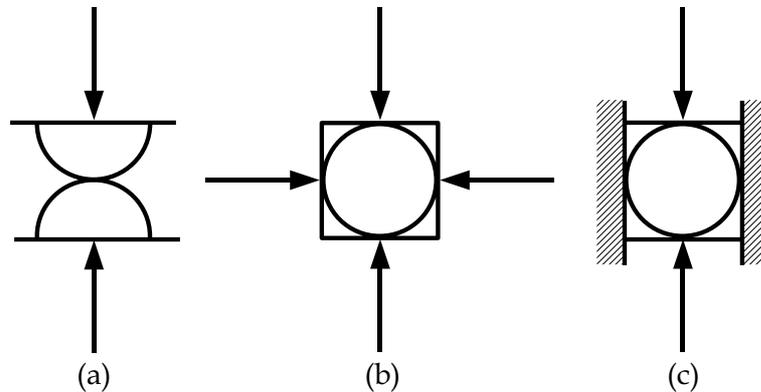


FIGURE 2.4 – (a) Compression simple de deux sphères. (b) Compression isotrope d’une cellule périodique cubique simple. (c) Compression en matrice d’une cellule périodique cubique simple.

### Maillage.

Les sphères sont maillées avec des tétraèdres à 10 noeuds, à interpolation quadratique<sup>1</sup>. Le maillage est destiné à être utilisable pour des grands déplacements et de grandes amplitudes de déformation, avec un temps de calcul raisonnable. Il est grossier à l’intérieur de la sphère, et plus fin sur la surface, afin de décrire correctement l’évolution des surfaces de contact dans toutes les directions (Figure 2.5).

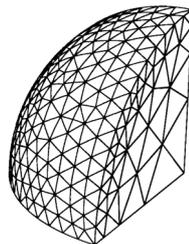


FIGURE 2.5 – Maillage éléments finis pour un huitième de sphère.

Le maillage utilisé dans ce chapitre contient environ 1 200 éléments pour un huitième de sphère.

1. Dans ABAQUS, ces éléments sont nommés C3D10M, cf. ABAQUS (2009b).

### 2.2.2 Analyse des phénomènes en haute densité.

La Figure 2.6 montre les résultats des simulations en force-déplacement<sup>2</sup>, pour la compression simple, ainsi que pour la compression en matrice et la compression isotrope d'une cellule cubique simple. La compression simple représente l'indentation de deux sphères isolées en contact.

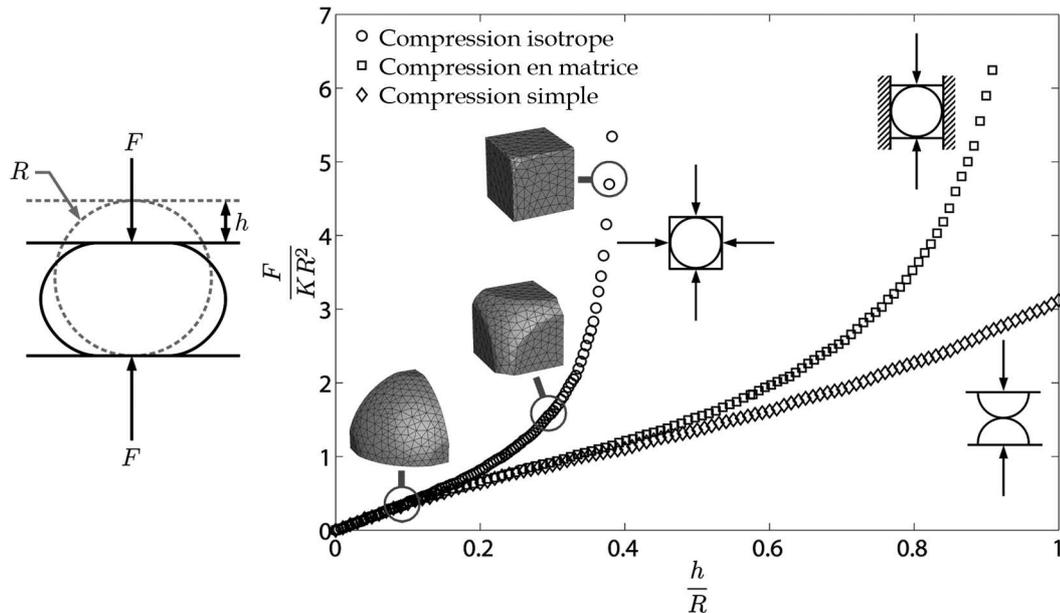


FIGURE 2.6 – Résultats en force-déplacement des simulations par la méthode des éléments finis, pour la compression isotrope et en matrice d'une cellule cubique simple, et la compression simple d'une sphère isolée. Pour la compression isotrope, la géométrie déformée est représentée pour le début de la compression, pour la fin et pour un état intermédiaire. Les paramètres matériau sont donnés par (2.1).

Pour des petits déplacements ( $h/R < 0,15$  pour la compression isotrope, et jusqu'à  $0,35$  pour la compression en matrice), les courbes se superposent à la courbe de compression simple. Cette zone correspond au domaine de validité de l'hypothèse des contacts indépendants. Pour des déplacements plus grands, on constate que pour les cas de la compression isotrope et de la compression en matrice, la force de contact augmente jusqu'à tendre vers une asymptote verticale, autour de  $h/R = 0,4$  environ dans le cas isotrope, et proche de 1 en matrice. On lit généralement dans la littérature que cette différence avec la compression simple est due à l'interaction entre les différents contacts autour de la sphère (Mesarovic et Fleck, 2000, par exemple).

Nous remarquerons ici, comme l'indiquent les images de la géométrie déformée en

<sup>2</sup> La force  $F$  et le déplacement relatif  $h$  sont adimensionnalisés respectivement par  $KR^2$  et  $R$ . À ce sujet, voir le paragraphe 2.2.5.

compression isotrope sur la Figure 2.6, que le caractère asymptotique des courbes est relié à la diminution des porosités présentes entre les sphères, qui permettent à la matière de s'écouler.

Autrement dit, la compressibilité d'un empilement de sphères est limitée par l'incompressibilité plastique du matériau constitutif des grains, assurée par le modèle de comportement de type Von Mises. Une fois que l'empilement est complètement dense, et que le matériau des particules remplit tout l'espace disponible, l'assemblage de grains devient (plastiquement) incompressible.

Entre ces deux états (contacts indépendants et matériau incompressible) existe une zone de transition qui peut s'interpréter à la fois par l'interaction entre les contacts voisins et l'augmentation progressive de la résistance à la compression, les deux phénomènes étant liés et simultanés.

### 2.2.3 Principe de la formulation de la loi haute-densité.

De l'analyse précédente nous retenons trois points :

- Premièrement, l'écriture d'une loi de contact qui exprime la force de contact normale uniquement en fonction du déplacement  $h$  n'est pas réaliste en haute densité.
- Deuxièmement, en début de compression, lorsque les contacts sont indépendants, la force de contact ne dépend que de  $h$ .
- Troisièmement, la force de contact tend vers l'infini lorsque la porosité disparaît.

Ce constat nous amène à introduire un paramètre supplémentaire dans la loi de contact, qui correspond au rapport du volume d'une sphère (supposé constant) et d'un volume à l'intérieur duquel le matériau de la sphère doit rester confiné, volume qui diminue avec la densification.

Ce paramètre correspond à une fraction volumique locale, mais par simplicité, et par analogie avec la densité relative couramment utilisée dans le domaine des poudres métalliques, il sera appelé dans la suite *densité relative locale*, même s'il s'agit d'un abus de langage<sup>3</sup>. Ce paramètre sera désigné par la lettre  $\rho$ .

L'expression analytique devra ensuite respecter les deux conditions suivantes :

- Lorsque  $h$  est petit, l'influence de  $\rho$  est négligeable (contacts indépendants)

---

3. Une densité est un rapport de masses volumiques, et non de volumes, comme c'est le cas ici.

- Lorsque  $\rho$  tend vers 1, toutes les forces de tous les contacts autour d'une particule tendent vers l'infini.

Ces deux conditions serviront de base à l'écriture de la loi de contact.

#### 2.2.4 Définition de la densité relative locale.

Le problème de la définition de la densité relative locale  $\rho$  est de définir le volume à l'intérieur duquel le matériau d'une sphère est circonscrit, en n'utilisant pour cela que les paramètres accessibles dans la cadre de la méthode des éléments discrets, c'est-à-dire les centres des particules dans l'empilement.

Dans le cas d'un empilement de sphères toutes identiques, les surfaces de contact entre les particules sont planes s'il n'y a pas de rotation relative des surfaces en contact. Dans le cas d'une histoire de chargement complexe (qu'on peut rencontrer localement dans la compression en matrice par exemple), les surfaces ne sont plus rigoureusement planes. On suppose que lorsque toutes les sphères sont de même taille et de même matériau, les cas où les surfaces de contact diffèrent beaucoup d'un plan sont rares<sup>4</sup>, de sorte que nous négligeons cette possibilité.

En considérant également que par symétrie, la surface de contact entre deux sphères est comprise dans le plan bissecteur du segment centre-centre, on peut, pour chaque sphère, définir un polyèdre avec tous les plans bissecteurs des plus proches voisines, et à l'intérieur duquel le matériau de la sphère est emprisonné.

Ce polyèdre est connu sous le nom de *cellule de Voronoi* (Gellatly et Finney, 1982a,b). Le principe en est illustré sur la Figure 2.7. La définition de la densité relative locale peut alors s'écrire :

$$\rho = \frac{4/3\pi R^3}{V_{cell}} \quad (2.2)$$

où  $V_{cell}$  est le volume de la cellule de Voronoi, qui diminue avec la densification.

À titre de remarque, on notera qu'il est possible de généraliser cette définition à des empilements polydispersés par extension de la notion de cellule de Voronoi, en utilisant, au lieu des plans bissecteurs, des plans dont les positions sont pondérées en fonction de la différence de taille des sphères voisines (Harthong *et al.*, 2010)<sup>5</sup>.

4. Nous n'avons jamais observé de cas de ce type dans le présent travail.

5. Ceci sort du cadre de cette thèse, ce travail étant dû à Jean-François Jérier (Jérier, 2010), Bruno Chareyre et Vincent Richefeu. Nous y reviendrons brièvement au paragraphe 2.4.1.

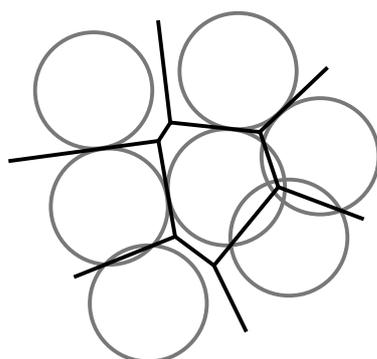


FIGURE 2.7 – Illustration 2D d'une cellule de Voronoï.

Néanmoins, dans ce cas, les surfaces de contact ne restent pas rigoureusement planes, et par conséquent, la condition d'incompressibilité exprimée par  $\rho$  devient plus approximative.

### 2.2.5 Paramètres de la loi haute-densité.

La loi de contact exprime la force normale de contact en fonction de différents paramètres accessibles dans le cadre de la méthode des éléments discrets. Ces différents paramètres sont nécessairement relatifs au contact ; il est donc nécessaire de définir une densité relative locale relative à un contact ; or la définition 2.2 est relative à une particule. On définit donc arbitrairement la *densité relative locale moyenne*. Pour deux sphères  $i$  et  $j$  en contact, de densités relatives locales respectives  $\rho_i$  et  $\rho_j$ , la densité relative locale moyenne s'écrit :

$$\rho_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j) \quad (2.3)$$

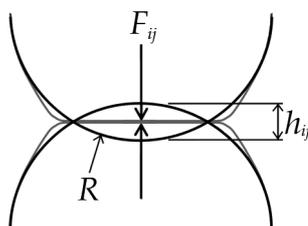


FIGURE 2.8 – Notations utilisées pour l'écriture de la loi de contact.

La force de contact normale  $F_{ij}$  est donc à exprimer en fonction des paramètres suivants (Figure 2.8) :

- $h_{ij}$  et  $\rho_{ij}$ , paramètres identifiant l'état de déformation ;

- $K$  et  $n$ , paramètres matériau relatifs à la plastification ;
- $R$ , qui définit la taille des sphères.

On notera que le paramètre  $h_{ij}$  explicité sur la Figure 2.8 est l'équivalent du paramètre  $h$  utilisé précédemment pour les résultats issus des simulations par éléments finis, et explicité sur la Figure 2.6.

La force de contact est donc fonction de cinq paramètres. Une première simplification consiste à supposer que la forme adimensionnelle suivante :

$$\frac{F_{ij}}{KR^2} \left( \frac{h_{ij}}{R}, \rho_{ij}, n \right) \quad (2.4)$$

est indépendante des paramètres  $R$  et  $K$ . Cette hypothèse est illustrée par la Figure 2.9. La très légère différence entre les deux courbes de la Figure 2.9a s'explique par la compressibilité élastique, car les deux courbes ont été obtenues avec les mêmes valeurs pour les paramètres élastiques  $E$  et  $\nu$ , de sorte que la limite élastique  $\sigma_Y$  et la déformation correspondante  $\varepsilon_Y$  définies par l'équation (1.30) sont plus grandes pour  $K = 100$  MPa.

Si l'on néglige cet effet de compressibilité élastique, l'utilisation de la forme adimensionnelle (2.4) revient aux considérations physiques suivantes :

- Quelle que soit la taille des particules, la même distribution de contrainte sur la surface de contact est obtenue pour la même valeur de  $h_{ij}/R$  ;
- La force  $F_{ij}$  est proportionnelle à la surface de contact, elle-même proportionnelle à  $R^2$  (et donc  $F_{ij}$  est proportionnelle à  $R^2$ ) ;
- La contrainte est proportionnelle au paramètre  $K$ , à cause du comportement du matériau défini par l'équation (1.29), et par conséquent la quantité  $F/R^2$  est proportionnelle à  $K$ .

### 2.2.6 Décomposition de la raideur de contact.

Pour des raisons de convergence, il est apparu nécessaire d'exprimer la force de contact en introduisant une raideur (notée  $S_{ij}^{pl}$ ), afin que la force de contact soit contrôlée par le déplacement relatif (il n'y a pas de force sans déplacement). De plus, pour permettre l'écriture d'une loi élastoplastique, il a été choisi d'utiliser une forme incrémentale :

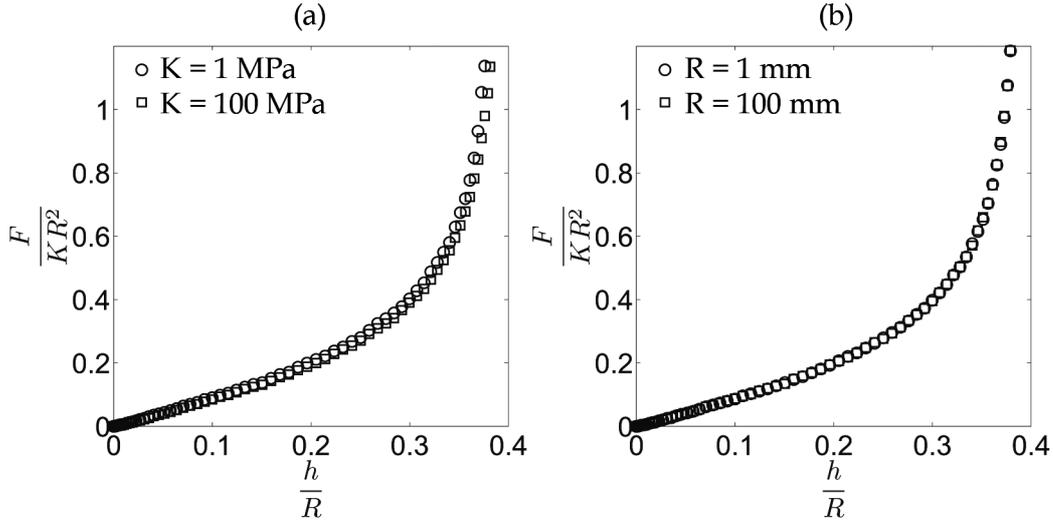


FIGURE 2.9 – Les paramètres  $R$  et  $K$  n'ont plus aucune influence lorsqu'on considère les grandeurs adimensionnalisées  $F/KR^2$  et  $h/R$ . (a) Influence de  $K$  avec  $R = 5$  mm,  $n = 0, 24$ . (b) Influence de  $R$  avec  $K = 20,5$  MPa,  $n = 0, 24$ .

Si  $h_{ij} \geq 0$  :

$$\frac{F_{ij}}{KR^2}(t + \Delta t) = \frac{F_{ij}}{KR^2}(t) + S_{ij}^{pl}\left(\frac{h_{ij}}{R}, \rho_{ij}, n\right) \Delta \frac{h_{ij}}{R}(t) \quad (2.5)$$

Si  $h_{ij} < 0$  :

$$F_{ij} = 0 \quad (2.6)$$

où  $t$  est le temps,  $S_{ij}^{pl}$  est la raideur de contact plastique (adimensionnelle),  $\Delta t$  est l'incrément de temps et

$$\Delta \frac{h_{ij}}{R}(t) = \frac{h_{ij}}{R}(t + \Delta t) - \frac{h_{ij}}{R}(t) \quad (2.7)$$

est l'incrément de déplacement relatif, au temps  $t$ .

L'équation (2.6) exprime le critère classique de détection du contact : lorsque  $h_{ij} < 0$ , la distance entre les centres de deux particules est supérieure à la somme de leurs rayons (initiaux), et alors, il n'y a pas contact ; la force est donc nulle.

La raideur  $S_{ij}^{pl}$  est décomposée en une somme de deux termes :

$$S_{ij}^{pl}\left(\frac{h_{ij}}{R}, \rho_{ij}, n\right) = S_1\left(\frac{h_{ij}}{R}, n\right) + S_2(\rho_{ij}, n) \quad (2.8)$$

Les conditions définies au début de ce paragraphe sont respectées si :

- $S_2$  est petit devant  $S_1$  en début de compression ;
- $S_2$  tend vers l'infini lorsque  $\rho_{ij}$  tend vers 1, alors que  $S_1$  a une valeur finie.

Ainsi  $S_1$  représente la force développée par un contact lorsqu'il est isolé (contacts indépendants). Il est alors légitime que  $S_1$  soit calibré par un essai de compression simple (Figure 2.4a).  $S_2$  représente alors la force supplémentaire qui provient à la fois de l'interaction entre les différents contacts et de l'effet de l'incompressibilité plastique du matériau.  $S_2$  est alors calé sur un essai simple qui prend ces phénomènes en compte ; l'essai choisi pour cela est l'essai de compression isotrope d'un arrangement cubique simple (Figure 2.4b).

### 2.2.7 Forme finale de la loi haute-densité.

L'expression de la loi de contact est une expression ajustée sur les résultats des simulations par éléments finis :

$$S_{ij}^{pl} = \underbrace{\alpha_1(n) \exp\left(\beta_1(n) \frac{h_{ij}}{R}\right) + \gamma_1(n) \exp\left(-\delta_1 \frac{h_{ij}}{R}\right)}_{S_1(h_{ij}/R, n)} + \underbrace{\alpha_2(n) \frac{\left[\max\left(0, \rho_{ij} - \rho_{ij}^{\text{ref}}\right)\right]^{\beta_2}}{(1 - \rho_{ij})^{\gamma_2}}}_{S_2(\rho_{ij}, n)} \quad (2.9)$$

où  $\rho_{ij}^{\text{ref}}$  est une densité relative locale de référence :

$$\rho_{ij}^{\text{ref}} = \max\left(\rho_0^{\text{min}}, \rho_{ij}^0\right) \quad (2.10)$$

où  $\rho_0^{\text{min}}$  est une valeur particulière de densité relative, en dessous de laquelle l'effet de l'incompressibilité n'est pas perceptible, et  $\rho_{ij}^0$  est la valeur de la densité relative locale moyenne dans l'empilement non déformé. Ce choix implique les situations suivantes (Figure 2.10) :

- Si la densité relative locale moyenne lors de l'apparition du contact est inférieure à  $\rho_0^{\text{min}}$  (alors nécessairement  $\rho_{ij}^0 < \rho_0^{\text{min}}$ ), l'effet de l'incompressibilité – traduit par  $S_2$  – ne se manifeste que lorsque  $\rho_{ij}$  atteint la valeur seuil  $\rho_0^{\text{min}}$  (Figure 2.10a) ;
- Si la densité relative locale moyenne  $\rho_{ij}^0$  dans l'empilement non déformé est supérieure à  $\rho_0^{\text{min}}$ , et que les sphères  $i$  et  $j$  sont initialement en contact, l'effet de l'incompressibilité apparaît dès le début du chargement (Figure 2.10b) ;

- Enfin, si le contact entre les sphères  $i$  et  $j$  apparaît à une densité relative locale supérieure à  $\rho_0^{\min}$  (peu importe alors la valeur de  $\rho_{ij}^0$ ), l'effet de l'incompressibilité apparaît lorsque le contact apparaît, mais alors  $S_2$  est non nul<sup>6</sup>, et par conséquent la raideur de contact totale  $S_{ij}^{pl}$  est plus importante. Ceci traduit le fait que l'effet de l'incompressibilité s'est déjà manifesté à travers les autres contacts précédemment établis (Figure 2.10c).

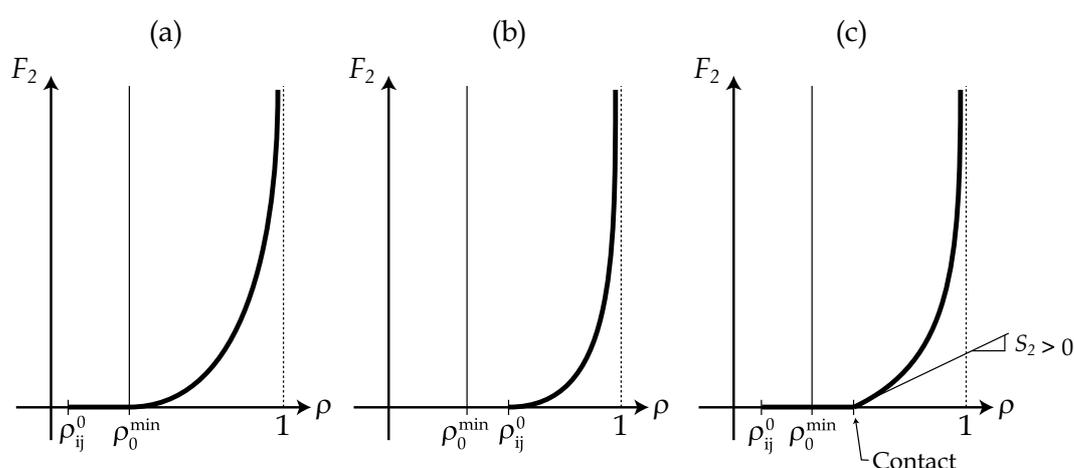


FIGURE 2.10 – Schémas de l'évolution de la force  $F_2$  issue de la raideur  $S_2$  ( $F_2 = \int_0^{h/R} S_2 dh/R$ ) et modélisant la résistance progressive à la compression, en fonction de  $\rho$ , pour trois situations : (a)  $\rho_{ij}^0 < \rho_0^{\min}$ , (b)  $\rho_0^{\min} < \rho_{ij}^0$ , les sphères sont initialement en contact, (c)  $\rho_{ij}^0 < \rho_0^{\min}$ , mais le contact apparaît à une densité relative locale supérieure à  $\rho_0^{\min}$ .

L'équation (2.9) fait intervenir un certain nombre de coefficients dont les valeurs sont calées pour correspondre aux deux essais de calibration cités plus haut (essai de

6. La force est nulle lorsqu'il n'y a pas contact, mais la raideur est non nulle.

compression simple et de compression isotrope) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1(m) = 0,97 - 0,58n \\ \beta_1(m) = 1,75 \left(1 + \frac{n}{2}\right) \\ \gamma_1(m) = \frac{15}{1 + 3n} - 4 \\ \delta_1 = 8 \\ \alpha_2(m) = 15 \left(1 - \frac{n}{2}\right) \\ \beta_2 = 2 \\ \gamma_2 = 1 \\ \rho_0^{min} = 0,524 \end{array} \right. \quad (2.11)$$

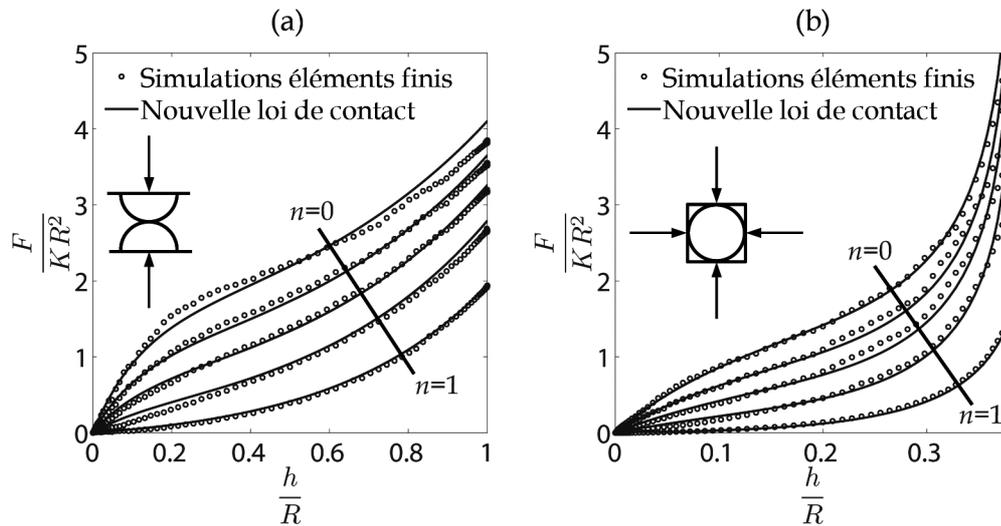


FIGURE 2.11 – Ajustement de la loi de contact définie par l'équation (2.9) pour  $n = 0, 1; 0,24; 0,5; 1$ . (a) Compression simple, (b) Compression isotrope d'une cellule cubique simple.

La valeur de  $\rho_0^{min}$  ( $\rho_0^{min} = 0,524$ ) correspond à la densité initiale de l'empilement cubique simple qui sert de référence. Il est possible de faire un autre choix, mais il convient de remarquer que si l'on change cette valeur, il faut également changer la valeur des autres paramètres relatifs à  $S_2$ , à savoir  $\alpha_2, \beta_2$  et  $\gamma_2$ .

Il est également possible de caler les coefficients (2.11) sur n'importe quel autre essai qui fasse intervenir l'interaction entre contacts voisins et l'effet de l'incompressibilité. Le choix de l'essai est un compromis entre la simplicité de mise en oeuvre et la pertinence du chargement de l'essai par rapport à un chargement réaliste (i.e., qui se rapproche du

chargement subi par une particule dans un empilement aléatoire réaliste).

Le résultat du calage est illustré par la Figure 2.11. Cette Figure illustre également le choix d'une somme de deux exponentielles pour exprimer le terme  $S_1$ , afin de reproduire le changement de courbure observé autour de  $h/R = 0,5$  pour la compression simple (Figure 2.11a).

## 2.3 Validation locale de la loi haute-densité.

### 2.3.1 Résultats sur un arrangement cubique simple et comparaison avec les résultats de Storåkers.

La Figure 2.12 montre, dans le cas de l'alliage de plomb ( $n = 0,24$ ), la force de contact pour les trois chargements de la Figure 2.6, calculée par une simulation éléments finis, par la loi haute-densité, et par les équations de Storåkers *et al.* (1997) présentées au paragraphe 1.3.1. Dans le cas de la loi haute-densité, on considère que  $\rho = 0$  (ce qui correspond à une sphère dans une cellule de Voronoi dont le volume est infini).

La Figure 2.12a a pour abscisse le déplacement relatif  $h_{ij}/R$ . Dans cette représentation, le modèle de Storåkers ne différencie pas la compression simple des compressions isotrope ou en matrice. La Figure 2.12b a pour abscisse la densité relative. La compression simple ne peut alors pas être représentée (puisque la densité relative n'évolue pas pour ce chargement). La loi haute-densité reproduit correctement les trois chargements.

Si l'on ne regarde que la compression isotrope de la cellule cubique simple, on constate que le modèle de Storåkers reproduit approximativement les résultats des simulations par éléments finis jusqu'à une densité relative  $\rho \simeq 0,9$  ( $h/R \simeq 0,33$ ). Au-delà, la force augmente en raison de l'incompressibilité du matériau et de l'interaction entre les contacts, ce que le modèle de Storåkers ne prend pas en compte.

En revanche, le modèle de Storåkers ne reproduit correctement ni la compression simple, ni la compression en matrice de la cellule cubique simple. En particulier, il surestime très nettement la force correspondant à la compression simple à partir de  $h/R \simeq 0,1$ . La force correspondant à la compression simple peut être considérée comme la force associée à des contacts indépendants. Or, même dans ce cas, le modèle de Storåkers n'est valide que pour des petits déplacements relatifs. C'est en fait la surestimation de la force de compression simple qui permet au modèle de Storåkers de reproduire correctement la compression isotrope jusqu'à la densité relative de 0,9. En revanche, cela ne fonctionne pas bien pour la compression en matrice parce que dans ce cas, l'effet de l'interaction des contacts et de l'incompressibilité plastique ne se fait sentir que tard (i.e. pour des déplacements relatifs importants), de sorte que le modèle de Storåkers surestime déjà beaucoup

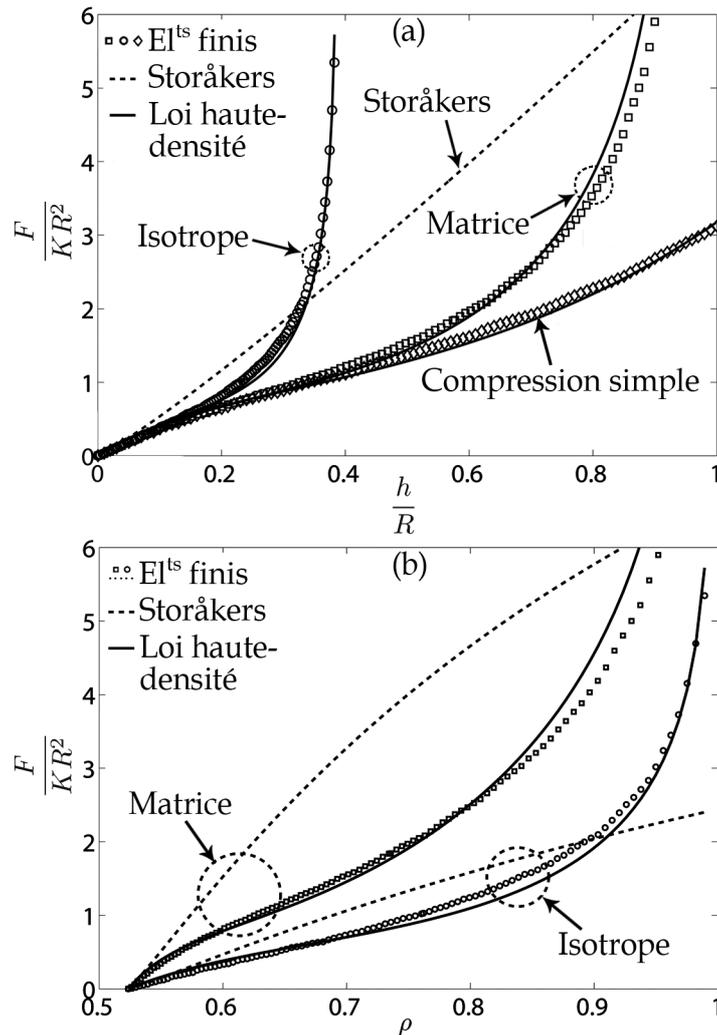


FIGURE 2.12 – Force de contact pour une cellule cubique simple, en compression simple, isotrope et en matrice : (a) en fonction du déplacement relatif, (b) en fonction de la densité relative.

la force. Partant de ces constats, il est intéressant de donner quelques éléments supplémentaires de comparaison entre le modèle de Storakers et les résultats des simulations par éléments finis.

Ainsi la Figure 2.13 montre encore la force de contact donnée par les trois modèles (éléments finis, loi haute-densité et Storakers), mais uniquement pour la compression simple, et pour trois valeurs différentes du paramètre matériau  $n$  ( $n = 0; 0,24; 0,6$ ). Il est possible alors de voir que le modèle de Storakers fournit des résultats d'autant plus proches de ceux obtenus par éléments finis que  $n$  est grand.

Néanmoins, pour  $n = 0$  et  $n = 0,24$ , le modèle de Storakers surestime très nettement la

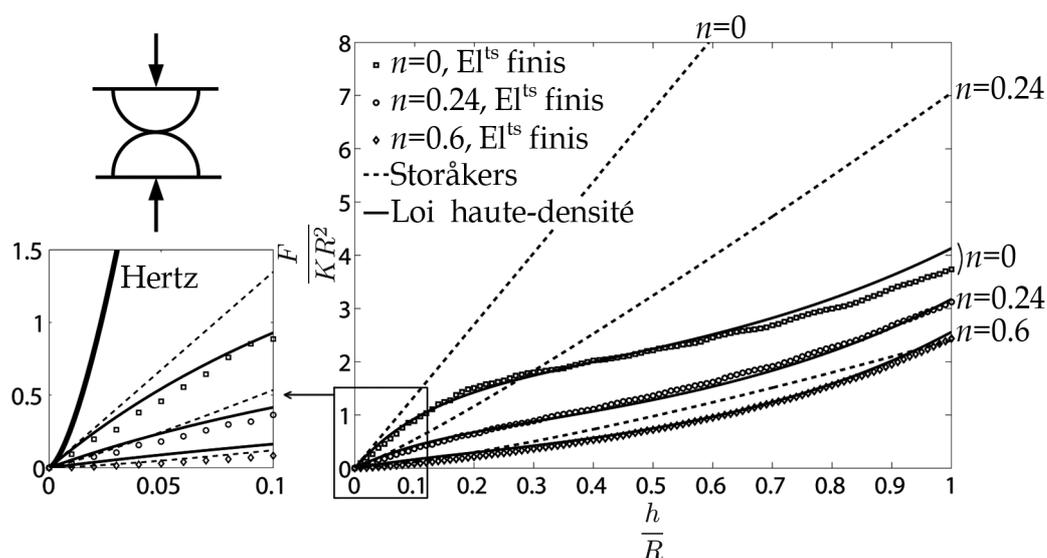


FIGURE 2.13 – Comparasion des forces de contact en compression simple, d’après les simulations par éléments finis, la loi haute-densité et le modèle de Storåkers.

force de contact lorsque  $h/R$  devient supérieur à 0,1 environ. Pour de petits déplacements relatifs, la prédiction du modèle de Storåkers est tout à fait en accord avec les résultats des calculs par éléments finis quel que soit  $n$ . Ces résultats figurent déjà partiellement dans les travaux de Mesarovic et Fleck (2000), mais leurs résultats sont limités à des valeurs de  $h/R$  de l’ordre de 0,2.

La Figure 2.14 montre l’évolution de la surface de contact et de la pression moyenne sur la surface de contact (i.e., la force de contact résultante divisée par la surface de contact) en compression simple. La loi haute-densité n’est pas présente sur cette figure, tout simplement parce qu’elle ne propose pas de description de la surface de contact.

On peut ainsi vérifier que dans ce cas également, les résultats du modèle de Storåkers sont corrects quel que soit  $n$  pour les faibles valeurs de  $h/R$ ; mais pour  $n = 0$  et  $n = 0,24$ , ils s’écartent sensiblement des résultats des simulations par éléments finis lorsque  $h/R$  augmente. La surface de contact est ainsi surestimée, ainsi que la pression de contact.

On remarque en particulier que pour un matériau parfaitement plastique ( $n = 0$ ), le modèle de Storåkers prédit une pression de contact constante et égale à  $3K$ . Les simulations par éléments finis prédisent quant à elles que la pression de contact diminue depuis environ  $3K$  jusqu’à  $K$ . L’explication de ce comportement est clairement à chercher dans la modification de la forme de la sphère par déformation plastique. La pression moyenne de contact se rapproche d’autant plus de  $K$  que la sphère déformée par compression simple

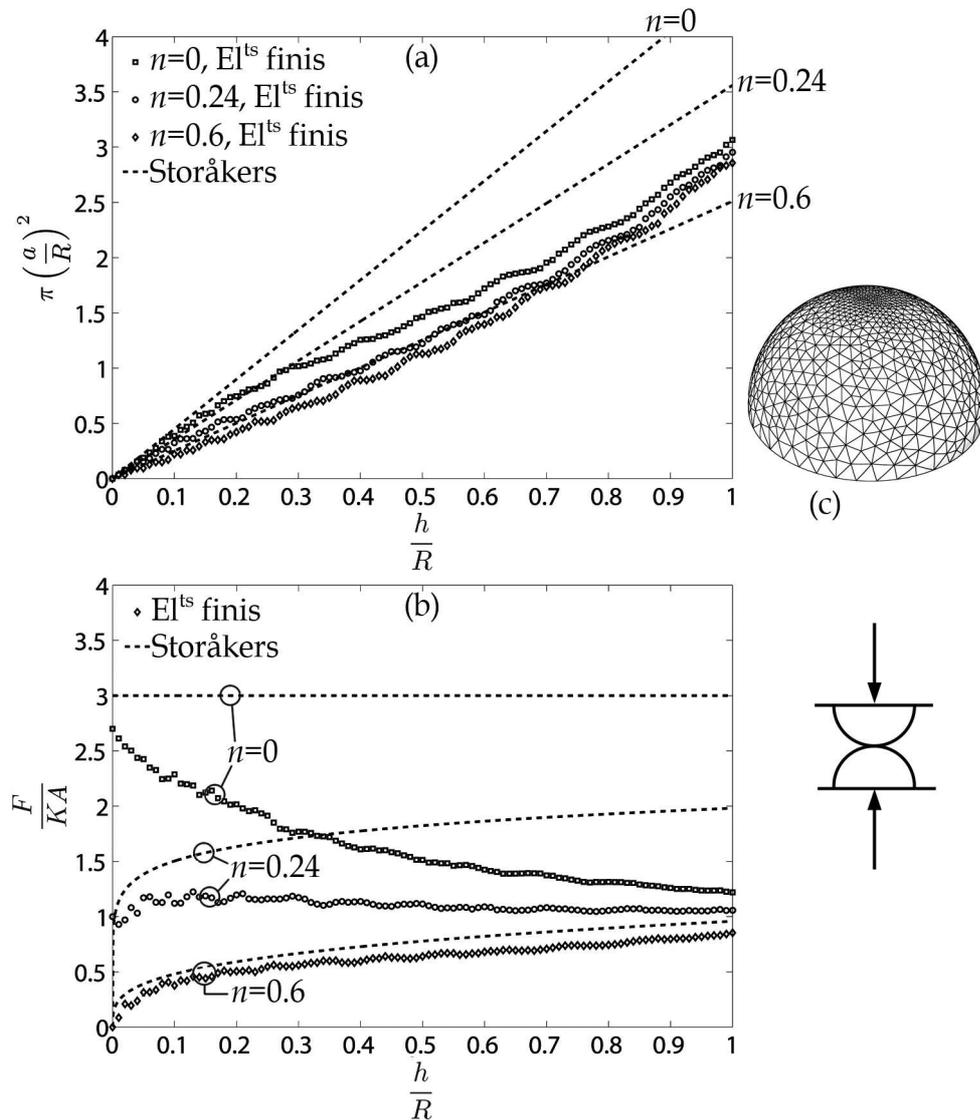


FIGURE 2.14 – Comparaison entre les résultats de simulations par éléments finis et le modèle de Storåkers pour l’essai de compression simple : (a) surface de contact, (b) pression moyenne sur la surface de contact. Un maillage plus fin est adopté pour une meilleure description des surfaces de contact (c).  $a$  est le rayon de contact et  $A$  la surface de contact ( $A = \pi a^2$ ).

ressemble à un cylindre dans lequel la contrainte uniaxiale est homogène et égale à  $K^7$ .

Ceci met en évidence l’importance de certaines hypothèses formulées dans Hill *et al.* (1989); Biwa et Storåkers (1995) ou Storåkers *et al.* (1997), et rappelées au paragraphe

7. Pour le matériau parfaitement plastique ( $n = 0$ ),  $\sigma_Y = K$  (cf. Chapitre 1, équation (1.29)),  $\sigma_Y$  étant la limite élastique courante (cf. Chapitre 1, §1.2.2).

1.3.1 de la présente thèse<sup>8</sup>. L'hypothèse des petits déplacements n'est donc pas du tout valide pour les amplitudes de déplacement imposées ici. Dans le cas des cellules cubiques simples, l'amplitude de  $h/R$  imposée est de l'ordre de 0,4 pour la compression isotrope, et 1 pour la compression en matrice. Or, pour  $h/R = 0,2$ , si l'on se fie aux résultats des simulations par éléments finis, les prédictions du modèle de Storåkers sont déjà critiques (Figures 2.13 et 2.14). Nous discuterons plus loin, au paragraphe 2.3.3 concernant les empilements aléatoires, l'amplitude des déplacements relatifs qu'il est raisonnable de considérer dans le cadre de la compression des poudres à haute densité relative.

Ces résultats montrent qu'il existe des configurations particulières pour lesquelles le modèle de Storåkers n'est pas valide. C'est le cas de la compression en matrice d'un arrangement cubique simple. Néanmoins cette configuration particulière n'est pas représentative d'une sphère dans un empilement aléatoire, en raison du nombre des contacts et de leur répartition. Ainsi, pour poursuivre la validation de la loi haute-densité, nous laissons momentanément de côté le modèle de Storåkers, car ses résultats ne présentent pas d'intérêt direct pour notre analyse, jusqu'à l'étude des empilements aléatoires. Cette discussion sur la validité du modèle de Storåkers pourra alors être reprise sur la base de configurations plus réalistes.

### 2.3.2 Détection du contact à haute densité relative : exemple d'une cellule cubique centrée.

L'arrangement cubique centré (cf. Figure 2.2b) est un arrangement un peu plus réaliste que l'empilement cubique simple. Il permet toutefois des temps de calcul très rapides. Dans cette configuration, chaque sphère possède 8 contacts dans l'état initial. Lors de la compression, 6 contacts supplémentaires apparaissent (Figures 2.15c et 2.17). Pour étudier la manière dont la loi haute-densité reproduit les efforts de contact, nous allons tout d'abord étudier un premier modèle constitué d'une sphère comprimée par 14 plans rigides qui correspondent à la configuration des contacts dans un arrangement cubique centré (Figure 2.15a).

Le chargement appliqué à ce modèle est une compression isotrope, afin de simplifier la simulation : de cette manière il n'est pas nécessaire de piloter une rotation des plans de contact. La Figure 2.15b montre que la loi haute-densité reproduit bien les forces données par la simulation par éléments finis dans le cas des contacts initiaux. Elle s'avère ainsi capable de reproduire convenablement des efforts de contacts qui correspondent à des configurations et des chargements différents de la cellule cubique simple.

Néanmoins elle prédit une force nulle pour les contacts secondaires. Cela s'explique

---

8. En particulier, le rayon de la surface de contact est petit devant le rayon des sphères, de sorte que la sphère peut être considérée comme un demi-espace infini (Chapitre 1, §1.3.1). Avec cette hypothèse, la modification de la forme des sphères est clairement négligée.

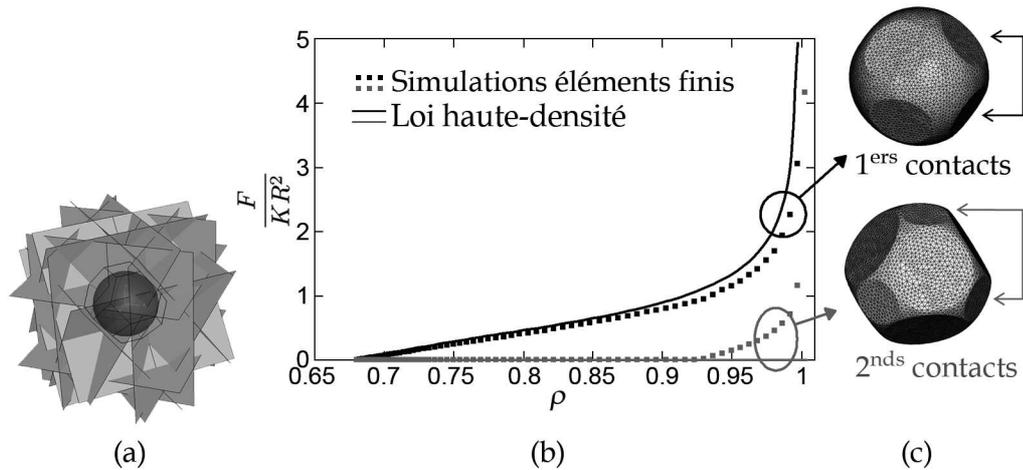


FIGURE 2.15 – Compression isotrope d'un arrangement cubique centré. (a) modèle utilisé pour simuler la compression d'une sphère, (b) forces de contact en fonction de la densité relative d'après la simulation par éléments finis et la loi haute-densité, (c) Visualisation des contacts.

par le critère de contact (2.6). En effet ce critère suppose les sphères non déformées : il n'y a contact que lorsque la distance centre à centre entre deux sphères est inférieure à la somme des rayons. Or la déformation des sphères provoque un écoulement du matériau par déformation plastique vers les directions qui restent libres. Cet écoulement de matière n'est pas négligeable en grandes déformations. Ainsi, un contact peut apparaître même si le critère (2.6) n'est pas respecté (Figure 2.16). Ainsi dans le cas de la Figure 2.15, le critère (2.6) prédit l'apparition du contact pour une densité relative qui serait supérieure à 1, de sorte que la force de contact n'est pas visible sur la Figure 2.15.

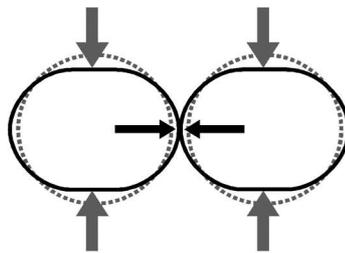


FIGURE 2.16 – Lorsqu'on ne prend pas en compte la déformation des particules, certains contacts dus à l'écoulement plastique du matériau dans les directions libres peuvent être ignorés ou détectés avec retard.

La loi haute-densité, lorsqu'elle est couplée au critère (2.6), n'est donc pas en mesure de prendre correctement en compte les contacts secondaires, qui apparaissent en cours de compression. Cependant il est possible de supposer qu'à l'échelle macroscopique, la somme des forces développées par les contacts secondaires, est petite devant la force

développée par les contacts initiaux. Cela s'explique par le fait que la surface attribuée à ces contacts est plus petite (Fischmeister et Artz, 1983).

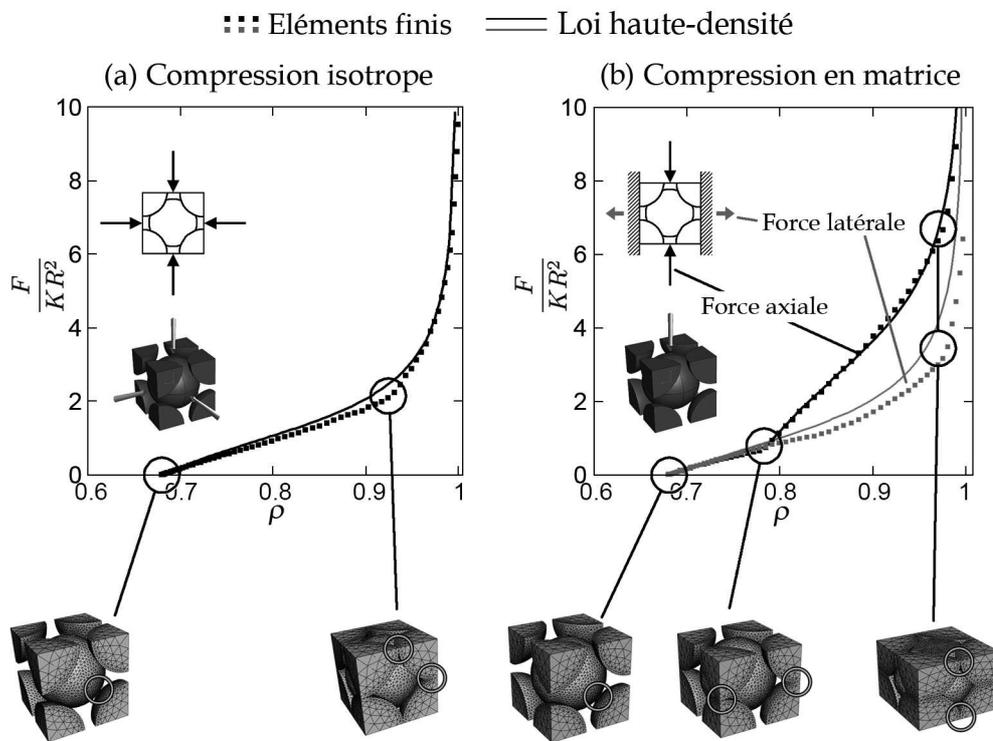


FIGURE 2.17 – Force résultante sur une cellule cubique centrée d'après la simulation par éléments finis et la loi haute-densité. (a) Compression isotrope, (b) Compression en matrice.

Pour estimer l'importance d'une bonne prédiction des contacts secondaires, d'autres simulations par éléments finis sont effectuées, avec un modèle qui prend en compte la cellule élémentaire complète d'un arrangement cubique centré, afin d'étudier les forces résultantes. Grâce à la simplicité de l'empilement cubique centré, les forces résultantes sur les parois de la cellule peuvent être calculées analytiquement au moyen de considérations géométriques simples. Les résultats de ce calcul analytique sont comparés aux simulations par éléments finis sur la Figure 2.17.

L'apparition des nouveaux contacts en cours de chargement se traduit par un changement brusque de raideur sur les courbes de la force résultante (cercles sur la Figure 2.17). La différence entre les forces calculées par les simulations par éléments finis et la solution analytique issue de la loi haute-densité est relativement faible. Ceci nous incite à supposer que le critère de contact (2.6) est suffisant, car :

- Soit le nouveau contact est créé tôt dans le chargement, au quel cas le critère (2.6) est suffisamment précis (c'est le cas pour les contacts secondaires de l'arrangement cubique simple en compression en matrice, Figure 2.17b) ;

- Soit il est créé plus tard ; alors son influence sur l'effort global reste faible, comparée aux forces développées par les contacts précédemment établis.

À titre de remarque, il est possible de prendre partiellement en compte le phénomène d'avance des contacts dû à l'écoulement plastique. Fischmeister et Artz (Arzt, 1982; Fischmeister et Artz, 1983), dans leur modèle, comparent la sphère à sa cellule de Voronoi, afin de redistribuer la matière qui dépasse de la cellule pour augmenter le diamètre de la sphère tout en gardant le même volume (Figure 2.18). Une telle méthode permettrait d'améliorer la prise en compte des nouveaux contacts par une description approchée de la déformation des sphères. Néanmoins, la suite du présent travail se contentera de l'hypothèse énoncée ci-dessus ; à savoir que le critère (2.6) est suffisant. La suite de la validation de la loi haute-densité permettra de se faire une opinion sur cette hypothèse.

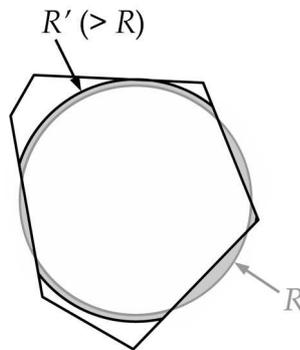


FIGURE 2.18 – D'après Arzt (1982), le volume des calottes sphériques qui dépassent de la cellule de Voronoi peut être estimé, puis le rayon de la sphère augmenté de telle sorte que le volume occupé par la sphère à l'intérieur de la cellule soit égal au volume initial de la sphère.

### 2.3.3 Force de contact dans une configuration aléatoire.

#### Dispersion des efforts de contact dans un cas aléatoire.

Afin de reconstituer la situation d'une sphère dans un empilement aléatoire, un autre modèle éléments finis est créé. Il s'agit encore d'une sphère comprimée par des plans rigides, mais ces plans sont disposés de manière irrégulière. Pour simplifier le post-traitement, les plans rigides sont translatés radialement vers le centre de la sphère, l'amplitude du déplacement étant proportionnelle à la distance initiale entre le centre et le plan. Aucune rotation n'est imposée à aucun plan. Ceci suppose que le « centre » de la

sphère reste à la même place tout au long du chargement<sup>9</sup>. Ce chargement est à rapprocher d'une compression isotrope d'un empilement aléatoire, mais sans réarrangement.

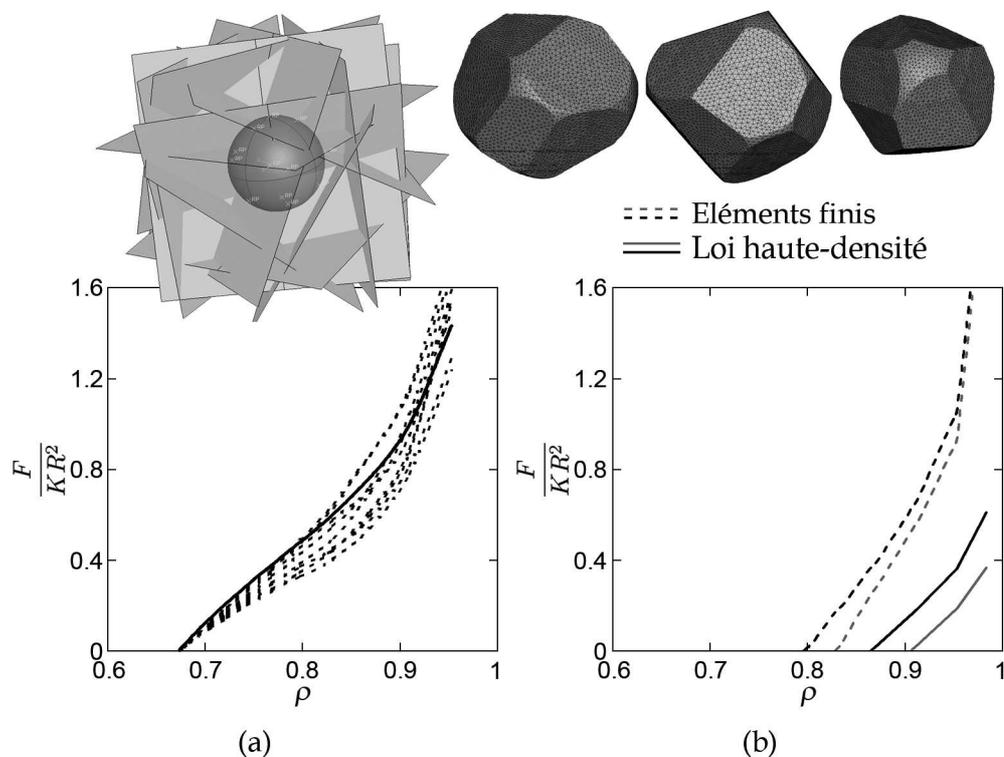


FIGURE 2.19 – Forces de contact en fonction de la densité relative d'après la simulation par éléments finis et la loi haute-densité, pour une sphère dans une configuration aléatoire. (a) Contacts initiaux, (b) contacts secondaires.

Il est également supposé que la densité relative locale moyenne, introduite dans la loi haute-densité (cf. Equation (2.9)) est égale à la densité relative locale (non moyenne) de la sphère modélisée. Ceci suppose que toutes les sphères voisines ont la même densité relative locale.

Ce modèle comprend 14 plans de contact, parmi lesquels 12 sont initialement en contact avec la sphère, et deux sont des contacts secondaires, qui apparaissent pendant le chargement. Pour les 12 contacts initiaux, l'évolution de  $h$  et de  $\rho$  est rigoureusement la même<sup>10</sup>. Par conséquent, la loi haute-densité prédit la même évolution de la force de

9. La notion de « centre » n'a plus de sens à partir du moment où la sphère déformée présente une géométrie asymétrique. Le *centre* est ici assimilé à la particule qui se déplace dans le cadre d'une simulation par éléments discrets, c'est-à-dire le centre de gravité de la particule indéformable, sur lequel s'appliquent les forces. Ce centre est délicat à définir avec la méthode des éléments finis, d'où l'intérêt de ce type d'hypothèse, qui simplifie considérablement la démarche.

10. Le déplacement  $h$  imposé est proportionnel à la distance initiale entre le centre et le plan de contact. Cette distance est identique pour tous les contacts initiaux (égale à  $R$ ).  $\rho$  est la densité relative locale de la sphère, identique pour tous les contacts puisqu'on ne prend en compte aucune sphère voisine.

contact (cf. Equation (2.9)). La Figure 2.19a montre l'évolution des forces de contact pour les 12 contacts initiaux en fonction de la densité relative, ainsi que la prédiction de la loi haute-densité. On peut observer sur ces résultats :

- que la dispersion des forces de contact, due aux singularités géométriques propres à chaque contact<sup>11</sup>, est relativement faible ;
- que l'évolution de la force prédite par la loi haute-densité est proche des résultats des simulations par éléments finis.

La Figure 2.19b représente l'évolution des forces de contact pour les deux contacts secondaires, qui apparaissent au cours du chargement. On retrouve alors le phénomène décrit au paragraphe 2.3.2, et illustré par la Figure 2.16 : le critère (2.6) génère un retard dans la déclaration des contacts. Les nouveaux contacts apparaissent ici à une densité relative locale de 0,87 et 0,91, contre 0,8 et 0,83 pour la simulation par éléments finis.

### **Empilement de 32 sphères.**

Les simulations présentées au paragraphe 2.3.2 et 2.3.3 nous ont permis de mettre en évidence le retard dans la déclaration du contact et la dispersion des efforts de contact due à des phénomènes encore plus locaux que l'échelle du contact. Il est donc grand temps de se pencher sur une situation un peu réaliste. Dans ce but, un empilement aléatoire de 32 sphères identiques a été réalisé par Jean-François Jérier (Jérier, 2010). Cet empilement a ensuite été construit dans ABAQUS afin d'effectuer des simulations par la méthode des éléments finis multi-particules (MPFEM) présentée au paragraphe 1.3.3. Il est alors soumis à une compression isotrope et une compression en matrice. L'empilement dans son état initial, après compression isotrope et après compression en matrice, est représenté sur la Figure 2.20a, b et c, respectivement. Le temps de calcul qui a été nécessaire pour réaliser ces simulations avec la MPFEM est de l'ordre de 1,5 jour pour la compression isotrope, et 4,5 jours pour la compression en matrice<sup>12</sup>.

Dans une première approche, nous avons choisi deux sphères en contact parmi les 32 sphères de l'empilement. Ces sphères ne sont pas choisies au hasard. Elles se situent dans la région centrale de l'empilement et n'ont pas de contact avec les parois, afin d'éviter d'éventuels effets de bord. Elles sont initialement en contact, afin de se soustraire au problème de détection du contact décrit au paragraphe 2.3.2. Dans le cas de la compression

11. L'évolution des paramètres  $h$  et  $\rho$  étant identique pour chaque contact, cette dispersion n'est due ni à l'incompressibilité plastique, ni à l'indentation. Elle ne peut donc être prise en compte qu'en rajoutant un ou plusieurs paramètres à la loi de contact. La dispersion des contacts donne donc un aperçu de l'erreur obtenue lorsqu'on se limite aux deux paramètres  $h$  et  $\rho$ .

12. Ces temps correspondent à des calculs en parallèle sur 4 processeurs Intel Xeon X7350 à 2.93 GHz.

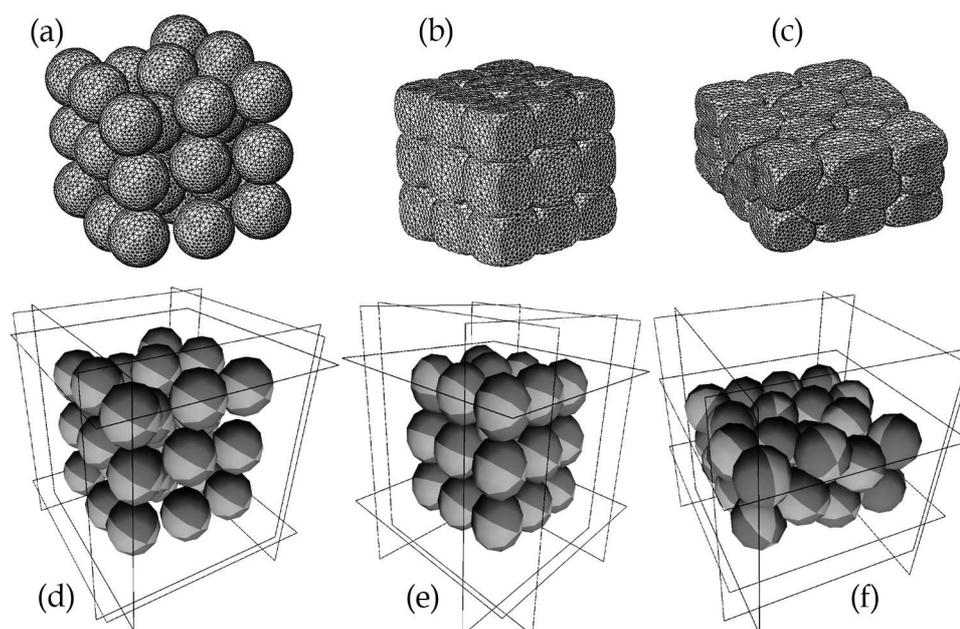


FIGURE 2.20 – Échantillon de 32 sphères monodisperses, modélisé pour la MPFEM (a,b,c) et pour la DEM (d,e,f). (a,d) Échantillon non déformé, (b,e) après compression isotrope, (c,f) après compression en matrice.

isotrope, les positions des noeuds centraux<sup>13</sup> de chacune des 32 sphères sont relevées. Ces données permettent ensuite de définir un déplacement relatif  $h_{ij}$  et de construire les cellules de Voronoi des deux sphères, afin d'obtenir une densité relative locale  $\rho_{ij}$ , à partir des simulations MPFEM.

Cette approche suppose qu'on peut assimiler le centre d'une sphère (au sens de la méthode des éléments discrets) au noeud central d'une sphère maillée dans la MPFEM. Nous considérons que ceci permet une bonne approximation de l'évolution de la densité relative locale. Il est ainsi possible d'étudier les prédictions de la loi haute-densité au niveau d'un contact local, et dans une configuration réaliste, sans faire intervenir de simulations avec la méthode des éléments discrets. Ainsi la cinématique décrite par la MPFEM est conservée, et utilisée comme donnée d'entrée pour la loi haute-densité. La comparaison des résultats s'affranchit alors de tous les paramètres qui ne dépendent pas directement de la loi haute-densité (loi de frottement, etc....).

Avec ces hypothèses sur le calcul de  $\rho_{ij}$  et  $h_{ij}$ , l'évolution de la force de contact entre les deux sphères choisies est représentée sur la Figure 2.21 en fonction de  $\rho_{ij}$  et  $h_{ij}$ , d'après la simulation MPFEM, la loi haute-densité et le modèle de Storåkers (Equation (1.39)).

Dans ce cas, le modèle de Storåkers surestime nettement la force de contact jusqu'à

13. i.e. pour chaque sphère, le noeud qui matérialise le centre dans la configuration non déformée.

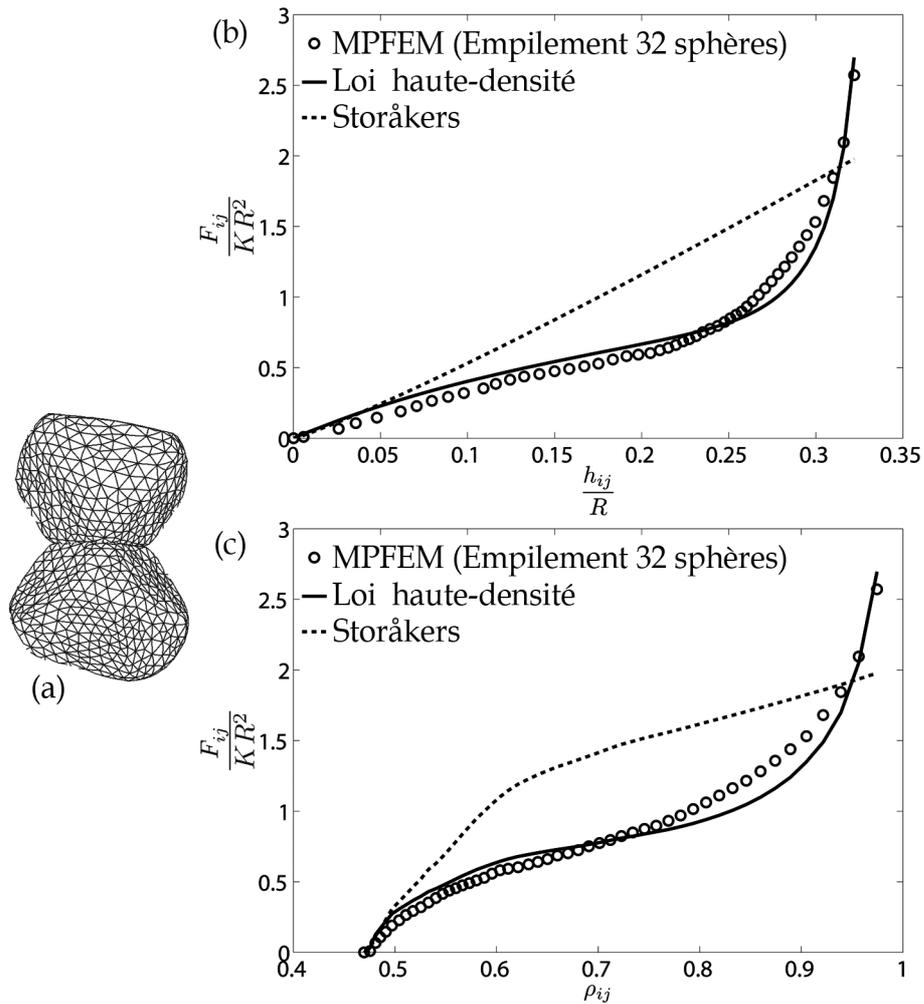


FIGURE 2.21 – Force de contact pour deux sphères choisies parmi les 32 de l'échantillon, pendant la compression isotrope : (a) en fonction du déplacement relatif, (b) en fonction de la densité relative locale.

$\rho_{ij} = 0,95$ . Au-delà de cette valeur, l'augmentation de la force de contact n'est pas prise en compte, de sorte qu'elle se retrouve sous-estimée. La loi haute-densité reproduit convenablement la force de contact jusqu'à  $\rho_{ij} = 0,98$ . Ainsi, même dans une configuration réaliste, il existe des situations pour lesquelles le modèle de Storåkers n'arrive pas à reproduire la force de contact au niveau local, et ce même pour des densités relatives inférieures à 0,8.

Le déplacement relatif  $h_{ij}/R$  entre les deux sphères choisies est d'environ 0,33. En suivant de la même manière le déplacement des noeuds centraux des sphères dans l'échantillon de 32 sphères, il est possible de se faire une idée des valeurs de  $h/R$  à considérer dans la compression à haute-densité relative. Deux indicateurs ont été relevés pour les deux chargements (compression isotrope et en matrice) : la valeur moyenne  $h_{av}/R$  du

déplacement relatif, et sa valeur maximale  $h_{max}/R$ . Ces résultats révèlent que :

- Pour la compression isotrope :

À  $D = 0,98$ ,  $h_{av}/R = 0,28$  et  $h_{max}/R = 0,59$ .

À  $D = 0,8$ ,  $h_{av}/R = 0,21$  et  $h_{max}/R = 0,42$ .

- Pour la compression en matrice :

À  $D = 0,98$ ,  $h_{av}/R = 0,33$  et  $h_{max}/R = 1$ .

À  $D = 0,8$ ,  $h_{av}/R = 0,25$  et  $h_{max}/R = 0,73$ .

$D$  étant la densité relative globale de l'empilement, différente de la densité relative locale  $\rho$  des sphères. Ces valeurs, bien que prises dans le cas particulier d'un empilement de 32 sphères, qui n'est a priori pas représentatif d'un matériau réel, indiquent deux choses :

- Même pour une densité relative de 0,8, le modèle de Storåkers n'est plus strictement valide ; nous avons vu que son domaine de validité dépassait difficilement  $h/R = 0,15$  (Nous reviendrons encore au paragraphe 2.4.2 sur la validité du modèle de Storåkers).
- Il peut être nécessaire de prendre en compte des amplitudes de déplacement jusqu'à  $h/R = 1$ . La loi haute-densité, dans sa forme actuelle, est valide jusqu'à  $h/R = 1$ . S'il s'avérait que le domaine de validité en  $h/R$  pouvait être restreint, il serait alors éventuellement possible de simplifier sa forme, par exemple avec un terme  $S_1$  linéaire<sup>14</sup>.

### 2.3.4 Conclusion sur la validation locale de la loi haute-densité.

Dans ce paragraphe, nous avons comparé les prédictions de la force de contact du modèle de Storåkers et de la loi haute-densité aux résultats de simulations par éléments finis dans différentes configurations. La simplicité géométrique des arrangements périodiques a mis en avant les limites du modèle de Storåkers et quelques aspects de la modélisation de la compression à haute densité relative dans le cadre de la méthode des éléments dis-

14. La même remarque peut s'appliquer aussi au paramètre  $n$ , puisque les matériaux métalliques correspondant par exemple à  $n = 1$  n'existent pas. Néanmoins ici les courbes les plus fortement non-linéaires sont celles correspondant à  $n = 0$  (voir en particulier la Figure 2.11).

crets. Puis, l'étude de la compression d'un empilement aléatoire de 32 sphères a permis d'étudier la force de contact locale dans une situation plus réaliste. La suite naturelle de cette validation est donc d'implémenter la loi haute-densité dans un code d'éléments discrets et d'effectuer des simulations sur l'échantillon de 32 sphères, afin de comparer les résultats macroscopiques<sup>15</sup> observés sur l'échantillon avec les deux méthodes MPFEM et DEM.

## 2.4 Validation à l'échelle macroscopique<sup>16</sup>.

L'implémentation de la loi haute-densité dans le code d'éléments discrets open-source YADE (Kozicki et Donzé, 2008, 2009) fait partie des travaux de thèse de Jean-François Jérier (Jérier, 2010), avec la participation de deux permanents du laboratoire 3S-R, Vincent Richefeu et Bruno Chareyre. Cette partie rappelle l'implémentation de la loi haute-densité dans YADE et les principaux résultats de la comparaison DEM-MPFEM, qui sont exposés également dans Jérier (2010), Jérier *et al.* (2010a) et Harthong *et al.* (2010).

### 2.4.1 Implémentation de la loi haute-densité dans YADE.

La tessellation de Voronoi a été implémentée dans YADE en utilisant la librairie open-source Computational Geometry Algorithms Library (Boissonnat *et al.*, 2002, [www.cgal.org](http://www.cgal.org))<sup>17</sup>. Les cellules de Voronoi de l'empilement de 32 sphères sont représentées en Figure 2.22. Il est ainsi possible de définir la densité relative locale par le rapport du volume de la sphère sur le volume de sa cellule de Voronoi (cf. § 2.2.4 page 49).

Afin de prendre en compte les effets de l'élasticité, notamment pendant les phases de réarrangement, une partie élastique a été ajoutée à la loi haute-densité. Ainsi la force de contact est calculée avec une raideur différente suivant qu'on soit dans la phase plastique ou dans la phase élastique.

Néanmoins, les chargements appliqués étant des chargements purement monotones et compressifs, l'élasticité ne joue pas un rôle majeur dans le comportement de l'échantillon. C'est pourquoi il n'a pas été jugé utile de reproduire quantitativement le comportement élastique au contact. De plus, la raideur élastique étant par nature grande, elle nécessite

---

15. Le terme *macroscopique* ne se rapporte pas ici à l'échelle d'un matériau en poudre réel, mais seulement à l'échelle de l'échantillon. Cet échantillon de 32 sphères ne prétend pas être représentatif d'un matériau en poudre réel.

16. cf. note 15.

17. Voir Harthong *et al.* (2010) pour plus de détails. Je ne reproduis pas ici les détails en question car je n'en suis pas l'auteur.

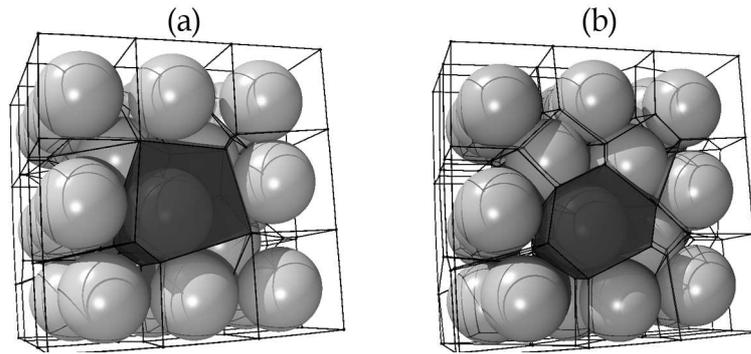


FIGURE 2.22 – Cellules de Voronoi de l’empilement de 32 sphères : (a) configuration initiale, (b) configuration déformée (compression en matrice).

un pas de temps beaucoup plus petit<sup>18</sup>.

Le temps de calcul est donc grandement réduit en diminuant artificiellement la raideur élastique. Par mesure de simplicité, cette raideur est supposée constante, et sa valeur est calculée en fonction du pas de temps souhaité. Le pas de temps est généralement choisi comme une fraction du pas de temps critique (cf. note 18)<sup>19</sup>.

On considère en quelque sorte que la raideur élastique physique est plus grande que la raideur qu’il est possible d’atteindre en fixant un incrément de temps raisonnable pour les simulations. La raideur normale élastique  $k_{el}^n$  utilisée alors comme raideur élastique est la plus grande raideur acceptable pour assurer la convergence avec l’incrément de temps fixé. Dans le cas de la loi haute-densité, la raideur plastique définie par l’équation (2.9) tend vers l’infini lorsque  $\rho_{ij}$  tend vers 1. Pour la convergence, il est donc nécessaire de la limiter également par la raideur élastique  $k_{el}^n$ , qui est la raideur maximale admissible (Figure 2.23).

Le comportement tangentiel des contacts est représenté également par une raideur élastique constante  $k_{el}^t$  calculée de la manière suivante :

$$k_{el}^t = 0,5 k_{el}^n \quad (2.12)$$

Cette raideur constante correspond à la déformation élastique du contact lorsqu’il y a adhérence. La force de contact tangentielle  $F_{ij}^t$  est une fonction linéaire du déplacement relatif  $h_{ij}$  jusqu’à ce qu’elle atteigne la valeur seuil  $fF_{ij}^n$  ( $F_{ij}^n$  étant la force de contact normale,  $f$  le coefficient de frottement également utilisé pour la MPFEM). Cette valeur seuil correspond à l’amorçage de la phase de glissement.

18. YADE étant basé sur un schéma de résolution explicite, le pas de temps est limité par le pas de temps critique (proportionnel à  $\sqrt{m/k}$  où  $m$  est la masse d’une particule et  $k$  la raideur).

19. Le pas de temps est théoriquement déterminé par la particule dont le pas de temps critique est le plus faible. En pratique, on prend une petite fraction d’un pas de temps critique approché pour obtenir de manière simple un pas de temps inférieur au plus petit pas de temps critique pendant toute la simulation.

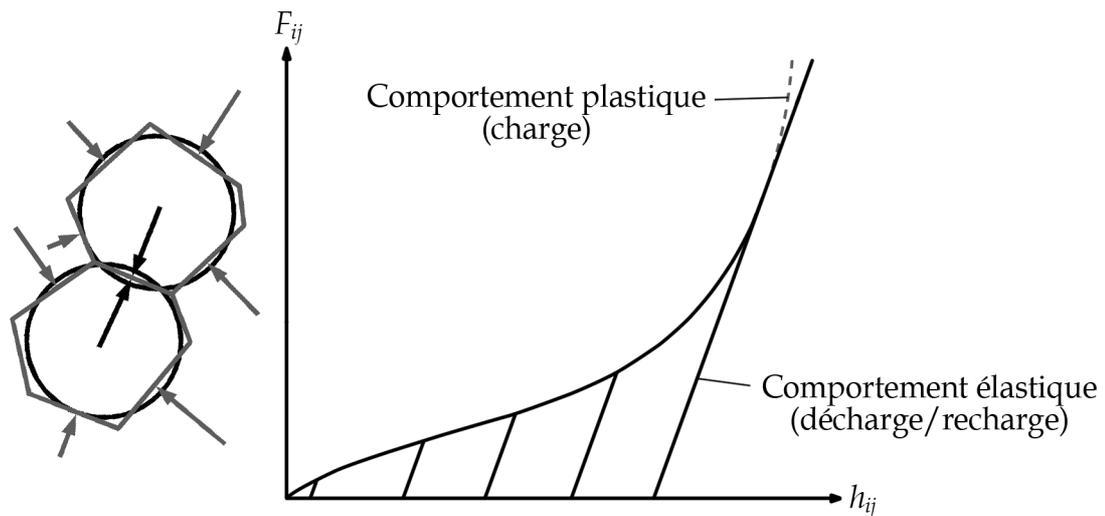


FIGURE 2.23 – Illustration de la loi haute-densité élastoplastique (la raideur élastique est fortement sous-estimée sur ce schéma pour en faciliter la lecture).

#### 2.4.2 Simulations par éléments discrets.

Les principaux aspects de l'implémentation des lois de contact dans YADE étant précisés dans le paragraphe 2.4.1, ce paragraphe s'intéresse à la comparaison des contraintes macroscopiques<sup>20</sup> sur l'échantillon de 32 sphères d'après les deux méthodes DEM et MPFEM. Toutes les simulations DEM ont été réalisées avec YADE par Jean-François Jérier (Jérrier *et al.*, 2010a).

On notera deux choses :

1. La loi haute-densité (ainsi que le modèle de Storåkers) ne modélise que la force normale de contact. La force tangentielle est calculée de manière très simple, et les rotations des sphères sont libres. Par conséquent, on ne s'attend pas à obtenir une cinématique identique entre les deux méthodes numériques DEM et MPFEM.
2. L'empilement de 32 sphères n'est pas représentatif d'un matériau réel (cf. note 15 page 69). Il ne s'agit que d'un échantillon qui possède le caractère aléatoire de l'empilement, et qui permet la comparaison des deux méthodes.

L'échantillon non déformé, après compression isotrope, et après compression en matrice avec les deux méthodes DEM et MPFEM, est représenté sur la Figure 2.20.

<sup>20</sup>. cf. note 15 page 69.

### Compression isotrope et en matrice de sphères de plomb.

Les Figures 2.24 et 2.25 présentent les résultats des simulations DEM et MPFEM sous la forme de courbes contrainte macroscopique-densité relative. La contrainte macroscopique est définie par la force résultante sur chaque paroi, divisée par la surface (actuelle) correspondante. Les paramètres matériau sont ceux du plomb ( $K = 20,5$  MPa,  $n = 0,24$ , et pour la MPFEM seulement  $E = 10\,000$  MPa,  $\nu = 0,435$ ), avec un coefficient de frottement  $f = 0,1$ .

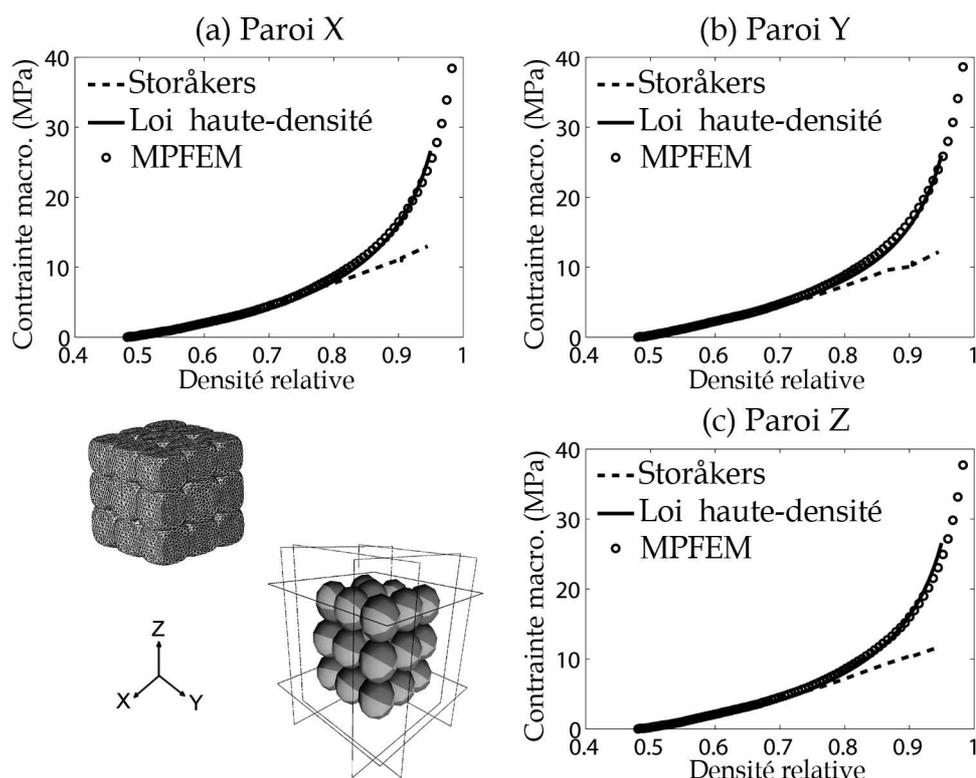


FIGURE 2.24 – Comparaison MPFEM-DEM des contraintes macroscopiques sur l'échantillon de 32 sphères en compression isotrope.

Dans le cas de la compression isotrope, les six parois se déplacent à vitesse identique. La Figure 2.24 montre que le comportement contrainte-densité relative est très similaire pour les deux méthodes numériques, jusqu'à une densité relative d'environ 0,8 pour le modèle de Storåkers, et jusqu'à la fin de la simulation DEM pour la loi haute-densité (densité relative autour de 0,95).

Pour la compression en matrice, les quatre parois latérales sont fixes, et l'échantillon est comprimé par le déplacement des deux parois axiales dans la direction Z. Les courbes contrainte-densité relative de la Figure 2.25 montrent une bonne correspondance des courbes MPFEM et DEM avec la loi haute-densité jusqu'à une densité relative de 0,95

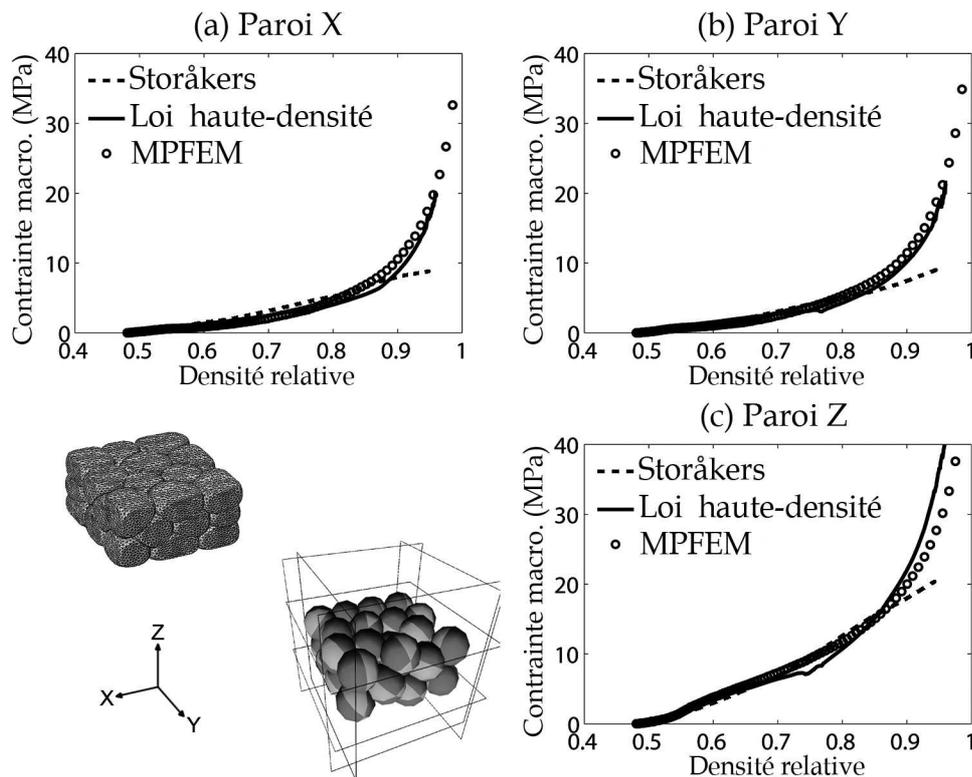


FIGURE 2.25 – Comparaison MPFEM-DEM des contraintes macroscopiques sur l'échantillon de 32 sphères en compression en matrice.

(avec une petite différence pour la paroi de normale Z). La DEM avec le modèle de Storåkers donne une prédiction correcte jusqu'à une densité relative de 0,9 environ.

Ces quelques courbes permettent de retrouver les résultats connus (Martin *et al.*, 2003) : le modèle de Storåkers fournit, sur un échantillon aléatoire et suffisamment grand, des résultats valables jusqu'à une densité relative comprise entre 0,8 et 0,9 environ. Selon l'explication couramment admise, cette densité relative de 0,8-0,9 marque la limite à partir de laquelle les interactions entre les différents contacts sur une même particule ne sont plus négligeables. Nous avons vu néanmoins que le modèle de Storåkers ne permettait pas toujours de reproduire la force de contact au niveau local, à l'intérieur de l'échantillon (Figure 2.21 page 67). Ceci est dû au fait qu'il n'est valide que pour de petits déplacements ( $h/R$  inférieur à 0,1 environ, cf. §2.3.1). Comme le montre la Figure 2.12 page 57, le modèle de Storåkers surestime la force de contact pour des contacts indépendants (i.e. pour la compression simple), de sorte qu'il arrive à prendre en compte de manière indirecte l'augmentation de la force liée à l'augmentation de la densité relative, du moins jusqu'à 0,8. Suivant les configurations, ce modèle reproduit plus ou moins bien les forces de contact (il les reproduit bien pour le cubique simple en compression isotrope, moins bien pour le cubique simple en matrice ou les deux sphères de la Figure 2.21 page 67). Les

résultats macroscopiques montrent qu'en moyenne, les forces sont bien reproduites, de sorte que le résultat global est correct jusqu'à la densité relative de 0,8-0,9.

### **Influence des paramètres matériau et du frottement.**

La Figure 2.26 montre l'influence du paramètre matériau  $n$  sur la contrainte macroscopique dans le cas de la compression en matrice (qui est plus contraignante que la compression isotrope, à cause des sollicitations déviatoires qui mobilisent plus le réarrangement et le frottement). Deux matériaux fictifs ont été définis en modifiant la valeur de  $n$  ( $n = 0,15$  et  $n = 0,6$ ) tout en conservant la valeur  $K = 20,5$  MPa. Le coefficient de frottement est  $f = 0,1$ . Ces résultats montrent, s'il en était besoin, que ce paramètre est bien pris en compte par la loi haute-densité, qui reproduit toujours correctement les contraintes macroscopiques de l'échantillon de 32 sphères. L'influence des paramètres  $K$  et  $R$  n'est pas étudiée car leur influence est relativement facile à prendre en compte au niveau de la loi de contact (cf. §2.2.5).

La modélisation du frottement dans YADE (cf. §2.4.1) peut être évaluée par rapport à celle utilisée pour la MPFEM (frottement de Coulomb appliqué aux nœuds des surfaces en contact) en comparant les résultats de simulations avec et sans frottement, avec les deux méthodes. La Figure 2.27 présente cette comparaison pour la compression en matrice. L'influence du frottement se traduit par une augmentation de la force axiale (suivant l'axe  $Z$ ) et une diminution des efforts latéraux (suivant les axes  $X$  et  $Y$ ). Le frottement limite donc la transmission de l'effort axial aux parois. Les deux méthodes DEM et MPFEM montrent la même tendance ; néanmoins cet effet est plus marqué avec la DEM.

Les résultats des Figures 2.24, 2.25 et 2.26 montrent qu'un modèle de contact établi pour la DEM à partir de la loi haute-densité permet d'obtenir des contraintes macroscopiques très proches de celles prédites par la MPFEM. Les deux chargements étudiés (compression en matrice et compression isotrope) sont assez représentatifs des chargements observés pour les procédés industriels (Frachon, 2002). Nous pensons que les résultats présentés ici peuvent être généralisables à des chargements caractérisés par des rapports contrainte déviatoire / contrainte moyenne proches.

Il semble ainsi que les contraintes macroscopiques sont très étroitement liées à la composante normale de la force de contact. Cependant, la contribution de la force de contact tangentielle devient de plus en plus importante lorsque le chargement devient plus déviatoire. Or dans les procédés industriels, les effets du frottement entre les grains et la matrice, ainsi que les singularités géométriques peuvent créer des états de contrainte localement très déviatoires. Ces singularités ont une importance particulière, car elles peuvent être à l'origine de problèmes de fissuration. Cette thèse n'aborde pas le problème de la fissuration – qui n'a pas beaucoup de sens en l'absence de cohésion – mais la

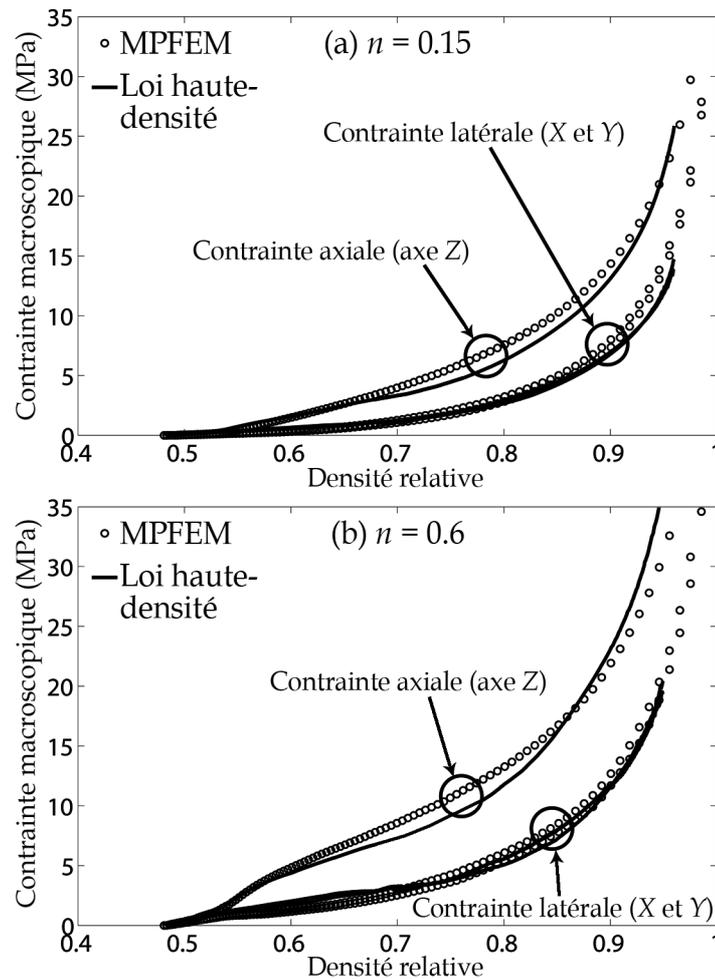


FIGURE 2.26 – Comparaison MPFEM-DEM des contraintes macroscopiques sur l'échantillon de 32 sphères en compression en matrice pour des matériaux différents.

correspondance entre les deux méthodes MPFEM et DEM pour des chargements très déviatoires n'est pas démontrée ici, et reste une question ouverte.

### 2.4.3 Quelques éléments pour aller plus loin.

En plus de servir de référence à ce travail de validation de la loi haute-densité, la MPFEM a l'avantage de décrire les surfaces de contact, ainsi que les contraintes et les déformations à l'intérieur des grains. L'échantillon de 32 sphères permet d'avoir une vision réaliste du type de chargement subi par les grains dans un massif de poudre. L'objet de ce paragraphe est d'utiliser les informations issues de la MPFEM pour comprendre quelques mécanismes qui interviennent dans les forces de contact entre les particules.

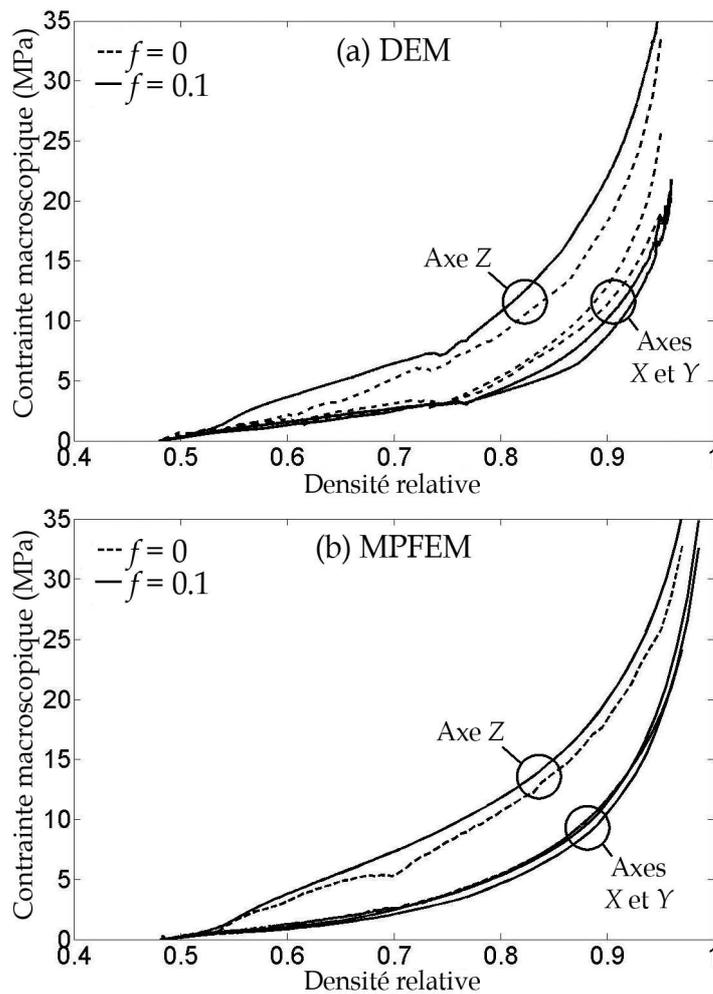


FIGURE 2.27 – Influence du frottement d'après les deux méthodes.

On pourra confronter ces mécanismes aux hypothèses qui ont permis d'établir la loi haute-densité, en vue d'une amélioration éventuelle.

### Interactions des contacts.

La question de l'interaction des contacts est un point central de la modélisation de la force de contact entre les particules avec la DEM. La difficulté de prendre en compte ces interactions explique, entre autres, les limites de l'application du modèle de Storåkers à la densification des poudres. La loi haute-densité propose de prendre en compte l'influence des interactions avec le voisinage des particules, au travers des cellules de Voronoi et de la densité relative locale. Néanmoins, elle décrit l'effet des interactions entre contacts

par le biais de l'augmentation de la résistance à la compression<sup>21</sup>, à travers l'ajustement des courbes sur les efforts développés pour un essai de calage (le cubique simple en compression isotrope). Il est donc intéressant d'utiliser les possibilités de la MPFEM pour comprendre mieux comment et quand les contacts interagissent. Toutefois, ce type de phénomène est très difficile à quantifier. Nous proposons ici une modeste analyse qualitative qui sera mise en parallèle avec les résultats précédents.

La Figure 2.28 montre l'évolution des surfaces de contact avec le chargement sur une particule choisie dans l'échantillon de 32 sphères (en compression isotrope). Elles sont mises en évidence par une carte de couleur de la pression de contact<sup>22</sup>. Six valeurs de la densité relative globale  $D$  de l'échantillon<sup>23</sup> sont retenues :  $D = 0,55; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9$  et  $0,98$ . Les surfaces de contact se touchent lorsque  $D$  atteint  $0,9$ .

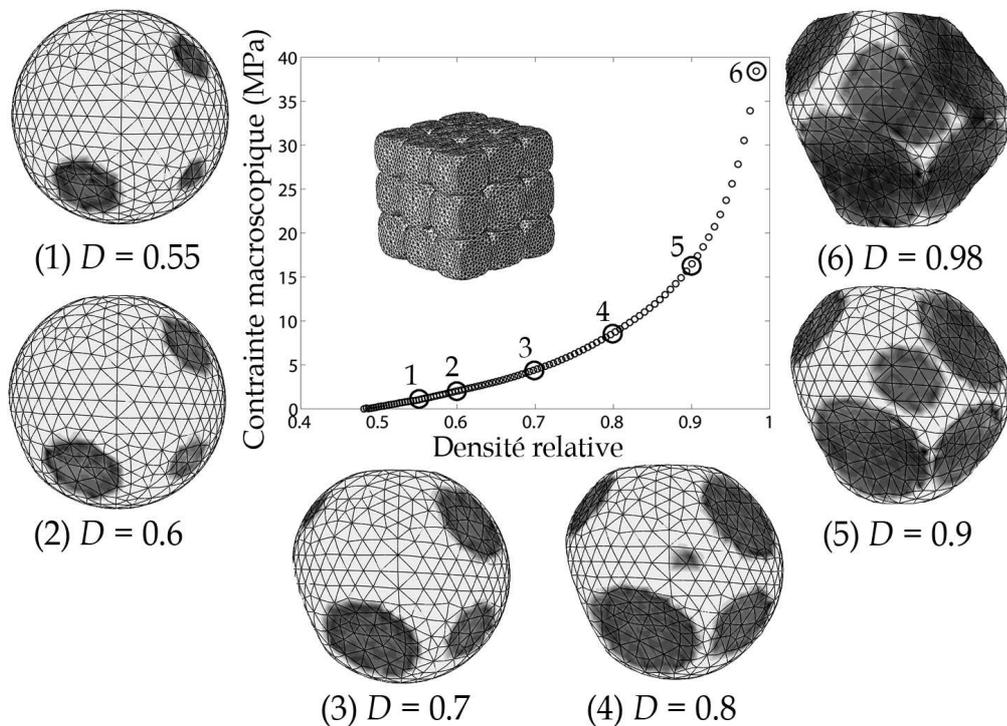


FIGURE 2.28 – Evolution des surfaces de contact sur une sphère parmi les 32 de l'échantillon, au cours de la compression isotrope.

Sur la Figure 2.29, deux indicateurs sont utilisés pour mettre en évidence les interactions entre contacts :

- La déformation plastique équivalente indique indirectement l'état d'écroutissement du

21. impliquée par l'incompressibilité plastique du modèle Von Mises.

22. la variable CPRESS dans ABAQUS (ABAQUS, 2009b).

23.  $D$  est la densité relative globale de l'échantillon, différente de la densité relative locale  $\rho_i$  de la sphère choisie.

matériau (en conséquence de l'équation (1.29)). Ainsi, plus la déformation plastique équivalente du matériau est élevée, plus la limite élastique courante est élevée. La contrainte nécessaire à la poursuite de la compression est donc logiquement plus élevée.

- La pression moyenne est un indicateur de la résistance à la compression. Au fur et à mesure que la densité relative augmente dans l'empilement, les particules se déforment de moins en moins librement. Cela se traduit par l'augmentation de la pression moyenne.

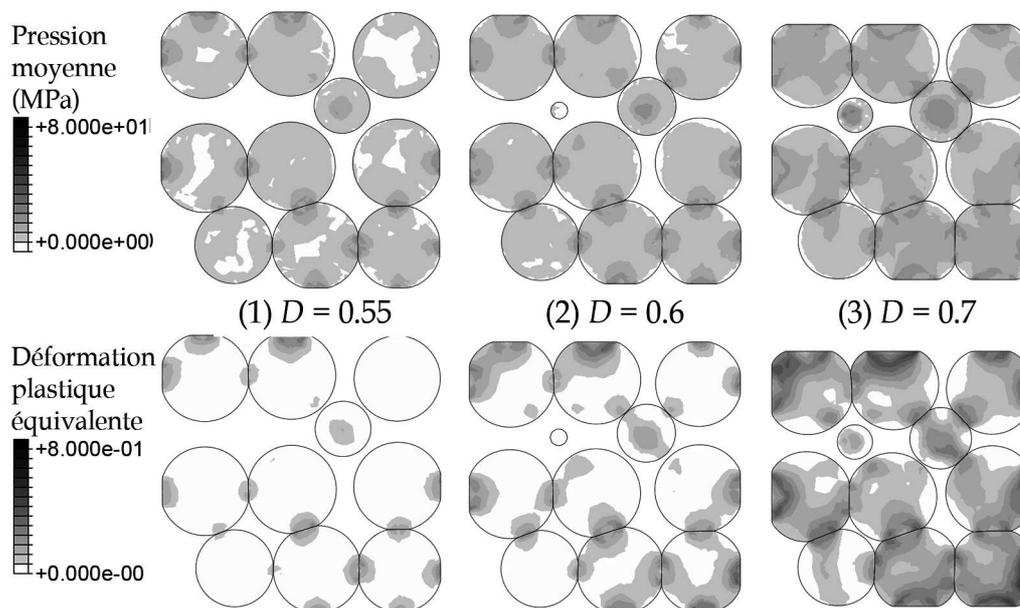


FIGURE 2.29 – Cartes de couleurs représentant l'évolution au cours de la compression, de la pression moyenne et de la déformation plastique équivalente à travers une coupe de l'échantillon. Faibles densités relatives.

La Figure 2.29 montre, dans une coupe de l'empilement de 32 sphères, l'évolution de ces deux quantités au cours de la compression isotrope. L'indépendance des contacts apparaît assez clairement à  $D = 0,55$ . Même si les cartes de couleur sont fortement influencées par le choix de l'échelle, elles illustrent ici assez bien le fait que les contraintes et les déformations sont localisées autour des zones de contact. À  $D = 0,6$ , pour certains contacts situés près des bords de l'échantillon, les zones déformées plastiquement autour des contacts commencent à se rejoindre. À  $D = 0,7$ , à peu près tout le matériau à l'intérieur des sphères est déformé plastiquement. L'interaction des contacts se traduit par des « ponts » de matériau déformé plastiquement entre les contacts voisins. De même, des ponts de pression moyenne apparaissent. La pression moyenne commence à augmenter au centre des particules ; signe que le chargement n'est plus localisé à proximité des

contacts, et que le matériau situé à l'intérieur des sphères participe autant à la réponse de l'échantillon que les contacts.

Ce résultat est à rapprocher des observations faites sur la Figure 2.6, sur laquelle on observe, pour l'arrangement cubique simple, que la différence entre la courbe de compression simple et la courbe de compression isotrope devient nette autour de  $h/R \simeq 0,18$  ( $D = 0,695$ ), et pour la compression en matrice, la différence apparaît pour  $h/R \simeq 0,50$  ( $D = 0,698$ ).

Ces résultats suggèrent que l'interaction des contacts devient sensible avant  $D = 0,7$ ; c'est le cas pour la cellule cubique simple en compression en matrice et isotrope; c'est encore le cas pour l'échantillon de 32 sphères en compression isotrope. La limite couramment admise de 0,8 (Martin *et al.*, 2003) ou 0,9 (Fischmeister et Artz, 1983) nous semble donc surestimée. Dans le cas du modèle de Storåkers, nous avons vu que la limite de l'interaction des contacts est artificiellement repoussée par la surestimation de la force de contact, qui permet d'obtenir des résultats valides jusqu'à une densité relative variant entre 0,8 et 0,9 suivant les cas.

### Haute densité relative.

Nous avons interprété l'augmentation de la force de contact liée à l'interaction des contacts par deux phénomènes. L'un est l'écroutissement du matériau des grains, l'effort nécessaire à la déformation plastique étant plus important lorsque les contacts sont proches (ce que Fischmeister et Artz (1983) appellent « écroutissement contraint »). L'autre est la résistance à la compression : au fur et à mesure que les pores autour des sphères disparaissent, la sollicitation appliquée localement (à l'intérieur des grains) contient une part de plus en plus grande de pression isotrope. L'incompressibilité plastique du matériau constitutif des sphères cause alors une augmentation des efforts de contact. Les deux phénomènes ont une même cause : la disparition progressive des porosités dans lesquelles le matériau peut s'écouler.

La Figure 2.30 est identique à la Figure 2.29, mais pour des densités relatives plus élevées, de 0,8, 0,9 et 0,98. A ce stade, le matériau des grains est écrouti dans sa quasi-totalité. La pression moyenne augmente, seules de petites zones autour des pores sont en traction<sup>24</sup>. Ces résultats montrent que la pression moyenne se répartit de manière relativement homogène. La déformation plastique est par contre très hétérogène, et plus

---

24. On observe des sollicitations où la pression moyenne est négative à proximité des surfaces « libres » autour des pores (en blanc sur la Figure 2.30), et ce même à  $D = 0,98$ . Cela peut sembler surprenant dans un chargement à très forte pression de confinement, mais s'explique par l'état de traction du matériau poussé vers les espaces libres (les pores).

importante sur les bords<sup>25</sup>.

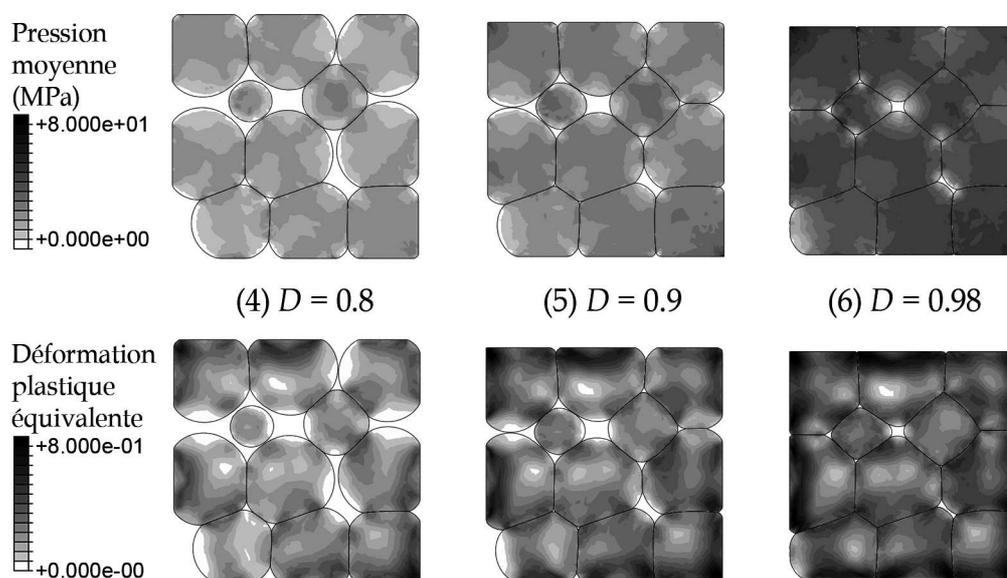


FIGURE 2.30 – Cartes de couleurs représentant l'évolution au cours de la compression, de la pression moyenne et de la déformation plastique équivalente à travers une coupe de l'échantillon. Hautes densités relatives.

Les Figures 2.29 et 2.30 montrent que les interactions entre les contacts semblent mobiliser en même temps l'écroutissage du matériau constitutif des grains et la résistance à la compression. Il est très difficile de déterminer la part de l'un ou de l'autre, même si l'on peut supposer que le second (l'incompressibilité) est prépondérant à haute densité relative. Quoiqu'il en soit, l'importance de ces phénomènes augmente graduellement, avec une transition progressive entre l'état où les contacts sont indépendants et l'état presque dense où les efforts tendent vers l'infini à cause de l'incompressibilité. Ces observations justifient la formulation de la loi haute-densité, qui retient l'état où les contacts sont indépendants et le comportement asymptotique pour  $\rho = 1$ , afin de calculer la force de contact par une interpolation entre les deux états.

D'autre part, dans la loi haute-densité, le premier terme  $S_1$ , qui dépend de  $h/R$  (Equation (2.8)) correspond aux contacts indépendants, et le second terme  $S_2$  à la raideur supplémentaire due aux interactions entre contacts et à l'incompressibilité plastique. Ce second terme ne dépend que de la densité relative locale moyenne  $\rho_{ij}$ . Par conséquent, sauf cas particulier où il existe une grande disparité entre les densités relatives locales de sphères voisines,  $S_2$  est distribué de manière à peu près homogène sur tous les contacts

25. Ce constat peut être expliqué par le frottement sphère-sphère et sphère-paroi, qui s'oppose à la transmission vers le centre de l'échantillon des contraintes appliquées aux parois. Il s'agit donc d'un effet de bord, qui ne se manifesterait pas de manière aussi flagrante avec un échantillon comprenant un plus grand nombre de sphères ou des conditions aux limites périodiques. Le frottement peut aussi expliquer la concentration de la pression moyenne dans les coins pour  $D > 0,9$ .

d'une même sphère. Nous remarquerons que l'homogénéité de la pression moyenne observée à haute densité relative sur la Figure 2.30 tend à conforter cette modélisation. D'un autre côté, l'hétérogénéité de l'écroutissage n'est pris en compte d'aucune manière. On peut supposer que cette hétérogénéité est une des causes de la dispersion des efforts de contact observée sur la Figure 2.19, en quel cas son influence n'est pas prépondérante.

## 2.5 Conclusion.

Ce chapitre a présenté la formulation d'une loi de contact nouvelle, capable de représenter les efforts de contacts en haute densité relative. La formulation mathématique proposée ici est basée sur l'ajustement de courbes issues de simulations par éléments finis.

Elle est conçue pour prendre en compte des valeurs du paramètre  $n$  entre 0 et 1, ainsi que des valeurs de déplacement relatif  $h/R$  jusqu'à 1 également.

Cette forme mathématique doit être adaptée en fonction des besoins et des applications. En restreignant les valeurs possibles de ces paramètres, la forme mathématique de la loi haute-densité pourrait être, éventuellement, simplifiée.

Néanmoins l'approche développée démontre :

1. qu'en utilisant les résultats de simulations par éléments finis, il est possible de reproduire, avec une bonne approximation, la force normale de contact en haute densité relative grâce aux cellules de Voronoi et à la densité relative locale, qui permet de prendre en compte l'influence du voisinage des grains ;
2. que la reproduction correcte de la force normale de contact permet de reproduire correctement les contraintes macroscopiques sur un échantillon.

De plus, cette approche repose sur des données précises et quantifiables. Les seuls paramètres de la loi haute-densité sont les paramètres matériau  $K$  et  $n$ , identifiables sur un essai de compression uniaxiale<sup>26</sup>. Le coefficient de frottement  $f$  est également mesurable expérimentalement.

Toutefois, la loi haute-densité se limite à fournir une expression de la composante normale de la force de contact. La modélisation de la compression à haute densité relative implique également d'autres phénomènes ; le problème de la détection des contacts en

---

26. à condition toutefois de pouvoir disposer d'un échantillon du matériau des grains de taille macroscopique, ce qui n'est pas toujours évident dans le cas des poudres industrielles.

haute densité relative en est un bon exemple. Le modèle de contact implémenté dans YADE est, en dehors de l'expression de la loi haute-densité, le plus simple possible. Les rotations des sphères sont laissées libres, de sorte qu'il est peu probable d'obtenir une cinématique comparable à la MPFEM. Les résultats pourraient éventuellement être affectés, par exemple pour la répartition des contraintes ou de la densité relative locale (bien que nous ne l'ayons pas vérifié). Plusieurs auteurs ont pris en compte une résistance à la rotation des particules (Iwashita et Oda, 2000; Plassiard *et al.*, 2009). Martin *et al.* (2003) considèrent que lorsque la densité relative augmente, les rotations peuvent être simplement bloquées.

Mais s'il reste probablement un effort de recherche à réaliser sur ces questions, nous avons vu que les résultats de ce chapitre permettent déjà une reproduction fidèle des contraintes macroscopiques, au moins pour les compressions isotrope et en matrice, et ce même à l'échelle d'un petit empilement de 32 sphères. Ainsi, il est probablement possible sans grand développement supplémentaire, d'utiliser la loi haute-densité pour explorer le comportement mécanique d'un empilement aléatoire de sphères<sup>27</sup> pour étudier la réponse à toutes sortes de sollicitations, dans l'esprit de Martin *et al.* (2003). Cela n'a pas été réalisé, ni dans la présente thèse, ni dans Jérier (2010), faute de temps.

Le chapitre 3 présente néanmoins ce type d'analyse, effectuée uniquement avec la MP-FEM, sur un échantillon de taille réduite, dans le but d'explorer la formation et l'évolution des surfaces de charge des métaux en poudres avec le chemin de chargement.

---

27. La DEM autoriserait alors l'étude d'un échantillon avec un nombre important de sphères.

## Chapitre 3

# Étude de l'évolution des surfaces de charge.

### Sommaire

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| <b>3.1</b> | <b>Introduction</b> . . . . .   | <b>84</b>  |
| <b>3.2</b> | <b>Méthode.</b> . . . . .   | <b>85</b>  |
| 3.2.1      | Rappel des principes de la méthode et tracé des surfaces de charge. . . . .                       | 85         |
| 3.2.2      | Choix de l'échantillon. . . . .   | 88         |
| 3.2.3      | Critère de plasticité. . . . .  | 92         |
| <b>3.3</b> | <b>Surfaces de charge.</b> . . . . .  | <b>95</b>  |
| 3.3.1      | Compression monotone en matrice ou isotrope. . . . .  | 95         |
| 3.3.2      | Modification d'une surface de charge par changement de direction du chemin de chargement. . . . . | 98         |
| 3.3.3      | Synthèse des résultats. . . . .   | 103        |
| <b>3.4</b> | <b>Analyse micromécanique.</b> . . . . .  | <b>105</b> |
| 3.4.1      | Remarque préliminaire sur les liens entre anisotropie et surface de charge. . . . .               | 105        |
| 3.4.2      | Chemin de chargement, anisotropie de structure et anisotropie des surfaces de charge. . . . .     | 108        |
| 3.4.3      | Écrouissage cinématique rotatif : rotation des surfaces de charge. . . . .                        | 112        |
| 3.4.4      | Vers une modélisation. . . . .  | 117        |
| <b>3.5</b> | <b>Conclusion.</b> . . . . .  | <b>119</b> |

### 3.1 Introduction

Le Chapitre 2 a présenté la formulation d'une loi de contact pour simuler, avec la méthode des éléments discrets, la compression des poudres métalliques jusqu'à haute densité relative. Nous avons vu qu'il est possible de décrire les contraintes macroscopiques sur un empilement aléatoire de sphères de taille relativement réduite. Ceci ouvre la voie à l'étude du comportement macroscopique d'un empilement de sphères à travers sa réponse mécanique à divers chemins de sollicitation balayant l'espace des contraintes. On peut donc chercher à reproduire les essais mécaniques expérimentaux sur les poudres métalliques ductiles avec de telles simulations.

L'utilisation de la DEM impose l'utilisation de la loi de contact. Il est encore plus intéressant d'utiliser directement la méthode des éléments finis multi-particules pour ce type d'application :

- parce qu'elle permet d'une part de s'affranchir des incertitudes sur la loi de contact et la modélisation du frottement ou des rotations à haute densité relative ;
- parce qu'elle donne une description locale et précise des distributions de contrainte et de déformation ainsi que des surfaces de contact ;
- parce qu'elle permet une bonne reproduction des résultats expérimentaux (cf. Chapitre 1 §1.3.4).

Comme nous l'avons discuté au Chapitre 1, la DEM a pour elle le temps de calcul, et la MPFEM, la précision des résultats. Cette dernière a l'avantage de prendre naturellement en compte tous les phénomènes granulaires. Elle peut même, dans la mesure où la finesse du maillage le permet, prendre en compte des grains irréguliers (Gethin *et al.*, 2006). De plus, elle ne nécessite que la modélisation du matériau constitutif des grains et du comportement au contact (frottement, et, éventuellement, cohésion).

Dans ce chapitre, la MPFEM est mise en œuvre pour l'étude d'un empilement de taille réduite. On se concentre en particulier sur la caractérisation des surfaces de charge, qui a déjà fait l'objet d'efforts de recherche conséquents avec des approches différentes, expérimentales (Akisanya *et al.*, 1997; Pavier, 1998; Pavier et Dorémus, 1999; Sridhar et Fleck, 2000; Schneider et Cocks, 2002), analytiques (Arzt, 1982; Fischmeister et Artz, 1983; Fleck *et al.*, 1992; Fleck, 1995; Storåkers *et al.*, 1999) ou numériques (Heyliger et McMeeking, 2001; Martin, 2004; Schmidt *et al.*, 2008), pour ne citer qu'eux.

Outre le comportement à haute densité relative des poudres, l'approche développée dans les pages qui suivent cherche à explorer :

- les liens entre les surfaces de charge et les chemins de chargement, pour des chemins complexes avec changement de direction de chargement ;
- les liens entre l'évolution des surfaces de charge et celle de la microstructure, au moyen des informations nouvelles apportées par la MPFEM.

Il existe très peu de résultats sur ces deux aspects dans le domaine des poudres métalliques ductiles. On en trouve un peu plus en mécanique des sols, nous y reviendrons. Les informations apportées par la MPFEM pour la description locale des micromécanismes sont en mesure d'éclaircir certains aspects de la mécanique des matériaux granulaires.

Ce chapitre s'inscrit dans une démarche de formulation d'une loi de comportement fondée sur la mécanique des milieux continus, à partir des simulations discrètes, et applicable à la compression des poudres métalliques. Nous présentons ici une campagne « d'expérimentation numérique », centrée sur l'étude par la MPFEM d'un empilement aléatoire de particules, et destinée à caractériser l'évolution des surfaces de charge avec le chemin de chargement. Le paragraphe 3.2 précise la méthode mise en place, le paragraphe 3.3 présente les surfaces de charge obtenues avec différents chemins de chargement, plus ou moins complexes, et enfin le paragraphe 3.4 propose une analyse micromécanique, dans le but de comprendre les phénomènes qui sont à la base de l'évolution des surfaces de charge, et quelques pistes pour fournir des éléments utiles à une modélisation.

## 3.2 Méthode.

### 3.2.1 Rappel des principes de la méthode et tracé des surfaces de charge.

La méthode mise en place consiste à définir un échantillon sous la forme d'un empilement de sphères distribuées aléatoirement. Cet empilement représente un échantillon de poudre, et fait l'objet d'un paragraphe dédié (Paragraphe 3.2.2). Cet échantillon est ensuite modélisé dans le code commercial d'éléments finis ABAQUS, puis sollicité en simulation numérique suivant différents chargements.

Dans la présente étude, les grains de l'empilement sont tous constitués d'un seul et même matériau. Le matériau constitutif des grains est modélisé par une loi élastoplastique avec une partie élastique linéaire isotrope définie par le module d'élasticité  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ . La partie plastique est de type Von Mises écrouissable (cf. Chap. 1, §1.2.2). Les détails du modèle peuvent être trouvés dans la documentation d'ABAQUS (ABAQUS, 2009b).

La relation d'écrouissage est la relation (1.29) :  $\sigma_Y = K(\varepsilon_{eq})^n$ , où  $K$  et  $n$  sont des

paramètres matériau. La limite élastique initiale  $\sigma_0$  est donnée par  $\sigma_0 = E\varepsilon_0 = K\varepsilon_0^n$  où  $\varepsilon_0$  est la déformation correspondant à la première apparition de la plasticité en essai uniaxial.

Comme dans le Chapitre 2, les valeurs des paramètres matériau sont ceux d'un alliage de plomb correspondant aux essais expérimentaux de Chen *et al.* (2006, 2008); Chen (2008) :

$$\left\{ \begin{array}{l} E = 10\,000 \text{ MPa} \\ \nu = 0,435 \\ K = 20,5 \text{ MPa} \\ n = 0,24 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Par ailleurs, le frottement entre les grains est modélisé par une loi de Coulomb classique, avec un coefficient de frottement  $f = 0,1$ . Aucune cohésion de contact n'est introduite.

Pour des raisons purement numériques liées au temps de calcul, toutes les simulations présentées dans cet article sont pilotées en déformation. Les conditions aux limites sont appliquées à l'échantillon au moyen de déplacements imposés à des plans rigides, les déplacements étant définis de manière à respecter le chemin de déformation souhaité. Dans la suite, ces plans rigides seront dénommés simplement « parois ». Pour obtenir les surfaces de charge, l'échantillon est comprimé suivant un certain chemin, jusqu'à obtenir l'état de déformation que l'on souhaite étudier. Il est ensuite déchargé jusqu'à des contraintes faibles. À ce stade on vérifie attentivement que les contraintes normales sur les parois restent positives (pas de perte de contact entre les parois et l'échantillon). Pour obtenir la surface de charge, l'échantillon doit être rechargé suivant des chemins balayant tout l'espace des contraintes afin de relever l'entrée en plasticité (Figure 3.1).

Dans cet article, on se restreint aux chargements axisymétriques, de sorte que les chemins de recharge ne balayent que le plan correspondant. Si  $X_1, X_2$  et  $X_3$  sont les directions principales de déformation, et  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  et  $\varepsilon_3$  les déformations principales du tenseur de déformation logarithmique<sup>1</sup>, le plan de chargement axisymétrique est défini dans l'espace des déformations principales par l'équation  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ . Les chemins de chargement appliqués sont pilotés par la déformation volumique  $\varepsilon_v$  et la déformation déviatoire  $\varepsilon_d$  :

$$\varepsilon_v = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \ln\left(\frac{V}{V_0}\right), \quad (3.2)$$

1. définies par  $\varepsilon_i = \ln(l_i/l_{0i})$ ;  $l_i$  et  $l_{0i}$  étant respectivement la dimension actuelle et la dimension initiale de l'empilement, dans la direction  $i$ .

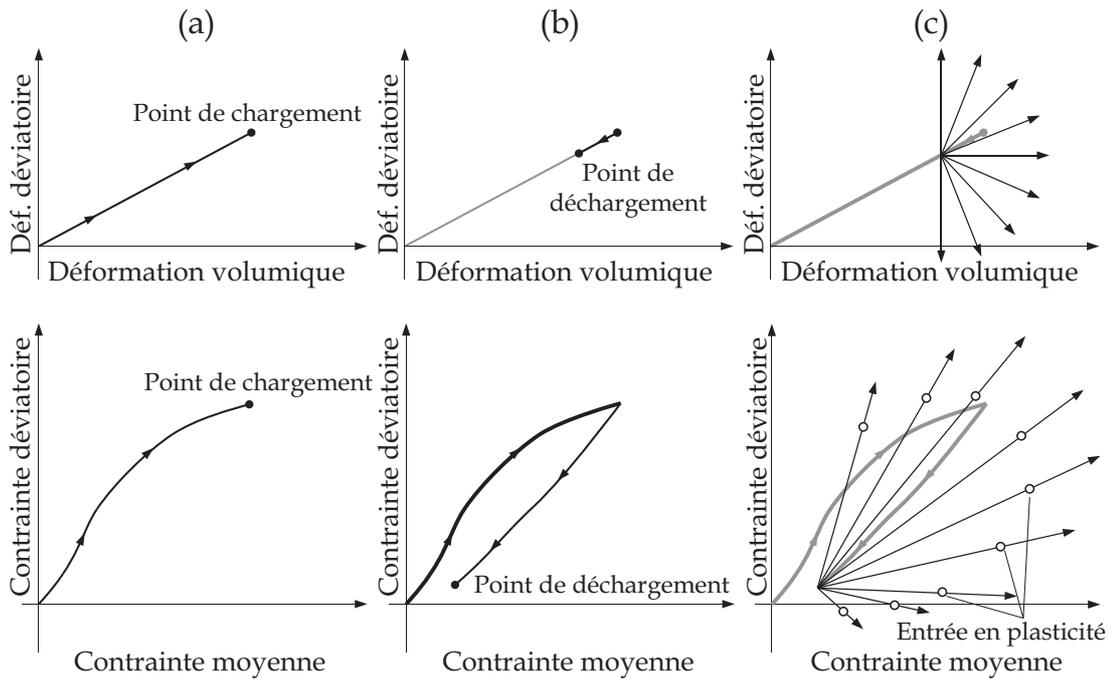


FIGURE 3.1 – Méthode générale pour l'obtention des surfaces de charge. (a) Première charge, (b) décharge, (c) recharge dans toutes les directions.

$V$  et  $V_0$  étant respectivement le volume actuel et le volume initial,

$$\varepsilon_d = \frac{2}{3} (\varepsilon_3 - \varepsilon_1) \quad (3.3)$$

En supposant l'isotropie de l'échantillon initial, on considère qu'un chargement axisymétrique en déformation produit une réponse axisymétrique en contrainte. Ainsi la réponse de l'échantillon peut également être étudiée dans un plan. Ainsi si  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  sont les contraintes principales de Cauchy<sup>2</sup>, on suppose :

- que  $X_1, X_2$  et  $X_3$  sont également les directions principales de contrainte ;
- que les chemins de contrainte obtenus sont, avec une bonne approximation, compris dans le plan défini par l'équation  $\sigma_1 = \sigma_2$ .

Les surfaces sont alors tracées dans ce plan en utilisant comme coordonnées la contrainte moyenne adimensionnelle  $p$  et la contrainte déviatoire adimensionnelle  $q$  :

<sup>2</sup> définies par la force résultante sur une paroi divisée par sa surface actuelle, la contrainte étant positive en compression.

$$p = \frac{1}{3K} (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) = \frac{P}{K} \quad (3.4)$$

$$q = \frac{1}{K} (\sigma_3 - \sigma_1) = \frac{Q}{K} \quad (3.5)$$

Il convient de vérifier sur les résultats des simulations que les chemins effectués dans l'espace des contraintes ne s'éloignent pas trop du plan axisymétrique, de manière à valider l'hypothèse énoncée ci-dessus quant à l'isotropie de l'échantillon. Sans cette précaution, la contrainte définie par (3.5) introduit une erreur, car, lorsque  $\sigma_1 \neq \sigma_2$ , elle représente la projection sur le plan axisymétrique du point définissant l'état de contrainte.

De plus, seule la moitié du plan qui correspond à des chargements compressifs (avec diminution du volume) est explorée car l'étude de chargements qui imposent une augmentation du volume nécessite absolument de prendre en compte la cohésion entre les grains.

### 3.2.2 Choix de l'échantillon.

Le choix de l'échantillon doit se faire en fonction de deux critères. Le premier et le plus important de ces critères est le temps de calcul, le second est la représentativité de l'échantillon. Ce second critère est délicat ; d'autant plus que la représentativité de l'échantillon dépend du phénomène étudié. Les propriétés de l'échantillon sont fonction du nombre de particules, de leur taille et de leur forme.

Le choix qui a été fait pour ce travail est de reporter la détermination d'un échantillon représentatif à des travaux futurs, lorsque les progrès informatiques auront rendu cette tâche plus facile. Nous nous limiterons donc à un empilement de particules sphériques contenant peu de sphères. Toutefois, pour se faire une idée, nous proposons une comparaison de trois petits empilements illustrés par la Figure 3.2. Il s'agit de deux empilements monodisperses de 32 et 15 sphères (Figure 3.2a et c), et d'un empilement polydisperse de 33 sphères avec un ratio de taille de 3,6 (Figure 3.2b). Les empilements de 32 et 15 sphères ont été réalisés à l'aide de générateurs d'empilement utilisables avec le code open-source d'éléments discrets YADE (Kozicki et Donzé, 2008, 2009, [www.yade-dem.org](http://www.yade-dem.org)). L'empilement polydisperse a été réalisé à partir de l'algorithme présenté dans Jérier *et al.* (2009, 2010b).

Cette comparaison est fondée sur l'étude de deux chargements : une déformation

isotrope et une déformation uniaxiale (compression en matrice).

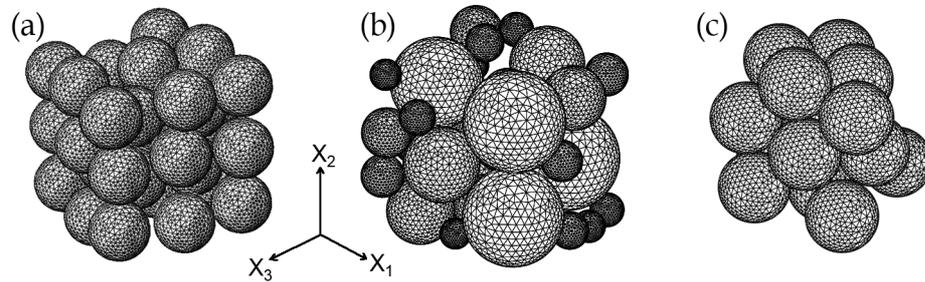


FIGURE 3.2 – (a) Empilement aléatoire monodisperse de 32 sphères avec une densité relative initiale  $D_0 = 0,48$ . (b) Empilement aléatoire polydisperse de 33 sphères identiques avec un ratio de taille de 3,6 et une densité relative initiale  $D_0 = 0,48$ . (c) Empilement aléatoire monodisperse de 15 sphères avec une densité relative initiale  $D_0 = 0,44$ .

### Temps de calcul.

L'ordre de grandeur des temps de calcul dépend naturellement de la finesse du maillage. Le maillage utilisé ici (visible sur la Figure 3.2) est constitué de 2600 éléments quadratiques tétraédriques par sphère. Schmidt *et al.* (2008) ont utilisé un maillage beaucoup plus grossier, donnant la priorité au nombre de sphères (50), au pilotage en contrainte pour le tracé des surfaces, et à la mise en place de conditions aux limites périodiques. Le maillage utilisé ici est conçu pour que les efforts au niveau des contacts soient décrits de manière satisfaisante. Il s'agit d'un choix différent dont les conséquences sont à discuter.

| Échantillon | Chargement | Temps de calcul par processeur |
|-------------|------------|--------------------------------|
| 32 sphères  | isotrope   | 7 jours                        |
| 32 sphères  | matrice    | 18 jours                       |
| 33 sphères  | isotrope   | 7 jours                        |
| 33 sphères  | matrice    | 18 jours                       |
| 15 sphères  | isotrope   | 2 jours                        |
| 15 sphères  | matrice    | 4 jours                        |

TABLE 3.1 – Ordre de grandeur des temps de calcul par processeur pour les échantillons numériques présentés en Figure 3.2.

Le Tableau 3.1 montre l'ordre de grandeur des temps de calcul par CPU<sup>3</sup> pour la simulation de la compression isotrope et de la compression en matrice de chacun des

3. Il s'agit du temps de calcul par processeur. La plupart des simulations présentées ici ont été réalisées sur 4 processeurs. Le temps de calcul indiqué dans le Tableau 3.1 doit alors être divisé par 4.

empilements. La compression en matrice nécessite un temps plus long en raison du chargement plus déviatoire et des amplitudes de déplacement plus élevées. Ces temps de calcul sont valables pour un chargement monotone. Pour tracer une surface de charge, il faut encore y rajouter le temps nécessaire pour simuler la décharge et un assez grand nombre de recharges, selon la méthode illustrée sur la Figure 3.1.

### Comparaison des contraintes en compression en matrice et isotrope.

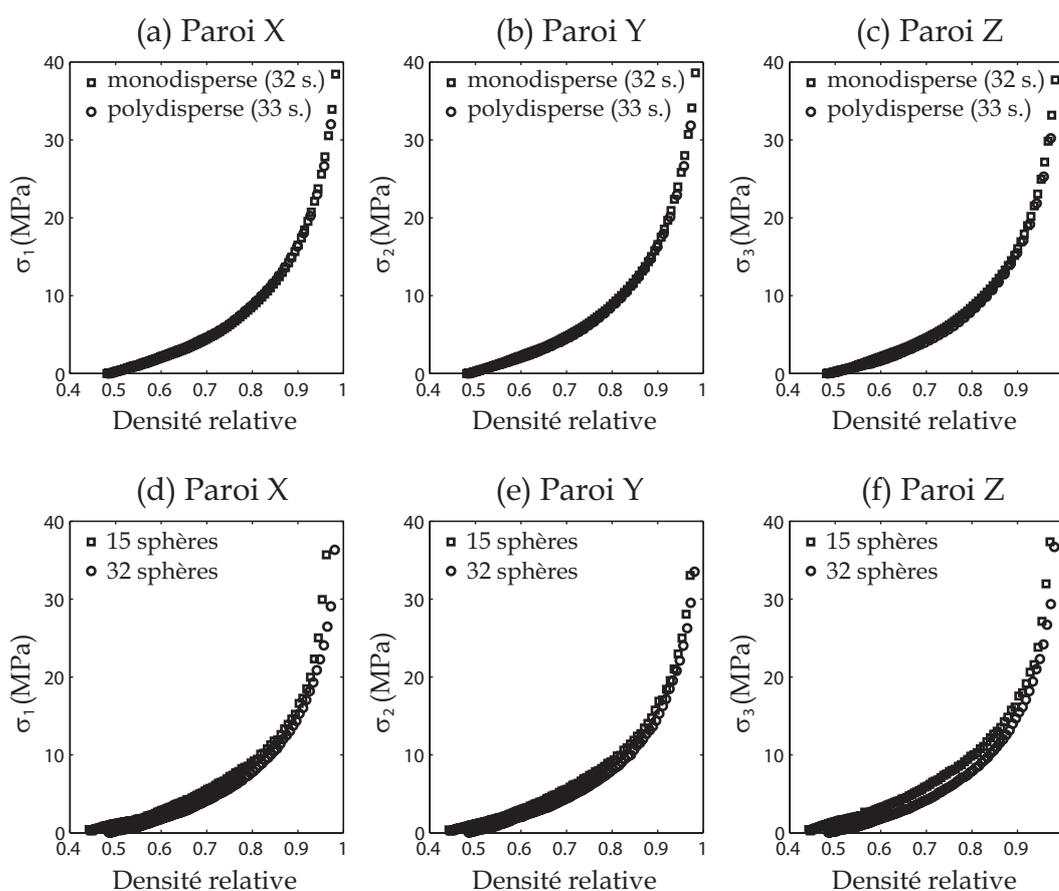


FIGURE 3.3 – Comparaison des échantillons numériques pour la compression isotrope : (a)-(b)-(c) Influence de la polydispersité, (d)-(e)-(f) Comparaison entre les empilement monodisperses de 15 sphères et de 32 sphères.

Les Figures 3.3 et 3.4 montrent la comparaison des courbes contrainte-densité relative pour les trois empilements de la Figure 3.2, respectivement en compression isotrope et en compression en matrice. Les résultats ne montrent quasiment aucune différence entre les empilements de 32 et 33 sphères, et de faibles différences entre les empilements de 32 et 15 sphères.

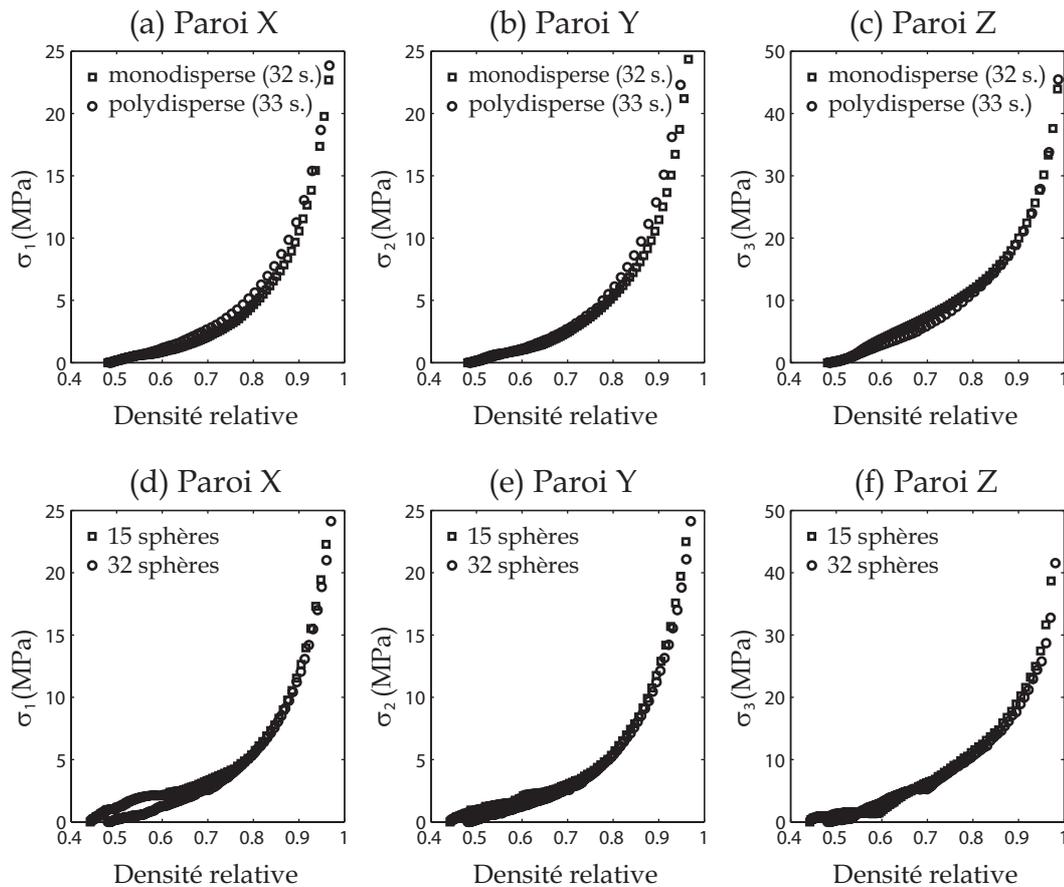


FIGURE 3.4 – Comparaison des échantillons numériques pour la compression en matrice : (a)-(b)-(c) Influence de la polydispersité, (d)-(e)-(f) Comparaison entre les empilement monodisperses de 15 sphères et de 32 sphères.

L'influence de la polydispersité mériterait une étude plus approfondie, notamment en faisant varier le ratio de taille, et de même, il conviendrait d'étudier au moins des chargements fortement déviatoires pour conclure quant à la taille minimale et la structure d'un échantillon représentatif. Toutefois, au vu de cette étude rapide, il sera considéré dans la suite que l'empilement de 15 sphères monodisperse a des propriétés suffisantes pour faire l'objet d'une étude qualitative sur les surfaces de charge. Il permet notamment de prendre en compte le caractère aléatoire de l'empilement, qui est fondamental.

L'isotropie géométrique de cet empilement est illustrée par la réponse mécanique aux deux chargements étudiés (Figure 3.5). En compression isotrope, elle est illustrée par l'écart entre les trois contraintes  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  et  $\sigma_3$ ; et en compression en matrice, par l'écart entre les contraintes latérales  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$ . On peut voir en particulier que la présence de frottement augmente les effets de l'anisotropie géométrique en compression en matrice (l'écart entre  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  est plus important en présence de frottement). En revanche, en compression isotrope, le frottement a peu d'influence et les trois courbes de contrain-

tes dans les trois directions se superposent presque parfaitement. Dans tous les cas, les différences observées sont relativement faibles et l'isotropie géométrique de l'empilement initial est supposée satisfaisante pour une étude qualitative.

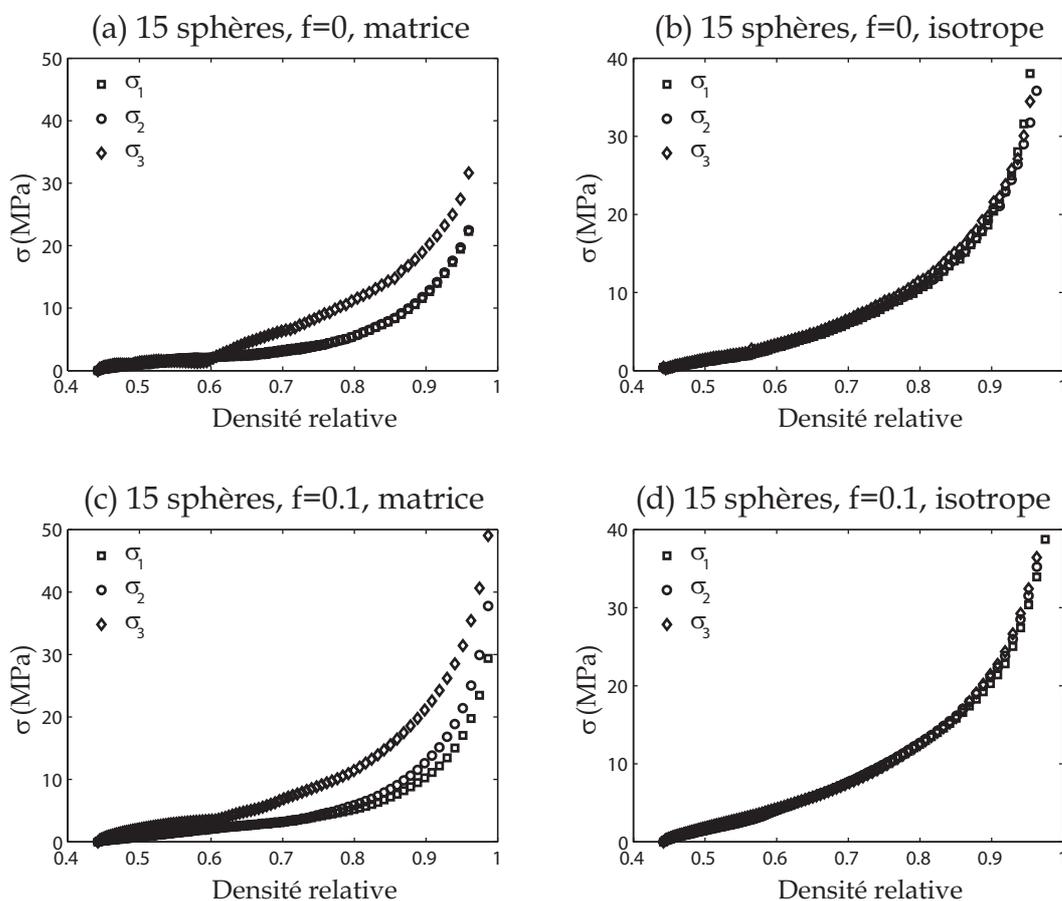


FIGURE 3.5 – L'isotropie géométrique de l'empilement de 15 sphères est illustrée par les contraintes aux parois en compression en matrice (a,c) et en compression isotrope (c,d). Ces résultats sont donnés avec frottement (c,d) ou sans frottement (a,b).

### 3.2.3 Critère de plasticité.

Une des difficultés du tracé des surfaces de charge est de détecter le début de la plasticité lors des recharges à partir du point de déchargement. La plasticité est en général définie par une déformation résiduelle, mais en simulation numérique, ce type d'approche impose un temps de calcul très long, à cause du nombre de cycles de charge-décharge à réaliser avant d'atteindre le seuil souhaité. Un critère utilisé classiquement dans les études expérimentales est d'assimiler les surfaces de charge à des surfaces isodensités (Pavier et Dorémus, 1999) ; ainsi on considère que le matériau subit une déformation plastique lorsque la densité relative augmente. Une autre approche est de repérer visuellement,

sur des courbes de décharge-recharge en contrainte-déformation, la diminution de la raideur. Néanmoins, pour les matériaux granulaires, la transition élastique-plastique est progressive, de sorte que la détermination du point de plasticité contient une grande part d'arbitraire (Muir Wood, 2004).

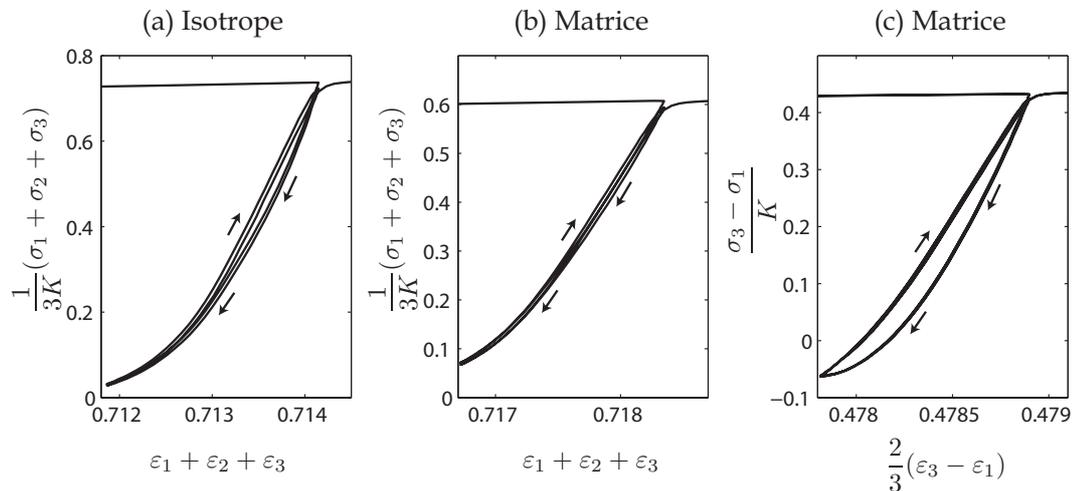


FIGURE 3.6 – Courbes contrainte-déformation en chargement cyclique pour l’empilement de 15 sphères. La densité relative est  $D = 0,9$ . (a) Compression isotrope, (b-c) compression en matrice.

La figure 3.6 montre des courbes contrainte-déformation en sollicitation cyclique, pour la compression isotrope et la compression en matrice. On y observe effectivement que la diminution de la raideur à la transition élastique-plastique est progressive lors de la recharge. Ceci peut être expliqué en supposant que tous les contacts ne plastifient pas en même temps ; de sorte qu’il y a une transition douce entre l’état où le premier contact subit une déformation plastique et celui où tous les contacts sont en régime plastique. Néanmoins cet effet reste relativement peu marqué.

La Figure 3.6 montre également un hystérésis, où la courbe de recharge est associée à une contrainte plus importante que la décharge. L’hystérésis est plus marqué sur la Figure 3.6c, en représentation déformation déviatoire-contrainte déviatoire, c’est-à-dire pour des sollicitations de type glissement / cisaillement. Ces deux aspects peuvent être expliqués par le frottement, qui a tendance à diminuer la contrainte en décharge, à l’augmenter en recharge, et qui est relié naturellement aux déformations de type glissement, qui mobilisent plus le glissement relatif des grains.

Des résultats similaires ont été observés expérimentalement par Prado et Riera (2007). Ceci illustre la difficulté de définir un domaine purement élastique dans un matériau granulaire (Muir Wood, 2004). Si l’on considère que les phénomènes d’hystérésis et de plastification progressive ne peuvent pas être négligés, alors il n’est pas raisonnable de construire un modèle de comportement fondé sur l’élastoplasticité classique avec une

seule surface de charge. Ceci est à discuter suivant les applications. Néanmoins, d'un point de vue pratique en métallurgie des poudres, pour le calcul des efforts pendant la phase de compression, il est raisonnable de considérer des déformations relativement grandes. Ainsi les phénomènes observés dans le domaine élastique ne sont pas déterminants, car ils concernent des déformations très petites. Enfin, la zone de transition entre élasticité et plasticité sur les courbes de charge-décharge est relativement petite dans notre cas (plus faible que pour la plupart des sols, même si cela est dû au moins en partie à la modélisation du comportement des grains et à leur géométrie simplifiée).

Schmidt *et al.* (2008) proposent d'utiliser comme critère l'énergie dissipée. C'est ce critère qui sera utilisé ici. Si les grains sont constitués d'un matériau élastoplastique, l'énergie dissipée est la somme de l'énergie plastique<sup>4</sup> et de l'énergie dissipée par frottement<sup>5</sup>. En effet, la plasticité macroscopique (comprise en tant que déformation irréversible) est due à deux phénomènes distincts : la déformation plastique des grains et le déplacement relatif des grains. L'énergie plastique correspond au premier mécanisme, et le frottement entre les grains est un indicateur du deuxième. Dans notre cas, une cause d'erreur apparaît : les déplacements relatifs tangentiels parois / sphères étant plus grands que les déplacements relatifs tangentiels sphères / sphères, la part du frottement dans le critère est forcément exagérée par l'effet de bord. Pour remédier à cela, il faudrait des conditions aux limites périodiques comme Schmidt *et al.* (2008). Cette erreur est néanmoins ignorée dans la suite, parce qu'on considère que, si elle peut modifier légèrement la forme ou la taille des surfaces, elle ne devrait pas affecter sensiblement les relations entre les surfaces de charge et le chemin de chargement.

Avec ce critère, le seuil de plasticité est déterminé de la manière suivante : lors du premier chargement, l'énergie dissipée atteint une valeur. Lors de la décharge, cette valeur reste constante avec une très bonne approximation, et lors de la recharge, elle réaugmente à partir du moment où la plasticité apparaît. On considère que la plasticité réapparaît lorsque l'énergie dissipée pendant la recharge atteint 0,3% de la valeur atteinte lors du premier chargement. Le choix de cette valeur seuil permet, avec une bonne approximation, d'obtenir des surfaces iso-énergie dissipée qui contiennent le point de chargement.

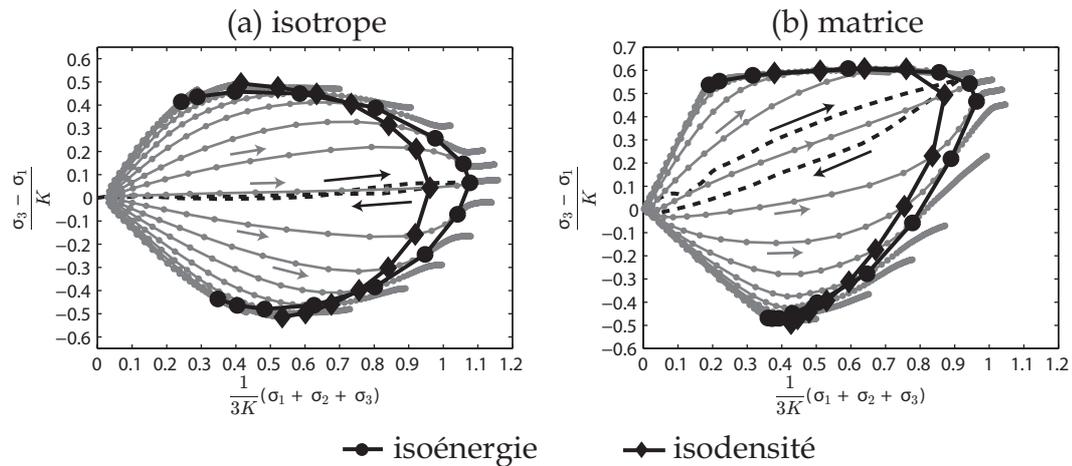


FIGURE 3.7 – Chemins de chargement pour le tracé des surfaces de charge avec en pointillés noir, la première charge-décharge, et en gris les recharges balayant l'espace des contraintes (cf. Figure 3.1) : (a) compression isotrope jusqu'à la densité relative de 0,95, (b) compression en matrice jusqu'à la densité relative de 0,95. Les surfaces isodensité et isoénergie sont également représentées.

### 3.3 Surfaces de charge.

#### 3.3.1 Compression monotone en matrice ou isotrope.

La Figure 3.7 montre, pour une compression monotone isotrope et en matrice jusqu'à une densité relative de 0,95, la surface de charge associée au critère énergétique (appelée ici surface isoénergie) et la surface isodensité. Elle montre également les chemins de chargement, comprenant la première charge-décharge (en pointillés noirs) et les recharges balayant l'espace des contraintes (en gris).

Selon le critère de plasticité choisi, les surfaces de charge obtenues ne sont pas les mêmes. Même si dans ce cas, elles sont proches, les surfaces isodensité sont plus petites que les surfaces isoénergie. En particulier, le point de chargement (situé à l'extrémité du chemin de la première charge) est à l'extérieur des surfaces isodensité. Il est par contre approximativement contenu dans les surfaces isoénergie.

Ceci s'explique par le caractère progressif de la plastification, qui est mis en évidence sur la Figure 3.6. En particulier, pour les courbes de la Figure 3.6a et b, la déformation

4. L'énergie plastique est définie, pour un volume  $V$ , par  $\int_0^t \left( \int_V \sigma : D^{pl} dV \right) dt$ .

5. L'énergie dissipée par frottement est définie, pour une surface  $S$ , par  $\int_0^t \left( \int_S v : \tau_f dS \right) dt$ ,  $v$  et  $\tau_f$  étant respectivement la vitesse relative de deux surfaces en contact en un point, et l'effort de frottement appliqué au même point.

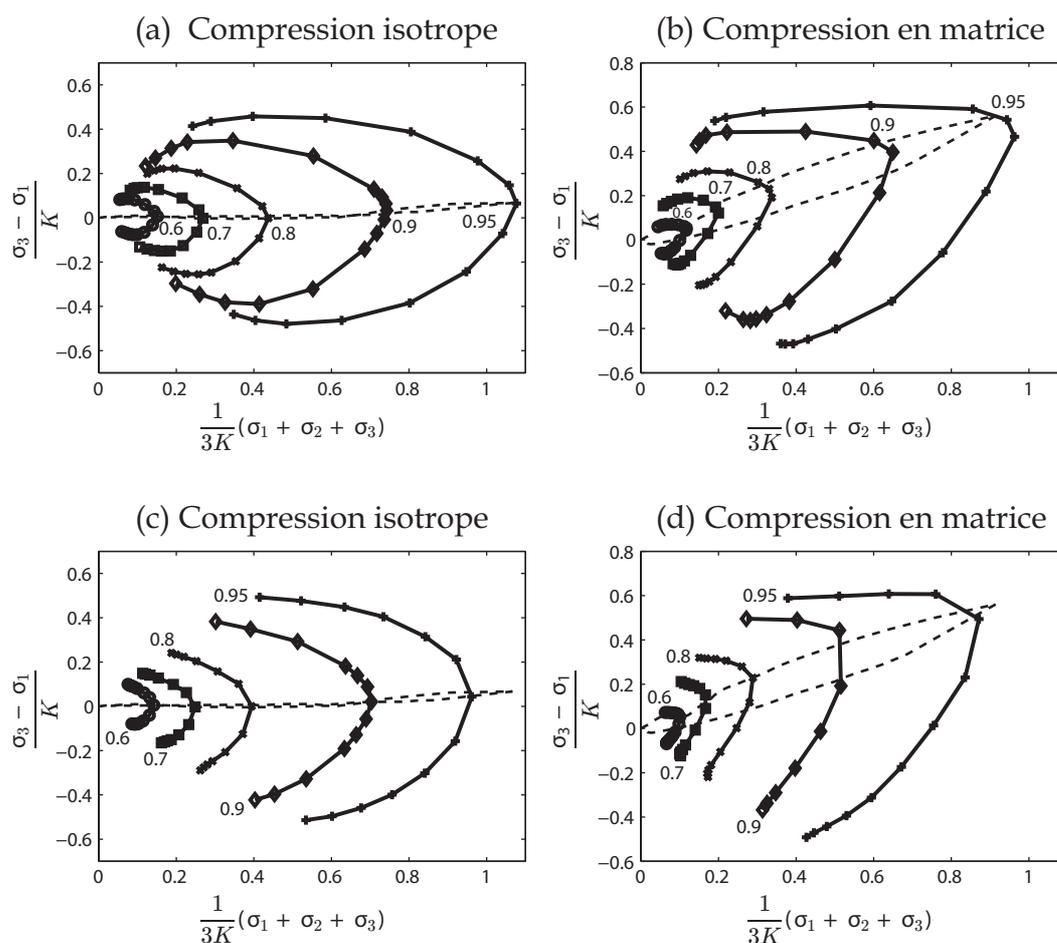


FIGURE 3.8 – Évolution des surfaces de charge (isoénergique) avec un chargement monotone. (a) Compression isotrope, (b) Compression en matrice. Les nombres indiquent la densité relative finale  $D_f$  associée à chaque surface de charge. La ligne en pointillé est le chemin de charge/décharge initial. Les courbes isodensité correspondantes sont représentées en (c) et (d).

volumique (et donc la densité relative) du point de chargement est atteinte lors de la recharge avec une contrainte plus faible (Figure 3.9). Avec le critère énergétique, le point de plasticité dépend du seuil d'énergie choisi. Celui que nous avons choisi (0,3% de l'énergie dissipée pendant la première charge) fournit des surfaces de charge qui contiennent approximativement le point de chargement pour tous les chemins explorés ici.

La Figure 3.8 montre que lorsque le premier chargement est un chemin monotone en matrice ou en compression isotrope jusqu'à une densité relative finale  $D_f$ , on retrouve des résultats qualitativement similaires aux résultats expérimentaux connus (Akisanya *et al.*, 1997; Sridhar et Fleck, 2000; Schneider et Cocks, 2002), c'est-à-dire que :

- Les surfaces correspondant au chargement isotrope sont globalement elliptiques et

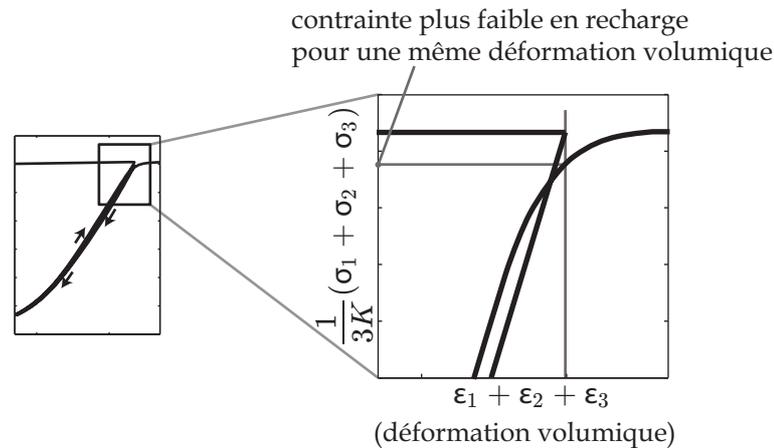


FIGURE 3.9 – En raison du caractère progressif de la transition élastique-plastique en recharge (cf. Figure 3.6), la même déformation volumique (et donc la même densité relative) est atteinte avec une amplitude de contrainte plus faible lors de la recharge que lors du chargement initial. Ce phénomène explique le fait, observé sur la Figure 3.8, que le point de chargement se retrouve à l'extérieur des surfaces isodensité.

symétriques par rapport à l'axe hydrostatique ;

- Les surfaces sont orientées dans la direction du chemin (qui correspond à l'axe hydrostatique pour la compression isotrope, mais qui en diffère fortement pour la compression en matrice) ;
- L'évolution des surfaces avec la densification est une croissance approximativement isotrope ou homothétique, et leur taille semble clairement liée à la position du point de chargement.

Quelle que soit la valeur de la densité relative qui correspond au point de chargement<sup>6</sup>, les surfaces isodensité (Figure 3.8c et d) et isoénergie (Figure 3.8a et b) sont proches, et le point de chargement se trouve à l'extérieur des surfaces isodensité.

Dans la suite, seules les surfaces isoénergie seront retenues, car elles possèdent l'avantage de contenir des informations sur la plasticité par glissement des grains et par cisaillement, tandis que les surfaces isodensité ne décrivent que la variation de volume. Par conséquent, le terme 'surfaces de charge' sera employé dans la suite pour désigner les surfaces isoénergie.

6. On rappelle que le point de chargement caractérise l'état de contrainte à la fin du premier chargement, juste avant décharge.

### 3.3.2 Modification d'une surface de charge par changement de direction du chemin de chargement.

La caractérisation de l'évolution des surfaces de charge en fonction du chemin nécessite un choix de chemins de chargements qui permettent d'identifier les différents mécanismes de transformation des surfaces de charge. Le choix qui est fait ici est d'écrouter dans un premier temps le matériau suivant un premier chargement classique (isotrope et en matrice). À ce stade, le premier chargement a créé une surface de charge du type de celles présentées en Figure 3.8. L'échantillon est alors déchargé, puis rechargé suivant un autre chemin, de manière à replastifier en un point différent de la surface de charge formée par le premier chemin. Cette démarche est synthétisée par la Figure 3.10. En variant les amplitudes du premier et du second chemin, il est possible d'étudier de quelle manière l'échantillon conserve la mémoire de la surface de charge formée par le premier chargement.

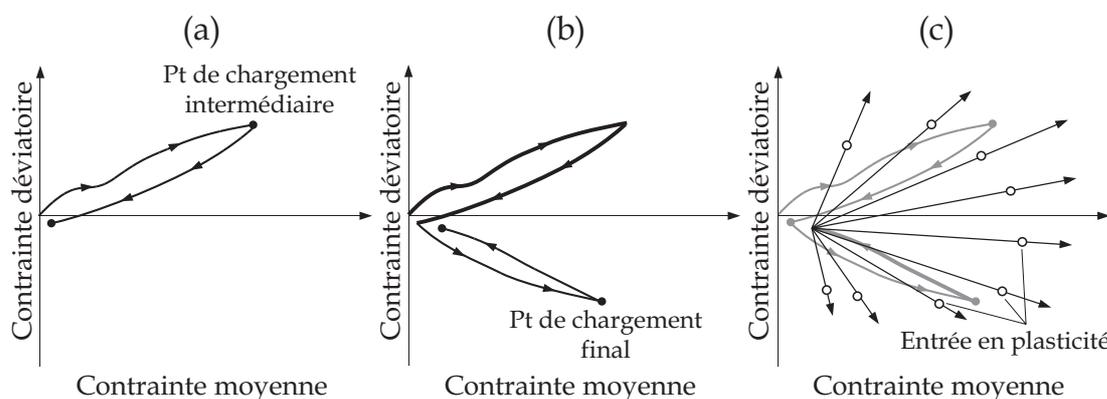


FIGURE 3.10 – Méthode pour obtenir des surfaces de charge associées à des chemins de chargement complexes. (a) Première charge/décharge, (b) Seconde charge/décharge, (c) Recharge dans toutes les directions.

La Figure 3.11 montre les trois chemins de chargement utilisés dans ce paragraphe. Le premier chemin, qui sera nommé 'chemin isotrope-déviatoire' (Figure 3.11a) est une compression isotrope jusqu'à la densité intermédiaire  $D_1$ , suivie d'un chemin déviatoire jusqu'à la densité finale  $D_f$ . Ce chemin déviatoire est un chargement pour lequel les plans radiaux compriment l'échantillon tandis que les plans axiaux s'écartent (cf schéma sur la Figure 3.11). Les déplacements des parois sont tels qu'ils imposent une diminution du volume de l'échantillon. Ce chemin sera nommé simplement dans la suite 'chemin déviatoire'. Le second chemin ('matrice-déviatoire', Figure 3.11b), est une compression en matrice jusqu'à  $D_1$ , suivie du même chemin déviatoire précédemment décrit, jusqu'à  $D_f$ . Enfin, pour des besoins de comparaison, il est utile de définir un troisième chargement ('déviatoire', Figure 3.11c) qui est encore le même chemin déviatoire, mais appliqué de manière monotone à l'empilement initial, directement jusqu'à la densité  $D_f$ .

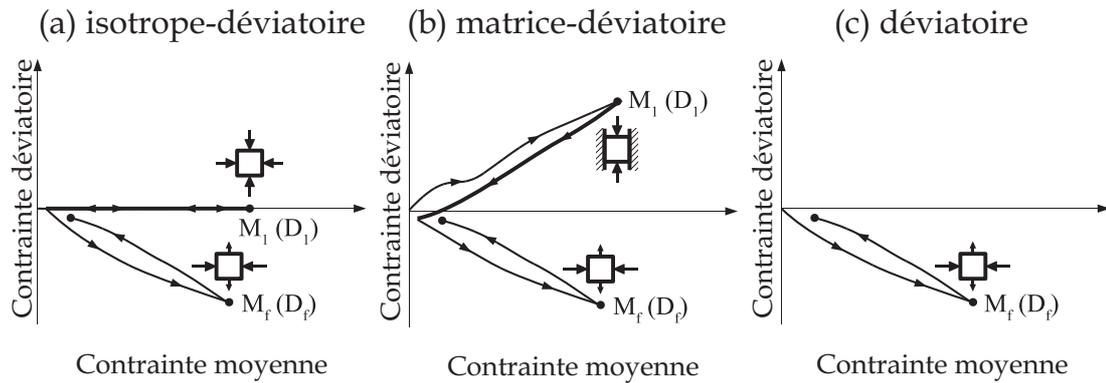


FIGURE 3.11 – Chemins de chargement utilisés pour obtenir des surfaces de charge avec la méthode illustrée sur la Figure 3.10.  $D_1$  est la densité relative intermédiaire correspondant au point de chargement intermédiaire ( $M_1$ ).  $D_f$  est la densité relative finale correspondant au point de chargement final ( $M_f$ ). (a) Isotrope-déviatoire : Compression isotrope suivie du chemin déviatoire. (b) Matrice-déviatoire : Compression en matrice suivie du chemin déviatoire. (c) Déviatoire : Chemin déviatoire monotone, sans compression préalable. Les petites figures avec des flèches indiquent le déplacement des parois pour chaque chemin de chargement.

Les Figures 3.12 et 3.13 montrent l'évolution, jusqu'à  $D_f = 0,95$ , des surfaces en suivant les chargements isotrope-déviatoire et matrice-déviatoire, pour quatre valeurs de la densité relative intermédiaire  $D_1$ . D'après ces résultats, la forme de la surface de charge est modifiée rapidement lorsque la plastification survient par le deuxième chemin. Cette modification de forme s'apparente à une rotation de la surface de charge. Elle est d'autant plus importante que  $D_1$  est faible. Pour  $D_1 = 0,9$ , la modification de la forme de la surface de charge est pratiquement imperceptible pour le chargement isotrope-déviatoire, et faible pour le chargement matrice-déviatoire (pour lequel le changement de direction entre le premier et le second chemin est plus marqué). La surface de charge conserve ensuite cette forme pour grandir de manière à peu près homothétique le long du second chemin, d'une manière similaire à celle observée pour un chargement purement monotone (Figure 3.8).

La Figure 3.14 montre la modification des surfaces issues du premier chargement sous l'effet d'une légère déformation plastique suivant le second chemin, avec une variation de densité relative  $D_f - D_1 = 0,03$ , dans le cas d'une faible densité ( $D_1 = 0,6000$ ) et d'une haute densité ( $D_1 = 0,9007$ ).

Ces résultats indiquent qu'une faible augmentation de la densité relative suivant le second chemin suffit pour que les surfaces adoptent la forme générale qu'elles conserveront approximativement lors d'une densification plus importante suivant le second chemin. Seule la surface issue du chargement matrice-déviatoire avec  $D_1 = 0,6$  (Figure 3.14a) semble être encore en cours de transition. Quoiqu'il en soit, on retient que le changement de chemin à faible densité relative induit un changement important et quasi instantané

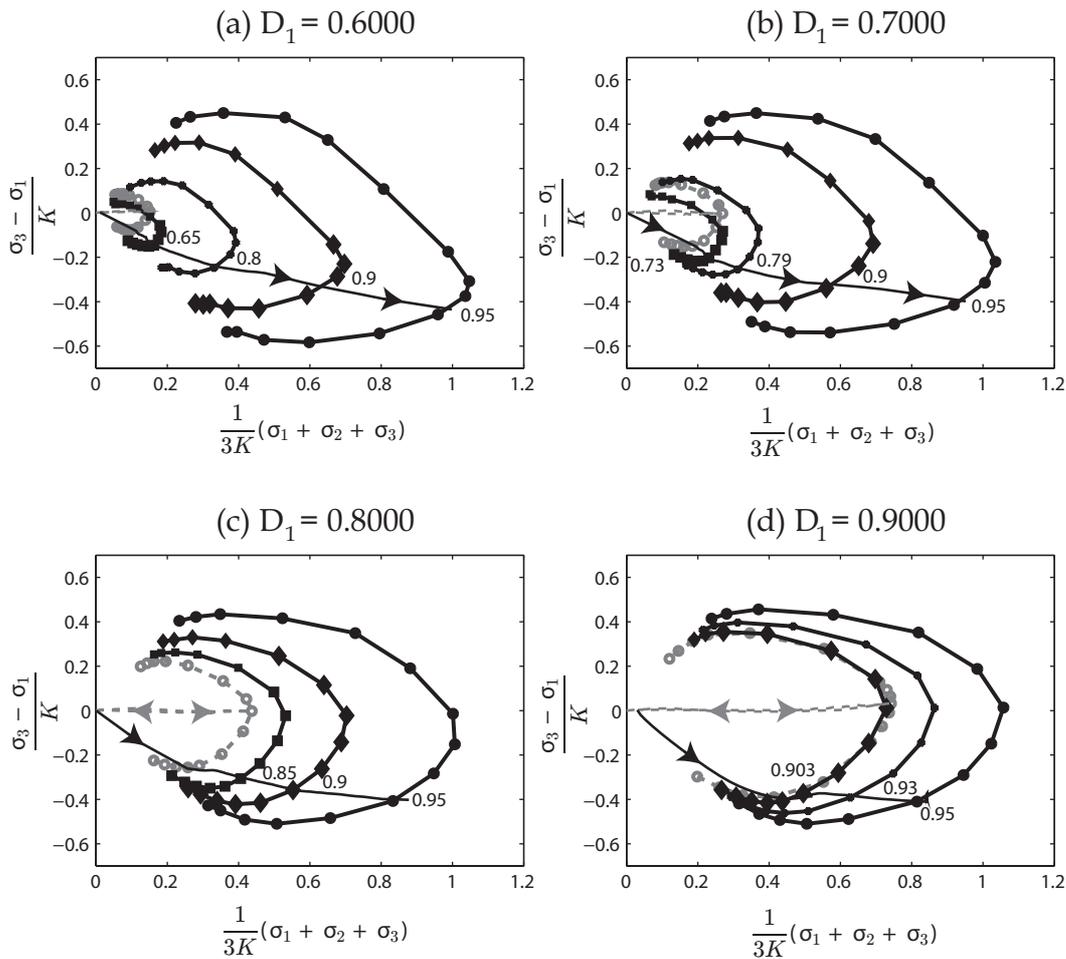


FIGURE 3.12 – Évolution des surfaces de charge pour le chargement isotrope-déviatoire, avec différentes densités relatives intermédiaires  $D_1$ . Les nombres indiquent la densité relative finale  $D_f$  qui correspond à chaque surface ( $D_f > 1$ ). La surface en pointillés gris est la surface de charge qui correspond à la première partie du chargement isotrope-déviatoire (c'est-à-dire la compression isotrope jusqu'à la densité relative  $D_1$ ). Les chemins de chargement associés sont également représentés (lignes avec flèches).

des surfaces de charge. En particulier, on observe une diminution importante du domaine élastique à proximité de la première direction de chargement.

Ainsi, lorsque  $D_1 = 0,6$ , les surfaces obtenues avec les chargements isotrope-déviatoire et matrice-déviatoire sont globalement orientées sur le second chemin. Lorsque  $D_1 = 0,9$ , elles restent orientées plutôt sur le premier chemin. Dans les autres cas, la situation est intermédiaire. Le poids, dans la mémoire du chargement, des surfaces issues du premier chargement est d'autant plus grand que la densité  $D_1$  atteinte lors du premier chargement est grande. Les Figures 3.15 et 3.16 sont destinées à éclaircir ce point, en comparant, à une densité finale  $D_f = 0,95$ , les surfaces de charge qui correspondent aux trois chemins

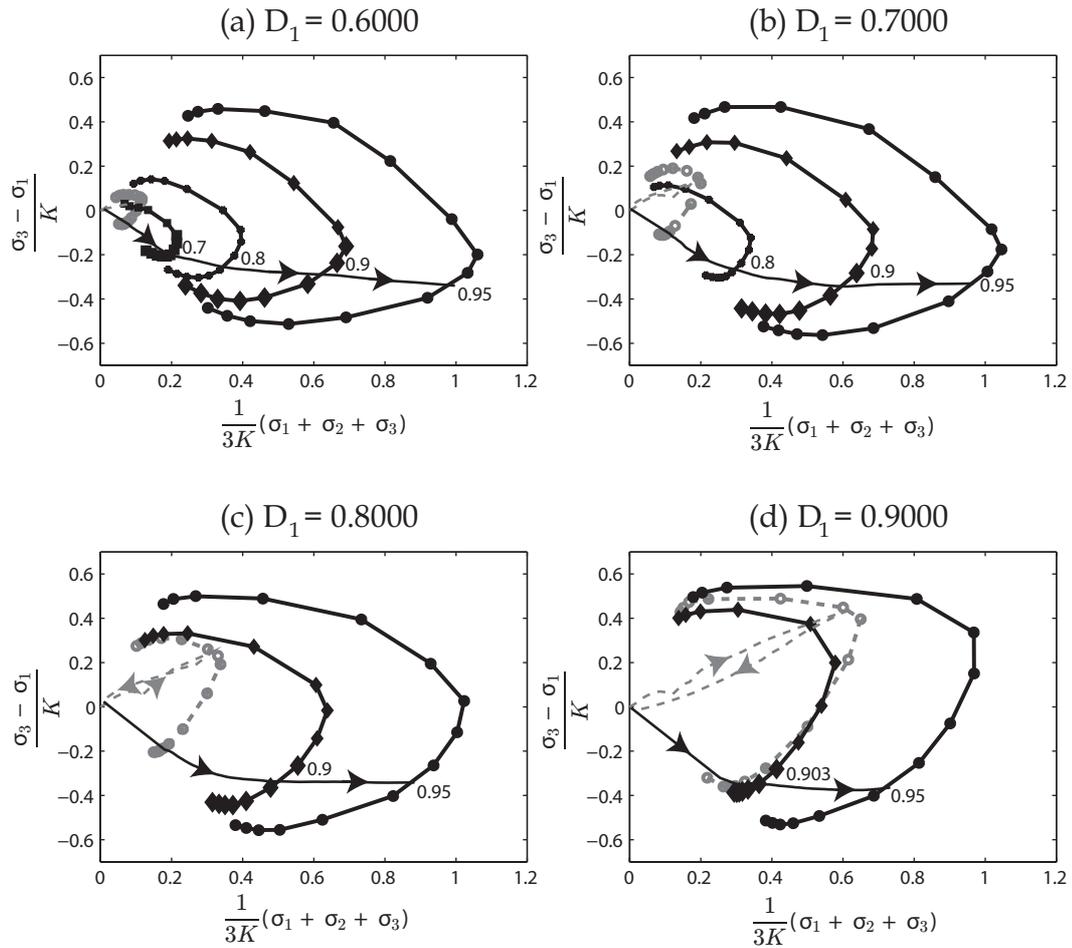


FIGURE 3.13 – Évolution des surfaces de charge pour le chargement matrice-déviatoire, avec différentes densités relatives intermédiaires  $D_1$ . Les nombres indiquent la densité relative finale  $D_f$  qui correspond à chaque surface ( $D_f > 1$ ). La surface en pointillés gris est la surface de charge qui correspond à la première partie du chargement matrice-déviatoire (c'est-à-dire la compression en matrice jusqu'à la densité relative  $D_1$ ). Les chemins de chargement associés sont également représentés (lignes avec flèches).

suivants :

- le premier chemin, isotrope (Figure 3.15) ou en matrice (Figure 3.16) ;
- le chargement avec changement de chemin, isotrope-déviatoire (Figure 3.15) ou matrice-déviatoire (Figure 3.16) ;
- le chargement déviatoire monotone correspondant au second chemin (chargement déviatoire).

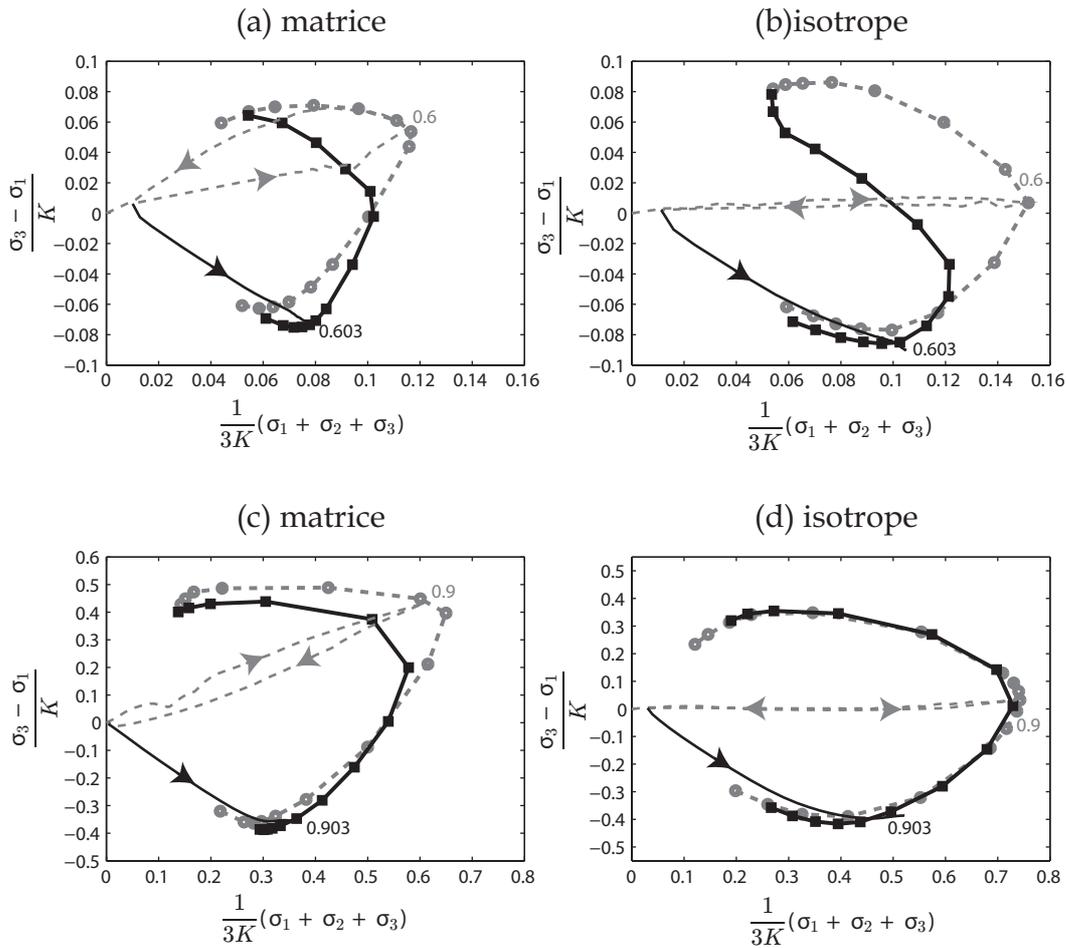


FIGURE 3.14 – Modification des surfaces de charge sous l'effet d'une déformation plastique de faible amplitude ( $D_f - D_1 = 0,03$ ) le long du chemin déviatoire, à faible et à haute densité relative. (a) Matrice-déviatoire,  $D_1 = 0,6$ . (b) Isotrope-déviatoire,  $D_1 = 0,6$ , (c) Matrice-déviatoire,  $D_1 = 0,9$ . (d) Isotrope-déviatoire,  $D_1 = 0,9$ . Les chemins de charge sont également représentés (lignes avec flèches).

Sur la Figure 3.15a, il est visible que lorsque  $D_1 = 0,6$ , la surface de charge issue du chargement isotrope-déviatoire, à  $D_f = 0,95$ , est pratiquement confondue, à  $D_f = 0,95$ , avec la surface de charge issue du chargement déviatoire. Si  $D_1 = 0,9$  (Figure 3.15d), elle est pratiquement confondue avec la surface de charge correspondant au chargement isotrope. Pour les autres valeurs de  $D_1$ , elle est entre les deux surfaces de charge, plus proche de celle du chargement déviatoire pour  $D_1 = 0,7$  (Figure 3.15b) et plus proche de celle du chargement isotrope pour  $D_1 = 0,8$  (Figure 3.15c). Le poids, dans la mémoire du matériau, de la surface de charge issue du premier chargement semble donc varier continument avec la densité  $D_1$ .

Ces observations sont également valables pour le chargement matrice-déviatoire (Fi-

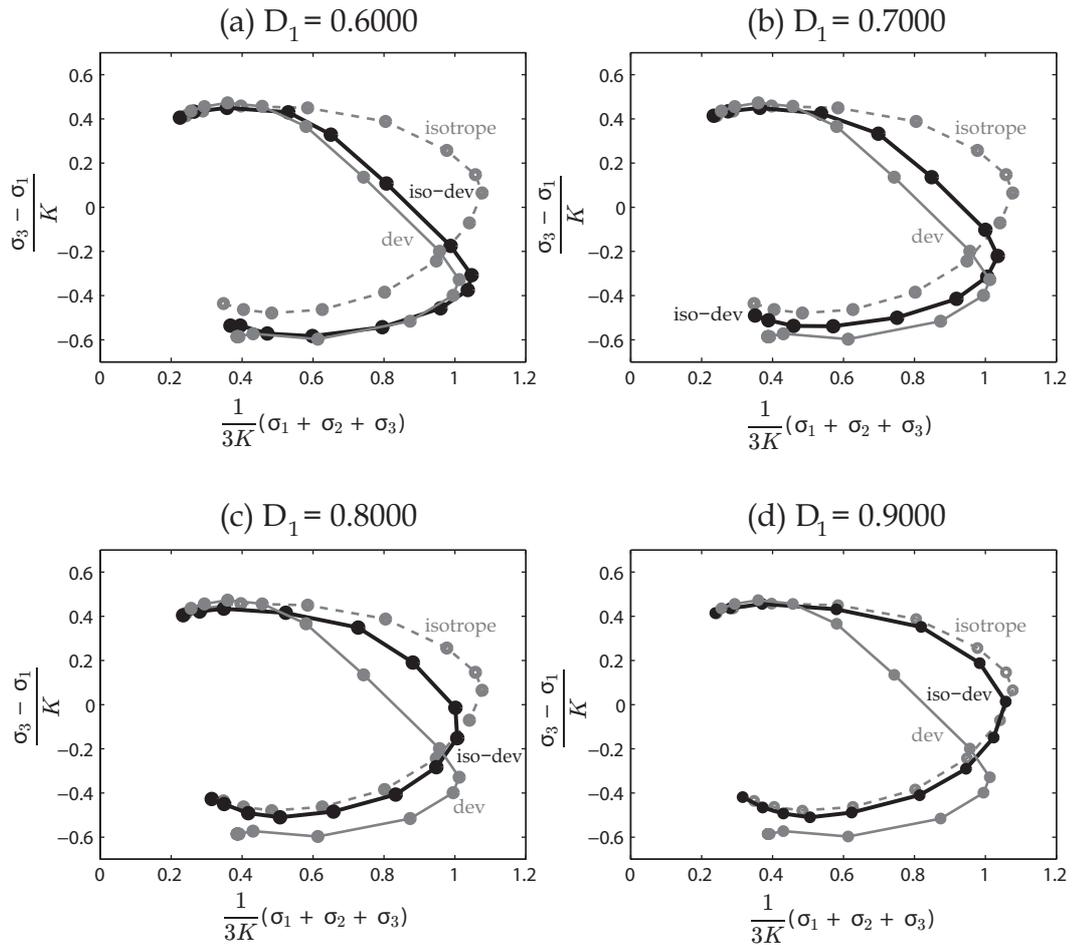


FIGURE 3.15 – Comparaison entre les surfaces de charge correspondant à la densité relative finale  $D_f = 0,95$ , obtenues avec différents chemins de chargement : compression isotrope ('isotrope'), chargement isotrope-déviatoire ('iso-dev') et monotone déviatoire ('dev'), avec différentes densités relatives intermédiaires  $D_1$ .

gure 3.16). Cependant, pour  $D_1 = 0,6$  et  $D_1 = 0,9$ , les surfaces ne sont pas tout à fait confondues avec l'une ou l'autre des autres surfaces. Ceci montre que la mémoire du premier chemin dépend non seulement de la densité  $D_1$  atteinte, mais aussi de la différence entre les deux chemins (la différence de direction dans l'espace des contraintes ou l'espace des déformations, qui est plus importante pour le chemin matrice-déviatoire que pour le chemin isotrope-déviatoire).

### 3.3.3 Synthèse des résultats.

De l'analyse des résultats numériques, il ressort que les surfaces de charge de l'échantillon étudié peuvent évoluer suivant un écouissage plutôt isotrope (croissance homo-

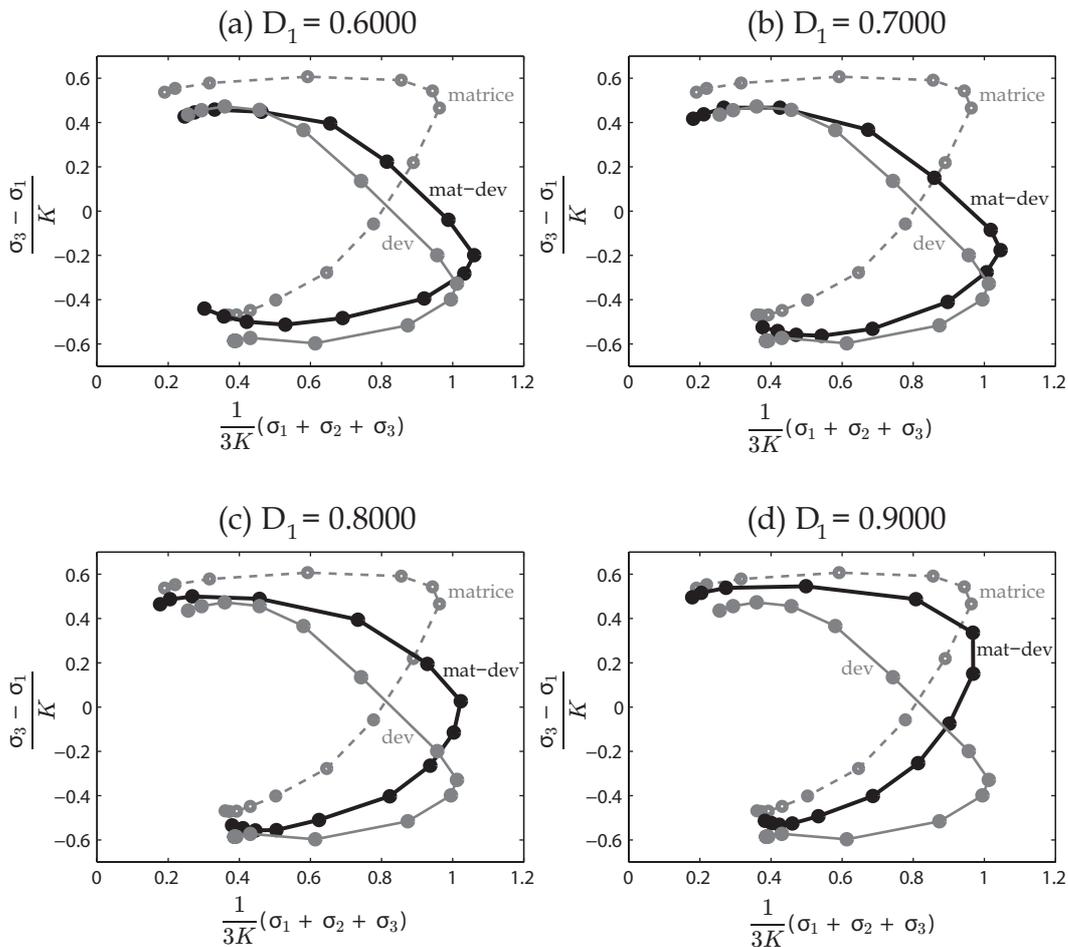


FIGURE 3.16 – Comparaison entre les surfaces de charge correspondant à la densité relative finale  $D_f = 0,95$ , obtenues avec différents chemins de chargement : compression en matrice ('matrice'), chargement matrice-déviatoire ('mat-dev') et monotone déviatoire ('dev'), avec différentes densités relatives intermédiaires  $D_1$ .

thétique des surfaces) ou plutôt cinématique (rotation des surfaces)<sup>7</sup>. Elles semblent fortement liées au chemin de contrainte et notamment à la position du point de chargement. Ce type de comportement a déjà été observé pour les matériaux granulaires ou assimilés. Des modèles combinant écouissage rotatif et isotrope ont donc été établis pour les sables (Lade et Inel, 1997; Inel et Lade, 1997) ou les argiles (Newson et Davies, 1996; Wheeler *et al.*, 2003; Dafalias *et al.*, 2006) ou les sols cohésifs (Hashiguchi et Mase, 2007). En métallurgie des poudres, un modèle avec écouissage rotatif est utilisé par Brandt et

7. Il y a une ambiguïté sur le terme « écouissage cinématique ». Il désigne a priori tout déplacement de la surface de charge (rotation ou translation), mais dans certains cas, il suggère surtout une translation ou un comportement hystérétique particulier. Dans le cas présent, ce terme désigne exclusivement la rotation de la surface de charge. C'est pourquoi nous jugeons plus explicite dans la suite de préciser ce point en utilisant le terme « écouissage cinématique rotatif », voire simplement « écouissage rotatif », à la manière, notamment, de Newson et Davies (1996); Lade et Inel (1997) ou encore Dafalias *et al.* (2006).

Nilsson (1999), mais pour des carbures, dans un cadre où la densité relative reste faible. Or, la différence essentielle entre le comportement mécanique des sols et celui des poudres métalliques ductiles étudiées ici est la nécessité de la prise en compte du comportement jusqu'aux hautes densités relatives. Rappelons que pour les industriels, la haute densité relative est un but en soi, notamment pour des raisons de résistance mécanique.

D'après les résultats précédents, le comportement à haute densité relative est caractérisé par la disparition progressive de l'écroutissage rotatif au fur et à mesure de la densification. De plus, il est intéressant de noter que la trace d'un premier chargement subsiste sur la surface de charge lorsque celle-ci est modifiée par un nouveau chargement. Cette mémoire de l'échantillon conserve d'autant plus la trace des chargements que ceux-ci sont associés à une densité relative élevée. Enfin, une surface qui contient la mémoire d'un chargement à un état donné croît de manière homothétique sur un nouveau chemin, sans faire disparaître la trace du premier chargement, quelle que soit l'amplitude du second chargement, tant que ce dernier reste monotone. Ces résultats impliquent que l'évolution des surfaces de charge au cours du chargement a d'autant plus d'importance qu'il en reste une trace à haute densité. Si l'objectif est de formuler des modèles capables de décrire l'état mécanique des pièces en fin de compression, alors il est utile de bien maîtriser les mécanismes d'évolution des surfaces de charge.

Dans ce but, le paragraphe 3.4 recherche, à l'intérieur de l'échantillon étudié, les modifications de structure associées aux changements de la surface de charge.

### **3.4 Analyse micromécanique.**

Ce paragraphe propose d'expliquer les mécanismes d'évolution des surfaces de charge présentés au paragraphe 3.3 à partir d'observations de l'échantillon déformé. En premier lieu, les relations entre anisotropie de structure et surfaces de charge sont évoquées (paragraphe 3.4.1), ainsi que les relations entre anisotropie et chemin de chargement (paragraphe 3.4.2). Le mécanisme de rotation des surfaces de charge est ensuite expliqué (paragraphe 3.4.3). Enfin, une approche de modélisation simplifiée est proposée pour décrire l'évolution observée des surfaces de charge (paragraphe 3.4.4).

#### **3.4.1 Remarque préliminaire sur les liens entre anisotropie et surface de charge.**

Le lien entre l'anisotropie du comportement et la surface de charge n'est pas évident. Néanmoins, ces notions sont souvent mises en parallèle dans la littérature. C'est pourquoi nous jugeons utile de préciser ce point, avant de pousser plus loin le développement.

À titre de remarque préliminaire, la Figure 3.17 rappelle le lien entre les chemins de chargements dans le plan contrainte moyenne - contrainte déviatoire, et les conditions aux limites (en déplacement) appliquées à l'échantillon. La partie supérieure du plan (qui correspond à  $\sigma_3 > \sigma_1, \sigma_2$ <sup>8</sup>) doit être reliée à un chargement essentiellement axial, c'est-à-dire à une compression plus importante dans la direction axiale  $X_3$  que dans les directions radiales  $X_1$  et  $X_2$  ( $\varepsilon_3 > \varepsilon_1, \varepsilon_2$ ). À l'inverse, la partie inférieure du plan correspond à  $\sigma_1, \sigma_2 > \sigma_3$ , c'est-à-dire un chargement plutôt radial.

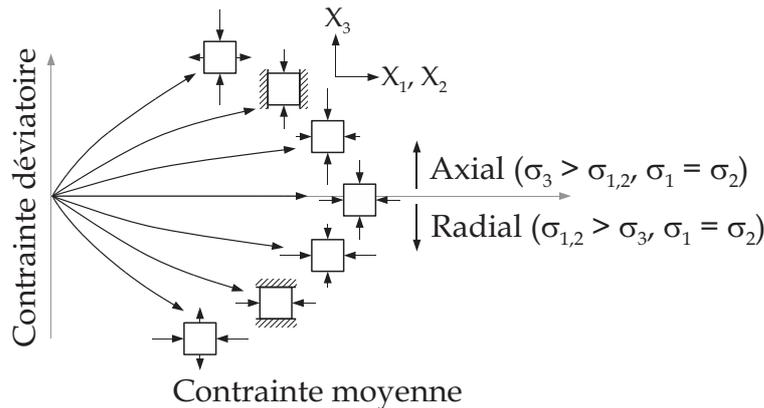


FIGURE 3.17 – Illustration schématique des chemins de chargement dans l'espace des contraintes principales, et directions correspondantes des déplacements imposés à l'échantillon.

Cela étant rappelé, l'isotropie du matériau impose que la surface de charge soit invariante par permutation des contraintes principales. Elle n'impose pas la symétrie des surfaces de charge par rapport à l'axe de la contrainte moyenne (la surface de charge de Mohr-Coulomb, par exemple, pour un matériau isotrope, n'est pas symétrique par rapport à l'axe hydrostatique).

En effet, un chargement quelconque dans l'espace des contraintes diffère de son chargement symétrique par rapport à l'axe hydrostatique dans le sens où il n'est pas possible de passer d'un chargement à son symétrique par une simple rotation dans l'espace. Par exemple, le chargement symétrique d'une compression uniaxiale caractérisée par le tenseur de contraintes suivant :

$$\sigma_{1ax} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{1ax} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

8. On rappelle que le chargement axisymétrique impose  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ . En supposant de plus l'isotropie géométrique de l'empilement initial, on a de plus  $\sigma_1 = \sigma_2$ .

est une compression triaxiale caractérisée par le tenseur suivant<sup>9</sup> :

$$\sigma_{3ax} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sigma_{1ax} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3}\sigma_{1ax} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}\sigma_{1ax} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Il est clair qu'il n'est pas possible de passer du tenseur (3.6) au tenseur (3.7) par une simple rotation. Ces deux états de contraintes sont intrinsèquement différents, et donc la réponse d'un matériau isotrope aux chargements correspondants n'a aucune raison d'être la même. En conséquence, pour un matériau isotrope, la surface de charge n'a aucune raison d'être symétrique par rapport à l'axe hydrostatique.

En revanche, une dissymétrie de la surface de charge par rapport à l'axe hydrostatique peut, dans certains cas, s'expliquer par l'anisotropie du matériau. Schmidt *et al.* (2008) ont tracé l'intersection avec le plan déviatoire de la surface de charge associée à un empilement aléatoire de sphères élastoplastiques comprimé en matrice (Figure 3.18). Celle-ci s'avère approximativement elliptique. Leurs résultats conduisent à penser que cette surface de charge se rapproche d'un ellipsoïde de révolution, dont la section dans le plan contrainte moyenne - contrainte déviatoire donne une bonne idée. La surface de charge associée à la compression en matrice ne correspond alors pas à celle d'un matériau isotrope. En extrapolant ces résultats, nous considérons que les surfaces de charge sont approximativement des ellipsoïdes de révolution, dont l'axe est incliné (ou non) par rapport à l'axe hydrostatique. Or, un ellipsoïde de révolution dont le grand axe est incliné par rapport à l'axe hydrostatique n'est pas invariant par permutation des contraintes principales. En vertu de cette hypothèse sur la géométrie des surfaces de charge, nous considérons que toutes les surfaces de charge dont le grand axe n'est pas orienté suivant l'axe hydrostatique correspondent à un matériau anisotrope.

Ainsi, les résultats montrent qu'un chargement déviatoire conduit à une surface dissymétrique par rapport à l'axe hydrostatique. Pour un chemin monotone, la surface s'oriente dans la direction du chemin de chargement ; un changement de direction dans le chemin tend à orienter la surface suivant la nouvelle direction. On peut supposer que ce constat est la traduction du fait suivant : un chargement déviatoire crée une structure anisotrope dans l'échantillon, et cette structure présente des orientations préférentielles fortement influencées par le chargement. Désormais, lorsque l'anisotropie des surfaces de charges sera évoquée, c'est cette notion de dissymétrie de la surface de charge par rapport à l'axe hydrostatique qui sera sous-entendue.

---

9. On peut vérifier facilement que pour ces deux tenseurs, les valeurs de  $p$  et  $q$  (cf. Equations (3.4) et (3.5)) sont symétriques par rapport à l'axe hydrostatique, c'est-à-dire que  $p_{1ax} = p_{3ax}$  et  $q_{1ax} = -q_{3ax}$ , les indices  $1ax$  et  $3ax$  se rapportant aux tenseurs avec le même indice.

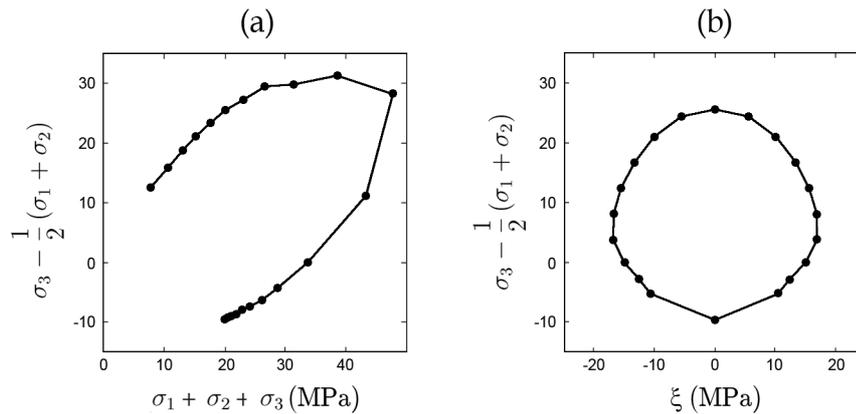


FIGURE 3.18 – Surface de charge obtenue par Schmidt *et al.* (2008) pour une compression en matrice jusqu'à une densité relative  $D_f = 0,9$  : (a) dans le plan contrainte moyenne-contrainte déviatoire, (b) dans le plan déviatoire ( $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 20$  Mpa).  $\xi$  est la coordonnée horizontale dans le plan déviatoire, non définie dans l'article original.

### 3.4.2 Chemin de chargement, anisotropie de structure et anisotropie des surfaces de charge.

Deux mécanismes interviennent dans la croissance du domaine élastique du matériau. Le premier est la croissance des surfaces de contact, le deuxième est la croissance du domaine élastique (l'écrouissage) du matériau constitutif des grains. Les deux phénomènes sont très difficiles à séparer, et sont probablement tous les deux responsables du comportement observé à l'échelle de l'échantillon. Cependant, la croissance des surfaces de charge est anisotrope (cf. §3.4.1). La question suivante se pose alors : L'anisotropie de comportement observée est-elle due seulement à une orientation privilégiée des surfaces de contact entre les grains, ou bien est-elle également le résultat d'un écrouissage hétérogène à l'intérieur des grains ?

Pour tenter de répondre à cette question, nous allons étudier l'exemple de l'échantillon soumis au chemin matrice-déviatoire, avec  $D_1 = 0,7$  et  $D_f = 0,95$ , présenté sur la Figure 3.19. Ce chemin de chargement est comparé à la compression isotrope, pour laquelle l'état de déformation final (à  $D_f = 0,95$ ) est proche (Figure 3.19a). La structure des contacts générée par ces deux chargements présente des différences visibles (Figure 3.19b,c). Les surfaces de charge sont différentes (Figure 3.19d), et notamment, la surface de charge issue du chargement matrice-déviatoire est dissymétrique, et orientée vers la partie inférieure du plan contrainte moyenne - contrainte déviatoire, ce qui suggère un comportement anisotrope (cf. §3.4.1).

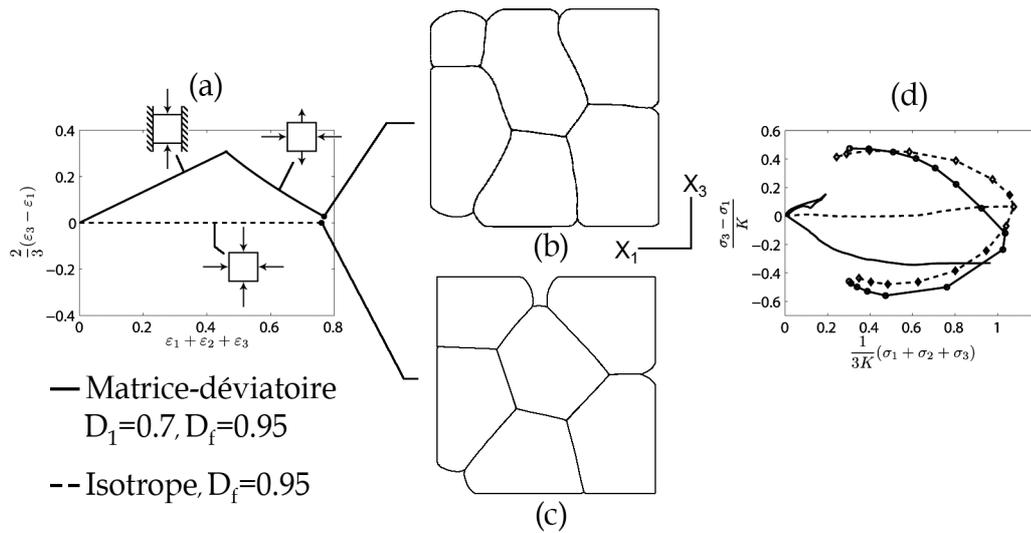


FIGURE 3.19 – Comparaison, dans une coupe de l'échantillon, des structures obtenues après deux chemins de chargement qui mènent à un état de déformation proches, mais à des surfaces de charge différentes. (a) Chemins de déformation, (b) Structure obtenue après le chargement matrice-déviatoire avec  $D_1 = 0,7$  et  $D_f = 0,95$ , (c) Structure obtenue après compression isotrope jusqu'à  $D_f = 0,95$ , (d) Chemins de contrainte et surfaces de charge.

### Surfaces de contact.

Une mesure très simple nous a permis de mettre en évidence dans l'échantillon, pour l'exemple de ce chemin de chargement (Figure 3.19a), une anisotropie de structure qui permet d'expliquer l'orientation de la surface de charge. Nous avons mesuré la proportion des surfaces de contact par rapport à la surface totale sur chacune des faces extérieures de l'échantillon. Les résultats de cette mesure (Figure 3.20) montrent qu'environ 70% de la surface des parois radiales<sup>10</sup> est en contact avec les grains, contre seulement 55% pour les parois axiales<sup>11</sup>. Si l'on suppose qu'il est possible d'extrapoler, à l'intérieur de l'échantillon, cette observation faite sur ses frontières, on en conclut qu'il y a moins de surface de contact dans l'échantillon pour s'opposer à la compression suivant  $X_3$  que suivant l'un des deux autres axes. Le matériau est donc anisotrope, et il est alors naturel que la surface de charge soit orientée préférentiellement vers la partie inférieure du plan contrainte moyenne - contrainte déviatoire (qui correspond au chargements essentiellement radiaux, cf. §3.4.1).

10. i.e., normales aux directions radiales  $X_1$  et  $X_2$ .

11. i.e., normales à la direction axiale  $X_3$ .

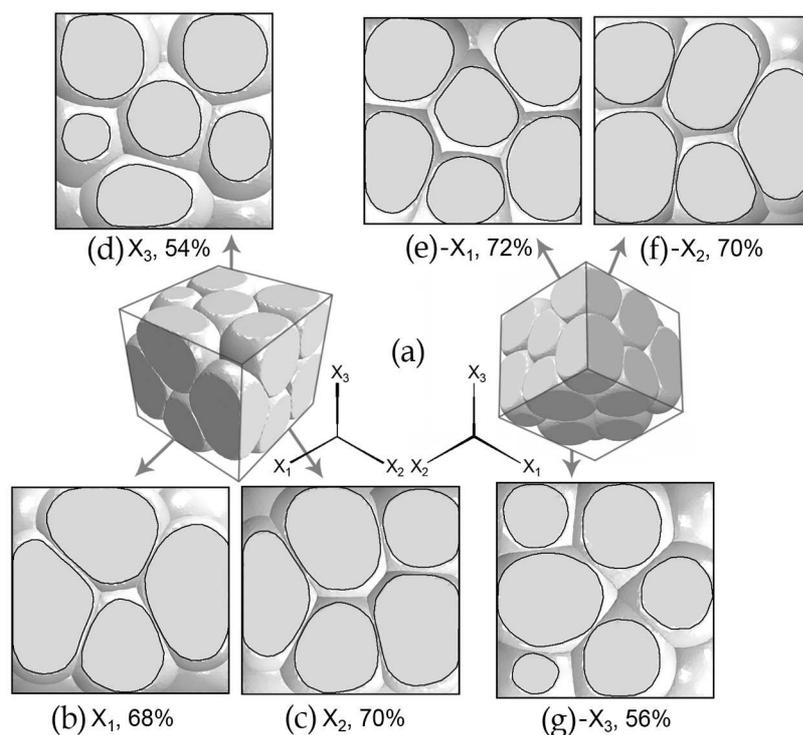


FIGURE 3.20 – Chargement matrice-déviatoire avec la densité relative intermédiaire  $D_1 = 0,7$  et la densité relative finale  $D_f = 0,95$  : proportion de surface en contact avec les parois frontières de l'échantillon. (a) Géométrie déformée 3D de l'échantillon, (b) paroi de normale  $+X_1$ , (c) paroi de normale  $+X_2$ , (d) paroi de normale  $+X_3$ , (e) paroi de normale  $-X_1$ , (f) paroi de normale  $-X_2$ , (g) paroi de normale  $-X_3$ .

### Écrouissage du matériau des grains.

Dans le matériau constitutif des grains, la déformation plastique équivalente est directement liée à la limite élastique, d'après l'équation (1.29), de sorte que la répartition de la déformation plastique équivalente illustre l'écrouissage du matériau. La Figure 3.21 montre, pour ce même chargement, que la répartition de la déformation plastique équivalente est très hétérogène. Il n'est pas possible de voir de tendance particulière dans la répartition de la déformation plastique équivalente, sinon qu'elle se concentre à proximité des surfaces de contact. Une simulation supplémentaire a donc été réalisée, toujours avec le même chemin de chargement, en supprimant l'écrouissage du matériau ( $n = 0$ , et tous les autres paramètres, définis par (3.1), sont conservés).

Les résultats sont illustrés par la Figure 3.22. La structure des contacts entre les deux simulations avec et sans écrouissage est très similaire ; une illustration en est donnée dans un plan de coupe particulier (Figure 3.22a,b). Il est naturel que la surface de charge associée au matériau sans écrouissage soit plus grande (Figure 3.22c), car, toujours d'après

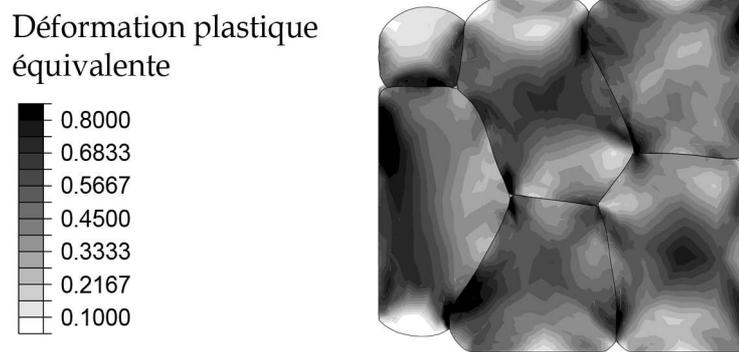


FIGURE 3.21 – Répartition de la déformation plastique équivalente dans une coupe de l'échantillon. Cet exemple correspond au chargement matrice-déviatoire présenté en Figure 3.19, avec une densité relative intermédiaire  $D_1 = 0,7$  et une densité relative finale  $D_f = 0,95$ .

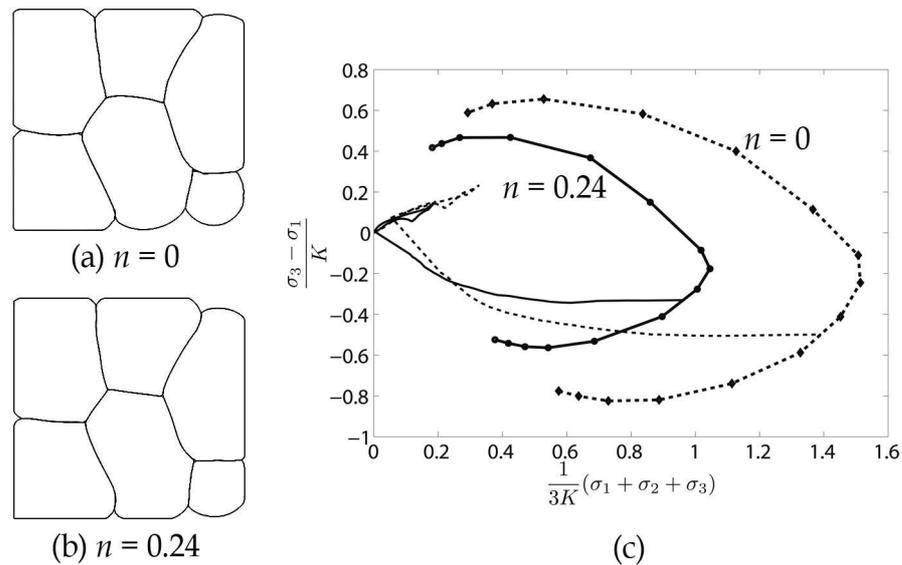


FIGURE 3.22 – Chargement matrice-déviatoire avec la densité relative intermédiaire  $D_1 = 0,7$  et la densité relative finale  $D_f = 0,95$  : (a) Géométrie déformée de l'échantillon, sans écrouissage ( $n = 0$ ), (b) Géométrie déformée de l'échantillon, avec écrouissage ( $n = 0,24$ ), et (c) Chemins de contrainte et surface de charge associée,  $s$  avec écrouissage ( $n = 0,24$ ) et sans écrouissage ( $n = 0$ ).

l'équation (1.29), la limite élastique du matériau est plus grande pour  $n = 0$  que pour  $n > 0$  tant que la déformation équivalente totale est inférieure à 100%. En revanche l'orientation de la surface ne semble guère influencée par l'écrouissage du matériau constitutif des grains ; en tous cas, le comportement n'est pas plus isotrope lorsque le matériau des grains ne s'écrouit pas.

Les résultats de cette comparaison indiquent que la surface de charge dépend du domaine élastique du matériau constitutif des grains. En revanche, l'hétérogénéité de la déformation plastique – et donc du niveau d'écroissage – ne semble pas influencer l'anisotropie des surfaces de charge.

En conclusion, le mécanisme de croissance des surfaces de charge est causé par l'effet combiné de la croissance des surfaces de contact entre les grains et de l'augmentation par écroissage du domaine élastique du matériau constitutif des grains. L'orientation préférentielle des contacts explique l'anisotropie structurelle induite par le chargement. En revanche, aucune influence significative de l'écroissage des grains sur l'anisotropie n'est visible. En d'autres termes, la forme de la surface (et non sa taille) est essentiellement conditionnée par la géométrie des surfaces de contact entre les grains.

### 3.4.3 Écroissage cinématique rotatif : rotation des surfaces de charge.

L'écroissage rotatif est généralement attribué à la réorganisation des contraintes dans l'échantillon, due à la réorganisation des grains (Dafalias *et al.*, 2006; Yin *et al.*, 2009). Yin *et al.* (2009) proposent une analyse du comportement rotatif des surfaces de charge à partir d'une modélisation micromécanique. Néanmoins, la MPFEM permet une analyse plus naturelle, notamment parce qu'elle permet de se référer à une description réaliste, et au besoin quantitative, de la géométrie déformée des grains et des surfaces de contact.

Le fait que le matériau constitutif des grains soit modélisé avec un écroissage isotrope a une conséquence sur le comportement macroscopique. La moindre déformation plastique augmente la limite élastique du matériau (cf. Équation (1.29)). En revanche, elle ne peut pas diminuer. Par conséquent, si le seul mécanisme en jeu était l'écroissage du matériau des grains, la forme des surfaces de charge pourrait évoluer avec le chargement, mais leur taille ne pourrait qu'augmenter. Il serait alors impossible d'observer un comportement comme celui de la Figure 3.14a-b, où le domaine élastique (représenté par la surface de charge) diminue. Un tel comportement ne peut donc pas s'expliquer par l'écroissage du matériau constitutif des grains.

L'explication est donc à chercher dans la structure des contacts. Un examen approfondi de la structure de l'échantillon au cours des chargements pour lesquels on observe ce type de comportement révèle qu'il y a des pertes de contact dans la structure. Ces pertes de contact sont visibles sur la Figure 3.23, dans l'exemple du chargement isotrope-déviatoire avec  $D_1 = 0,6$ . Ce processus, au cours duquel certains contacts disparaissent, et sont progressivement remplacés par d'autres, est capable d'expliquer la rotation des surfaces de charge, par le mécanisme suivant (Figure 3.24).

Un chargement quelconque crée des surfaces de contact qui sont orientées d'une manière fortement influencée par la direction des efforts ou des déformations imposées.

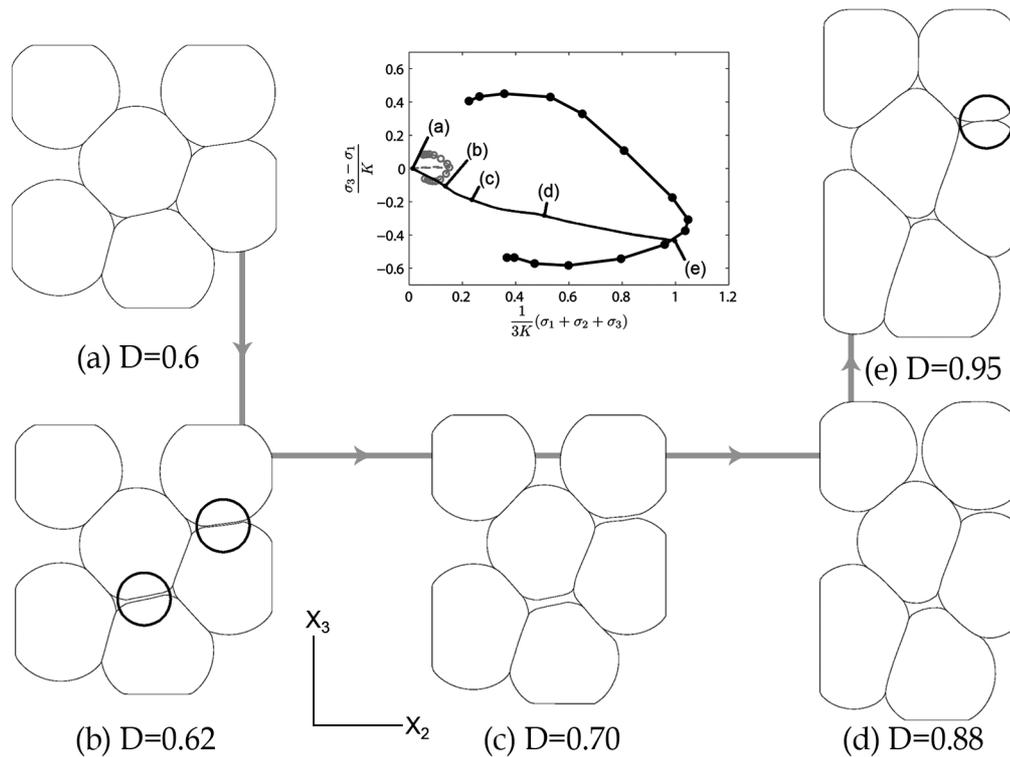


FIGURE 3.23 – La rotation de la surface de charge s’accompagne de la perte de plusieurs contacts dans la structure. Cet exemple correspond au chargement isotrope-déviatoire, avec  $D_1 = 0,6$ . La structure créée par le premier chemin, après décharge à  $D_1 = 0,6$  (a), est modifiée par des pertes de contacts, mises en évidence en (b). La structure évolue ensuite avec le second chemin (c,d), et finalement certains des contacts perdus se reforment (e). Les différents points (a)-(b)-(c)-(d)-(e) sont indiqués dans l’espace des contraintes pour illustrer la position des points de chargement successifs le long du chemin de chargement.

Ainsi, une compression en matrice créera des surfaces de contacts dont les normales seront plutôt orientées dans la direction axiale que dans la direction radiale ; et les surfaces de contact associées à cette direction seront plus grandes. Par conséquent (une fois que le stade de réarrangement, qui concerne les très faibles densités relatives, est passé), tant que le chargement reste monotone, les efforts de contacts sont compressifs, car les surfaces de contact sont orientées de telle sorte qu’elles s’opposent au chargement imposé (Figure 3.24a).

Par contre, lorsqu’un changement intervient dans le chemin de chargement, certains grains en contact sont séparés à cause de la cinématique imposée par le nouveau chemin (Figure 3.23b et 3.24b). Dans l’exemple des Figures 3.23 et 3.24, la plastification selon le second chemin provoque la séparation de certains contacts (Figure 3.23b) qui sont préférentiellement orientés suivant la direction  $X_3$ . Une fois que ces contacts sont séparés, ils ne transmettent plus d’effort (Figure 3.24d-e). Alors, une pression macroscopique

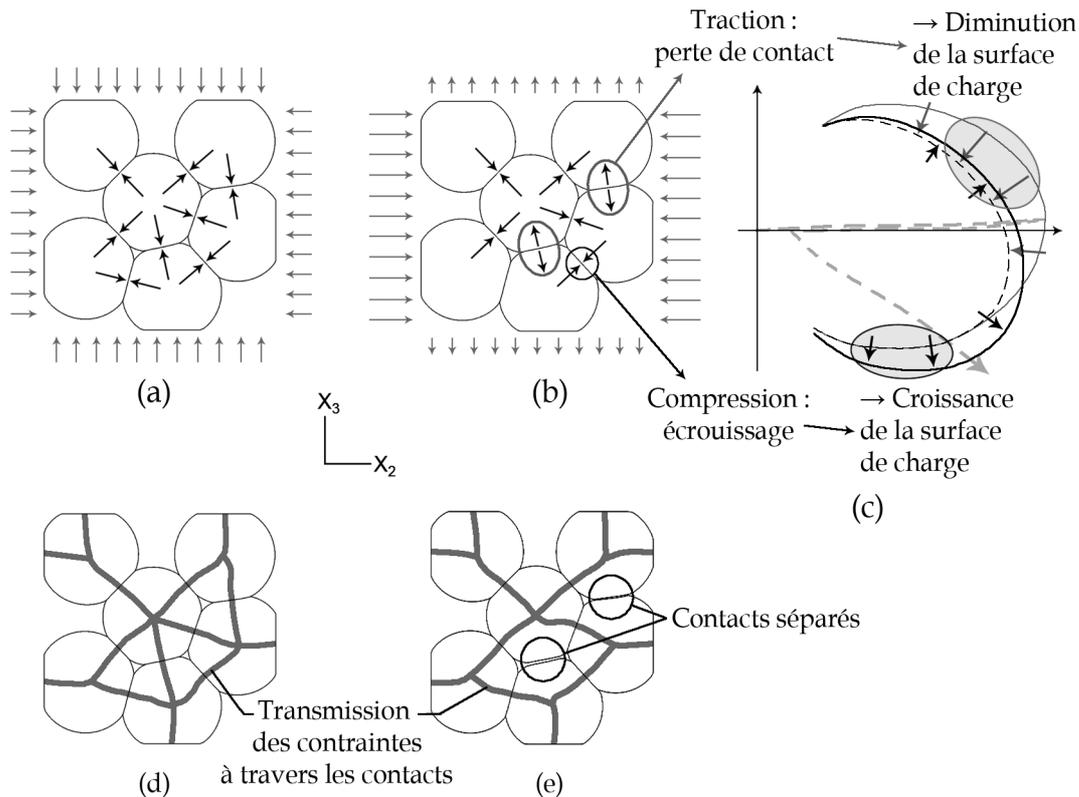


FIGURE 3.24 – Illustration schématique des mécanismes qui sont à l’origine de la rotation des surfaces de charge, d’après l’exemple du chargement isotrope-déviatoire avec un changement de chemin à  $D_1 = 0,6$ . (a) Pendant une compression monotone, tous les contacts sont en compression, et les efforts sont transmis à travers tous les contacts (d). (b) Après le changement de chemin, la nouvelle cinématique sépare certains contacts. La perte de ces contacts cause alors une diminution brusque de la surface de contact à travers laquelle les contraintes dans la direction  $X_3$  sont transmises au sein de l’échantillon (e). La résistance à la déformation plastique est alors plus faible dans cette direction. En conséquence, la surface de charge diminue dans toutes les directions de contraintes associées à des chargements qui impliquent une compression dans la direction  $X_3$  (c). En parallèle, les contacts qui restent en compression après le changement de chemin continuent à contribuer à la croissance de la surface de charge par l’effet de l’écrouissage et de la croissance des surfaces de contact.

appliquée dans la direction  $X_3$  se répartit sur la surface des contacts restants, de sorte que la plastification nécessite une amplitude de contrainte plus faible (la surface de contact étant plus faible, pour une même contrainte macroscopique, la pression aux contacts est plus élevée). Le résultat de ce phénomène est une diminution du domaine élastique dans toute la zone de l’espace des contraintes correspondant aux chemins de chargements imposant une compression dans la direction  $X_3$  (Figure 3.24c).

Par contre, les contacts « favorisés » par le nouveau chemin (i.e., qui demeurent en

compression après changement de chemin) continuent à contribuer à la croissance des surfaces de charge par le jeu combiné de l'augmentation des surfaces de contact et de l'écrouissage du matériau (Figure 3.24c).

Le résultat de ce mécanisme sur la surface de charge est de faire « reculer » le domaine élastique dans la direction du premier chargement, tout en l'agrandissant de manière approximativement isotrope, au travers de la croissance des contacts restants, ce qui se traduit par une rotation de la surface de charge en direction du nouveau chemin. Le caractère instantané de la perte des contacts explique le caractère quasi-instantané de la modification des surfaces de charge lors du changement de chemin (observé sur la Figure 3.14).

Etant données les amplitudes de déformation constatées, il paraît peu probable que la cohésion (naturellement faible, notamment pour des poudres sphériques)<sup>12</sup> affecte beaucoup ce phénomène. La question reste cependant ouverte.

D'autre part, dans les résultats présentés au paragraphe 3.3, l'écrouissage rotatif n'est visible qu'à faible densité relative. En parallèle, il y a une corrélation entre les pertes de contact observées dans la structure de l'échantillon et la rotation des surfaces de charge. Ainsi, les pertes de contact sont nombreuses et évidentes pour les chargements isotrope-déviatoire ou matrice-déviatoire avec  $D_1 = 0,6$  (cf. Figure 3.23). Elles sont en revanche très peu nombreuses et beaucoup moins marquées pour des chargements comme matrice-déviatoire avec  $D_1 = 0,9$  ou isotrope-déviatoire avec  $D_1 = 0,8$ . Elles sont complètement inobservables dans le cas du chargement isotrope-déviatoire avec  $D_1 = 0,9$ , pour lequel il n'y a aucune rotation visible de la surface de charge. Compte tenu des mécanismes précédemment proposés (paragraphe 3.4.2 et 3.4.3), nous expliquons la dépendance entre densité relative et écrouissage cinématique de la manière suivante.

Lorsque la densité relative est élevée, les surfaces de contact sont plus grandes. L'échantillon se rapproche alors d'un assemblage de polyèdres qui s'emboîtent, de sorte que les mouvements relatifs des grains (et donc la perte des contacts) sont plus difficiles. De plus, comme le suggère la Figure 3.25, l'amplitude de déformation appliquée à l'échantillon pendant le deuxième chemin est nettement moins importante pour passer de  $D_1 = 0,9$  à  $D_f = 0,95$  (Figure 3.25a,c) que pour passer de  $D_1 = 0,7$  à  $D_f = 0,95$  (Figure 3.25b,d). La structure de l'échantillon est donc d'autant moins modifiée que  $D_1$  est grand, et les surfaces de charge suivent la même tendance.

Lors du changement de chemin, il se produit dans la structure une réorganisation des grains, constituée de mouvements de corps rigides qui se produisent lors du changement de chemin : les grains se réorganisent en quelque sorte pour s'adapter au nouveau chemin. Cette réorganisation est à l'origine des pertes de contacts qui provoquent la rotation des

12. On rappelle que la cohésion, dans les poudres, est essentiellement due à l'accroche mécanique de grains aux formes complexes et à la présence de lubrifiant. Les poudres sphériques sont en général peu cohésives.

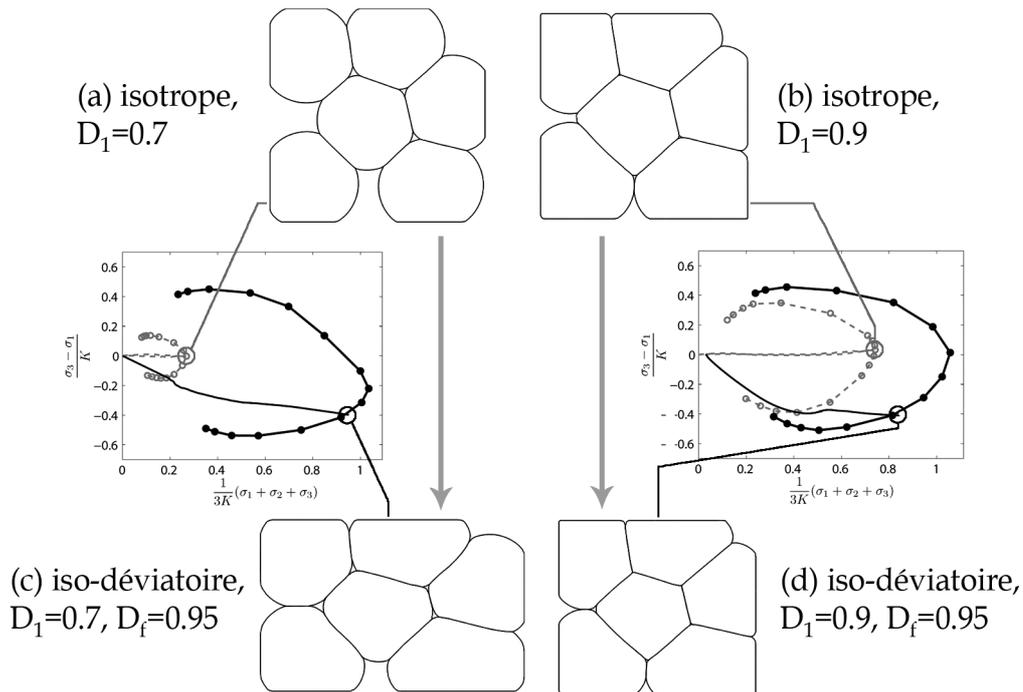


FIGURE 3.25 – Comparaison des structures obtenues avec le chargement isotrope-déviatoire, pour  $D_1 = 0,7$  et  $D_1 = 0,9$ . (a,c) Structure après compression isotrope jusqu'à  $D_1$ . (b,d) Structure à  $D_f = 0,95$ .

surfaces de charge. Elle est d'autant plus faible que le changement de chemin se fait à densité relative plus élevée, et que l'amplitude du changement de direction de chargement est moindre.

Ainsi la mémoire du chemin précédent dans la structure de l'échantillon dépend directement du nombre de pertes de contacts. La perte de contact est le seul mécanisme qui efface la mémoire de l'échantillon. Ce mécanisme de « perte de mémoire » est assez bien visible sur la Figure 3.23. Comme on l'a vu, tout contact contient une « information » qui contribue à la forme et à la taille de la surface de charge : cette information est la taille et l'orientation du contact. La contribution du contact à la résistance macroscopique (à la surface de charge) est perdue à la perte du contact, et lorsque certains contacts perdus se reforment (Figure 3.23e), on n'observe aucune modification des surfaces de charge. Ceci s'explique par la déformation plastique des grains entre la perte du contact et sa reformation, qui redonne une courbure aux surfaces de contact séparées. Ainsi lorsque le contact se reforme, tout se passe exactement comme s'il n'avait jamais existé auparavant (Figure 3.26).

Les pertes de contact sont directement liées à la possibilité de réorganisation lors du changement de chemin, possibilité qui diminue avec la densification. En parallèle,

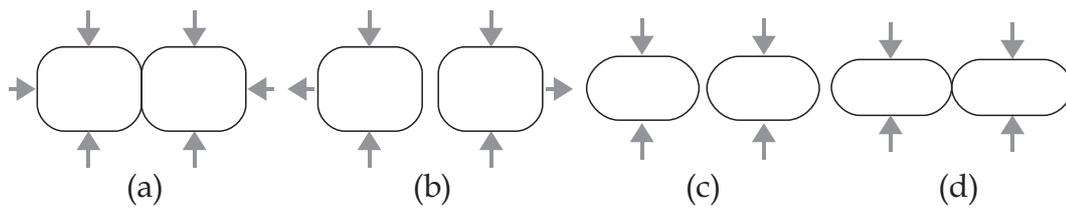


FIGURE 3.26 – Mécanisme de perte d'un contact. (a) Formation des contacts, (b) perte d'un contact, (c) déformation plastique des zones de contact perdues, (d) reformation du contact.

les surfaces de charge continuent leur croissance homothétique ; l'influence visible du chemin initial sur la forme des surfaces de charge est alors due à la proportion de contacts qui ne se sont pas séparés, et qui continuent à transmettre des contraintes et à croître. Leur déformation progressive pourrait théoriquement faire disparaître cette trace du premier chemin ; mais visiblement, ce phénomène de transformation progressive des surfaces de contact par déformation plastique est trop lent pour être significatif avant d'atteindre la pleine densité.

Le paragraphe 3.4.4 propose une première approche (très sommaire) de modélisation de ces phénomènes. Cette approche ne prétend pas être en mesure de s'intégrer telle quelle dans une loi de comportement macroscopique, mais simplement montrer qu'il est possible de formuler assez simplement les phénomènes décrits plus haut.

#### 3.4.4 Vers une modélisation.

Parmi les modèles cités au paragraphe 3.3.3, décrivant l'évolution de l'anisotropie dans les matériaux granulaires au moyen d'un écrouissage rotatif, celui développé par Lade et Inel (Lade et Inel, 1997; Inel et Lade, 1997) propose un mécanisme assez élaboré pour décrire l'évolution des surfaces de charge avec des chemins de chargement complexes. Les surfaces de charge sont construites à partir de plusieurs surfaces associées à un mécanisme cinématique rotatif, isotrope, ou encore à la mémoire du matériau. Dans ce modèle, on retrouve donc tous les mécanismes décrits dans cette thèse. Ce modèle, appliqué au sable, ne peut pas s'appliquer tel quel aux poudres ductiles. Mais il nous a paru intéressant de nous en inspirer pour donner quelques indications géométriques, qui permettraient la prise en compte dans un modèle des mécanismes observés.

Inel et Lade décrivent le domaine élastique à partir de deux surfaces. Dans notre approche, la forme de la surface de charge n'est pas décrite de manière précise, car les résultats qualitatifs présentés ici ne permettent pas d'avoir de certitude quant à la forme des surfaces. On suppose donc que les surfaces peuvent être décrites par un ellipsoïde de révolution dont l'excentricité est constante, et dont une extrémité coïncide avec l'origine

de l'espace des contraintes. L'évolution proposée des surfaces est illustrée sur la Figure 3.27.

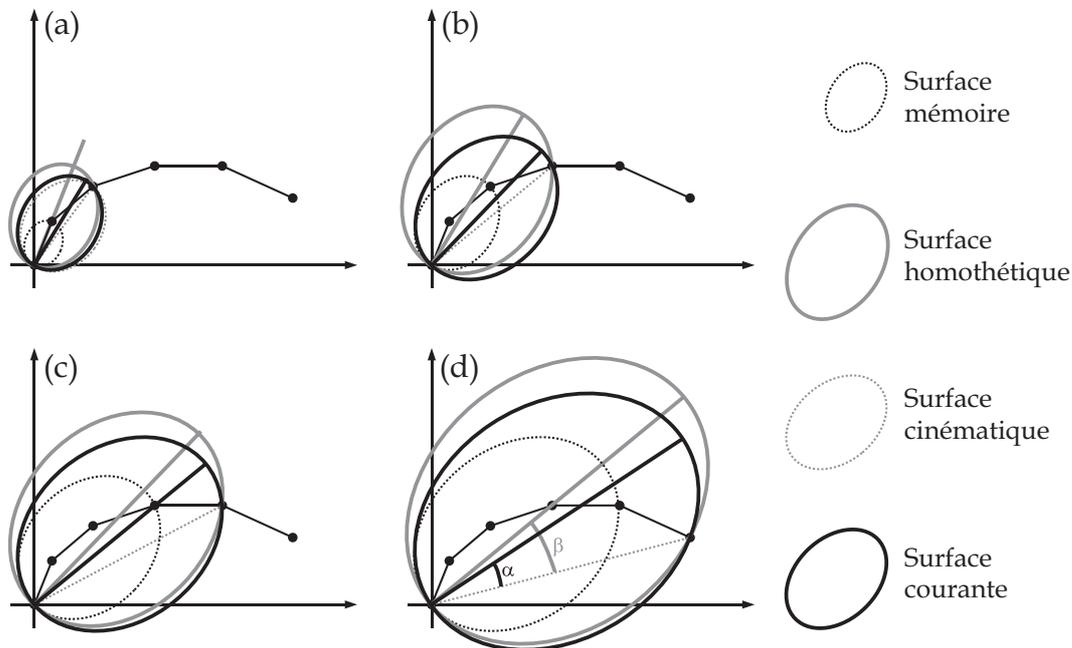


FIGURE 3.27 – Suggestions pour la modélisation de l'évolution des surfaces de charge avec le chemin de chargement.

Le comportement cinématique rotatif est décrit par une surface elliptique dont l'extrémité coïncide avec le point de chargement, qui sera appelée « surface cinématique ». L'écroutissage isotrope est représenté par l'homothétie d'une surface de référence qui sera appelée « surface mémoire ». La surface déduite par homothétie de la surface mémoire sera appelée « surface homothétique ». La surface de charge courante sera déduite des surfaces homothétique et cinématique. Chacune des trois surfaces (cinématique, homothétique et courante) possède la propriété de contenir le point de chargement.

Considérons un chemin de chargement incrémental dans l'espace des contraintes. Au premier incrément, le matériau n'a pas encore de mémoire, de sorte que la surface mémoire n'existe pas, et la surface de charge est la surface cinématique. Au second incrément, cette surface devient la surface mémoire (Figure 3.27a). De même, à un incrément quelconque, la surface courante associée à l'incrément précédent devient surface mémoire (Figure 3.27b-d). La surface homothétique est alors définie par l'homothétie de la surface mémoire, dont le centre est l'origine, et dont le rapport est tel que la surface homothétique ainsi obtenue contienne le point de chargement. La surface de charge courante peut alors se définir par la surface qui contient le point de chargement, et dont le grand axe se situe entre celui de la surface cinématique et celui de la surface isotrope. La position de l'axe se caractérise par les angles  $\alpha$  et  $\beta$  définis sur la Figure 3.27d.

Le poids de chacun des deux mécanismes, cinématique et homothétique, est défini par le rapport des angles  $\alpha$  et  $\beta$ , qu'il est possible d'exprimer par une fonction de la densité relative, avec les conditions que  $\alpha/\beta = 1$  quand la densité relative est égale à 1, et que  $\alpha/\beta = 0$  quand la densité relative est égale à sa valeur initiale. Ceci peut s'écrire au moyen d'une expression du type suivant :

$$\alpha = f(\rho, \rho_0)\beta \quad (3.8)$$

où  $\rho$  est la densité relative locale dans le milieu continu équivalent,  $\rho_0$  la densité relative locale initiale, et  $f$  une fonction qui définit le poids des deux mécanismes au cours du chargement, en vérifiant les conditions énoncées ci-dessus.

Les angles  $\alpha$  et  $\beta$  se définissent dans le plan contenant le grand axe de la surface mémoire et le point de chargement, il est donc possible de généraliser ce mécanisme en trois dimensions.

### 3.5 Conclusion.

L'approche développée ici est fondée sur l'étude d'un empilement aléatoire de 15 sphères. Cet échantillon semble difficilement assimilable à un massif de poudre réel et représentatif ; toutefois, il permet de mettre en évidence des liens entre surfaces de charge et chemins de chargement. Les surfaces de charge ainsi obtenues révèlent un mécanisme d'écroutissage isotrope, caractérisé par une croissance homothétique des surfaces de charge ; et un mécanisme d'écroutissage cinématique rotatif, caractérisé par la rotation des surfaces de charge. De plus, la MPFEM permet d'étudier en parallèle la structure interne de l'échantillon et les mécanismes observés sur les surfaces de charge. Il est alors possible de comprendre les liens entre les phénomènes à l'échelle granulaire et les mécanismes macroscopiques. Les principales conclusions de cette étude se résument de la manière suivante :

1. La forme asymétrique des surfaces de charge créées par un chargement déviatoire est reliée à une anisotropie dans la structure. Cette anisotropie est liée à la taille des surfaces de contact entre les grains et à leurs orientations. L'écroutissage hétérogène du matériau constitutif des grains n'a pas d'influence visible sur l'anisotropie.
2. La rotation des surfaces de charge s'explique par la réorganisation des grains et des contacts entre les grains lors d'un changement de direction du chemin de chargement. En particulier, la perte de certains contacts dans la structure est à l'origine d'une diminution instantanée du domaine élastique.

3. L'importance des mécanismes d'écroutissage isotrope et cinématique dépend fortement de la densité relative et de la possibilité de mouvement relatif entre les grains.

C'est cette compréhension des mécanismes à l'échelle granulaire qui fait l'intérêt principal de cette étude, et qui ouvre la voie à la prise en compte de ces phénomènes dans les modèles macroscopiques. L'application de cette méthode à des échantillons plus réalistes s'avère néanmoins assez incontournable, de manière à mettre éventuellement en évidence des phénomènes causés par les mécanismes granulaires qui ne sont pas pris en compte ici, en particulier la cohésion ou la forme réelle des grains.

# Conclusion générale

Cette thèse présente des applications d'une méthode qui consiste à étudier, au moyen de simulations par éléments finis, les milieux granulaires sous la forme d'assemblages de grains maillés. Cette méthode a l'avantage de fournir des résultats très précis, incluant les mouvements des grains, leurs déformations et les répartitions de contrainte et de déformation tant aux interfaces qu'à l'intérieur des grains. Elle a pour désavantage de nécessiter un temps de calcul important.

L'application de la méthode des éléments finis à des assemblages de particules maillées s'adapte particulièrement bien à l'étude des poudres ductiles, en raison du comportement déformable des grains, dont la prise en compte par la méthode des éléments finis est très aboutie<sup>13</sup>.

Le temps de calcul qu'elle impose interdit l'étude d'échantillons de taille statistiquement représentative, mais il est certain que dans quelques années, les progrès de l'informatique rendront cette tâche possible sans grand effort. Cette thèse montre que cette méthode est largement exploitable, même lorsqu'on se restreint à des échantillons de petite taille.

Premièrement, cette méthode permet de reproduire fidèlement les efforts de compression expérimentaux. Les surfaces de charge obtenues n'ont pas été comparées quantitativement avec des résultats expérimentaux de la littérature à cause du nombre restreint de particules dans l'échantillon étudié. Toutefois, les surfaces de charge obtenues pour la compression en matrice et la compression isotrope présentent une forte ressemblance qualitative avec les résultats expérimentaux. De plus, l'obtention des paramètres  $K$  et  $n$  pour des poudres réelles, en vue de la calibration des modèles numériques, ne présente pas de difficultés de principe.

Deuxièmement, la richesse des informations fournies par la méthode à l'échelle de la microstructure permet une avancée dans la compréhension des micromécanismes qui sont à l'origine du comportement macroscopique particulier des milieux granulaires.

---

13. La prise en compte, par cette méthode, de particules fragiles, impose de modéliser la fracturation des grains, ce qui est plus délicat.

Ainsi l'étude approfondie des réseaux de contacts et des interactions entre contacts, a permis :

- d'expliquer les mécanismes qui régissent l'évolution des surfaces de charge avec le chemin de chargement ;
- de développer, et de valider, une loi de contact pour la modélisation de la compression à haute densité relative avec la méthode des éléments discrets.

Ces résultats ouvrent de multiples perspectives, dont les suivantes :

1. La loi de contact pour la compression à haute densité relative ouvre la voie à l'utilisation de la méthode des éléments discrets pour l'étude du comportement macroscopique en haute densité relative d'échantillons comprenant un grand nombre de sphères.
2. La méthode des éléments finis appliquée à des assemblages de particules maillées peut – ou pourra dans un avenir proche – être validée par la comparaison de surfaces de charge issue d'études expérimentales, sur la base d'échantillons comprenant plus de sphères.
3. Le travail du Chapitre 3 peut être continué par la caractérisation des mécanismes de déformation des assemblages de grains en vue de la formulation d'une règle d'écoulement et de la validation d'une loi de comportement élastoplastique complète.
4. Cette méthode peut être enrichie par la cohésion interfaciale, par des géométries de grains plus complexes ou des matériaux différents. Il est nécessaire de compléter la modélisation pour s'assurer que tous les mécanismes macroscopiques sont bien reproduits. En particulier, l'ajout de la cohésion ouvre la voie à la compréhension des causes et des mécanismes de fissuration pendant la compression à froid des poudres industrielles. La modélisation de ces phénomènes est un enjeu très important.

# Bibliographie

- ABAQUS (2009a). *ABAQUS Version 6-8-3, Theory Manual*. Dassault systèmes Simulia.
- ABAQUS (2009b). *ABAQUS Version 6-8-3, User documentation*. Dassault systèmes Simulia.
- AKISANYA, A. R., COCKS, A. C. F. et FLECK, N. A. (1997). The yield behaviour of metal powders. *International Journal of Mechanical Sciences*, 39:1315–1324.
- ARZT, E. (1982). The influence of an increasing particle coordination on the densification of spherical powders. *Acta Metallurgica*, 30:1883–1890.
- AZAMI, A. et KHOEI, A. (2006). 3D computational modeling of powder compaction processes using a three-invariant hardening cap plasticity model. *Finite Elements in Analysis and Design*, 42:792–807.
- BIERWISCH, C., KRAFT, T., RIEDEL, H. et MOSELER, M. (2009). Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57:10–31.
- BIWA, S. et STORÅKERS, B. (1995). An analysis of fully plastic brinell indentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43:1303–1333.
- BOISSONNAT, J.-D., DEVILLERS, O., PION, S., TEILLAUD, M. et YVINEC, M. (2002). Triangulations in CGAL. *Computational Geometry : Theory and Applications*, 22:5–19.
- BRANDT, J. et NILSSON, L. (1999). A constitutive model for compaction of granular media, with account for deformation induced anisotropy. *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials*, 4:391–418.
- CHEN, Y. (2008). *Contribution à la modélisation de la compression des poudres par une méthode d'éléments discrets maillés*. Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Grenoble.
- CHEN, Y., IMBAULT, D. et DORÉMUS, P. (2006). Numerical simulation of cold compaction of 3d granular packings. *Materials Science Forum*, 534-536:301–304.
- CHEN, Y., IMBAULT, D. et DORÉMUS, P. (2008). Experiment and simulation using meshed discrete particles : comparison for compaction of 3d irregular randomly packed particles.

- In Proceedings of the Euro PM2008, Vol. 3, pages 139–144. European Powder Metallurgy Association.*
- CHTOUROU, H., GAKWAYA, A. et GUILLOT, M. (2002). Modeling of the metal powder compaction process using the cap model. part ii. numerical implementation and practical applications. *International Journal of Solids and Structures*, 39:1077–1096.
- CUNDALL, P. A. et STRACK, O. D. L. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65.
- DAFALIAS, Y. F., MANZARI, M. T. et PAPADIMITRIOU, A. G. (2006). SANICLAY : simple anisotropic clay plasticity model. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 30:1231–1257.
- DONZÉ, F. V., RICHEFEU, V. et MAGNIER, S.-A. (2009). Advances in discrete element method applied to soil, rock and concrete mechanics, in : State of the art of geotechnical engineering. *Electronic Journal of Geotechnical Engineering*, page 44.
- DRUCKER, D. C., GIBSON, R. E. et HENKEL, D. J. (1957). Soil mechanics and work-hardening theories of plasticity. *Transactions ASCE*, 122:338–346.
- DRUCKER, D. C. et PRAGER, W. (1952). Soil mechanics and plastic analysis or limit design. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 10:157–175.
- FALGON, D., VIDAL-SALLÉ, E., BOYER, J.-C., PECZALSKI, R. et ANDRIEU, J. (2005). Identification procedure of a hardening law for powder compaction. *Powder Technology*, 157(1-3):183 – 190. 4th French Meeting on Powder Science and Technology.
- FISCHMEISTER, H. F. et ARTZ, E. (1983). Densification of powders by particle deformation. *Powder Technology*, 26:82–90.
- FLECK, N. A. (1995). On the cold compaction of powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43:1409–1431.
- FLECK, N. A., KUHN, L. T. et McMEEKING, R. M. (1992). Yielding of metal powder bonded by isolated contacts. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40:1139–1162.
- FRACHON, A. (2002). *Modélisation et simulation de la compression en matrice de poudres métalliques*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- FRENNING, G. (2008). An efficient finite/discrete element procedure for simulating compression of 3d particle assemblies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197:4266–4272.
- FRENNING, G. (2010). Compression mechanics of granule beds : A combined finite/discrete element study. *Chemical Engineering Science*, 65:2464–2471.

- GELLATLY, B. J. et FINNEY, J. L. (1982a). Calculation of protein volumes : an alternative to the voronoï procedure. *Journal of Molecular Biology*, 161:305–322.
- GELLATLY, B. J. et FINNEY, J. L. (1982b). Characterisation of models of multicomponent amorphous metals : the radical alternative to the voronoï polyhedron. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 50:313–329.
- GETHIN, D. T. (1992). Finite element simulation in metal powder die compaction. *Metal Powder Report*, 47:53.
- GETHIN, D. T., LEWIS, R. W. et RANSING, R. S. (2003). A discrete deformable element approach for the compaction of powder systems. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 11:101–114.
- GETHIN, D. T., RANSING, R. S., LEWIS, R. W., DUTKO, M. et CROOK, A. J. L. (2001). Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material. *Computers and Structures*, 79: 1287–1294.
- GETHIN, D. T., YANG, X.-S. et LEWIS, R. W. (2006). A two dimensional combined discrete and finite element scheme for simulating the flow and compaction of systems comprising irregular particulates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:5552–5565.
- HARTHONG, B., JÉRIER, J.-F., RICHEFEU, V., CHAREYRE, B., DORÉMUS, P., IMBAULT, D. et DONZÉ, F.-V. (2010). FEM-DEM models for high-density compaction of ductile powders. *Submitted to Mechanics of Materials*.
- HASHIGUCHI, K. et MASE, T. (2007). Extended yield condition of soils with tensile yield strength and rotational hardening. *International Journal of Plasticity*, 23:1939–1956.
- HEYLIGER, P. R. et McMEEKING, R. M. (2001). Cold plastic compaction of powders by a network model. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49:2031–2054.
- HILL, R. (1950). *The mathematical theory of plasticity*. Clarendon Press, Oxford.
- HILL, R., STORÅKERS, B. et ZDUNEK, A. (1989). A theoretical study of the brinell hardness test. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 423:301–330.
- INEL, S. et LADE, P. V. (1997). Rotational kinematic hardening model for sand. Part I : Characteristic work hardening law and predictions. *Computer and Geotechnics*, 21:217–234.
- IWASHITA, K. et ODA, M. (2000). Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method. *Powder Technology*, 109:192–205.
- JAMES, P. J. (1977). Particle deformation during cold isostatic pressing of metal powders. *Powder Metallurgy*, 20:199–204.

- JÉRIER, J.-F. (2010). *Modélisation de la compression haute densité des poudres métalliques ductiles par la méthode des éléments discrets*. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble.
- JÉRIER, J.-F., HARTHONG, B., RICHEFEU, V., CHAREYRE, B., IMBAULT, D., DONZÉ, F.-V. et DORÉ-MUS, P. (2010a). Numerical simulations for isostatic and die compaction of powder by the discrete element method. *Powder Technology*, In Press, Accepted Manuscript.
- JÉRIER, J.-F., IMBAULT, D., DONZÉ, F.-V. et DORÉ-MUS, P. (2009). A geometric algorithm based on tetrahedral meshes to generate a dense polydisperse sphere packing. *Granular Matter*, 11:43–52.
- JÉRIER, J.-F., RICHEFEU, V., IMBAULT, D. et DONZÉ, F.-V. (2010b). Packing spherical discrete elements for large scale simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(25-28):1668–1676.
- JOHNSON, K. L. (1970). The correlation of indentation experiments. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 18:115–126.
- JOHNSON, K. L. (1985). *Contact Mechanics*. Cambridge University Press.
- JONSÉN, P. et HÄGGBLAD, H.-Å. (2005). Modelling and numerical investigation of the residual stress state in a green metal powder body. *Powder Technology*, 155(3):196 – 208.
- JONUSCHEIT, H. et ERNST, E. (2008). Crack detection using acoustic testing technology. *In Proceedings of the Euro PM2008, Vol. 3*, pages 109–114. European Powder Metallurgy Association.
- KOZICKI, J. et DONZÉ, F.-V. (2008). A new open-source software developed for numerical simulations using discrete modelling methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197:4429–4443.
- KOZICKI, J. et DONZÉ, F. V. (2009). Yade-open dem : an open–source software using a discrete element method to simulate granular material. *Engineering Computations*, 26-7:786–805.
- LADE, P. V. et INEL, S. (1997). Rotational kinematic hardening model for sand. Part I : Concept of rotating yield and plastic potential surfaces. *Computer and Geotechnics*, 21:183–216.
- LANDAU, L. et LIFCHITZ, E. (1967). *Théorie de l'élasticité*. Les Éditions Mir Moscou, seconde édition.
- LARSSON, P.-L., BIWA, S. et STORÅKERS, B. (1996). Analysis of cold and hot isostatic compaction of spherical particles. *Acta materialia*, 44:3655–3666.
- LUBLINER, J. (2006). *Plasticity Theory*. Dover Publications.

- MARTIN, C. L. (2004). Elasticity, fracture and yielding of cold compacted metal powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52:1691–1717.
- MARTIN, C. L. et BOUVARD, D. (2003). Study of the cold compaction of composite powders by the discrete element method. *Acta Materialia*, 51:373–386.
- MARTIN, C. L., BOUVARD, D. et SHIMA, S. (2003). Study of particle rearrangement during powder compaction by the discrete element method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51:667–693.
- MCDONALD, S. A., MOTAZEDIAN, F., COCKS, A. C. F. et WITHERS, P. J. (2009). Shear cracking in an al powder compact studied by x-ray microtomography. *Materials Science and Engineering A*, 508:64–70.
- MESAROVIC, S. D. et FLECK, N. A. (1999). Spherical indentation of elastic-plastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 455:2707–2728.
- MESAROVIC, S. D. et FLECK, N. A. (2000). Frictionless indentation of dissimilar elastic-plastic spheres. *International Journal of Solids And Structures*, 37:7071–7091.
- MUIR WOOD, D. (2004). Experimental inspiration for kinematic hardening models. *Journal of engineering mechanics*, 130:656–664.
- NEWSON, T. A. et DAVIES, M. C. R. (1996). A rotational hardening constitutive model for anisotropically consolidated clay. *Soils and Foundations*, 36:13–20.
- ODA, M. et NAKAYAMA, H. (1989). Yield function for soil with anisotropic fabric. *Journal of Engineering Mechanics*, 115:89–104.
- PAVIER, E. (1998). *Caractérisation du comportement d'une poudre de fer pour le procédé de compression en matrice*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- PAVIER, E. et DORÉMUS, P. (1999). Triaxial characterisation of iron powder behaviour. *Powder Metallurgy*, 42:345–352.
- PIZETTE, P., MARTIN, C. L., DELETTE, G., SORNAY, P. et SANS, F. (2010). Compaction of aggregated ceramic powders : From contact laws to fracture and yield surfaces. *Powder Technology*, 198:240–250.
- PLASSIARD, J. P., BELHEINE, N. et DONZÉ, F. (2009). A spherical discrete element model : calibration procedure and incremental response. *Granular Matter*, 11-5:293–306.
- PM MODNET MODELLING GROUP (1999). Comparison of computer models representing powder compaction process : State of the art review. *Powder Metallurgy*, 42-4:301–311.
- PRADO, J. M. et RIERA, M. D. (2007). Plastic behaviour of green powder metallurgical compacts. *Material Science Forum*, 534-536:305–308.

- PROCOPIO, A. T. et ZAVALIANGOS, A. (2005). Simulation of multi-axial compaction of granular media from loose to high relative densities. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53:1523–1551.
- RAPPAZ, M., BELLET, M. et DEVILLE, M. (1998). *Modélisation numérique en science et génie des matériaux*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- SCHMIDT, I., KRAFT, T. et RIEDEL, H. (2008). Numerical homogenisation of elasto-plastic granule assemblies using discretised particles. In *Proceedings of the Euro PM2008*, pages 169–173. European Powder Metallurgy Association.
- SCHNEIDER, L. C. R. et COCKS, A. C. F. (2002). Experimental investigation of yield behaviour of metal powder compacts. *Powder Metallurgy*, 345:237–245.
- SKRINJAR, O. et LARSSON, P.-L. (2004). On discrete element modelling of compaction of powders with size ratio. *Computational Materials Science*, 31:131–146.
- SRIDHAR, I. et FLECK, N. A. (2000). The yield behaviour of cold compacted composite powders. *Acta Materialia*, 48:3341–3352.
- STORÅKERS, B., BIWA, S. et LARSSON, P.-L. (1997). Similarity analysis of inelastic contact. *International Journal of Solids and Structures*, 34:3061–3083.
- STORÅKERS, B., FLECK, N. A. et McMEEKING, R. M. (1999). The viscoplastic compaction of composite powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47:785–815.
- TABOR, D. (1951). *The hardness of metals*. Oxford university press.
- VU-QUOC, L. et ZHANG, X. (1999). An accurate and efficient tangential force-displacement model for elastic frictional contact in particle-flow simulations. *Mechanics of Materials*, 31:235–269.
- VU-QUOC, L., ZHANG, X. et LESBURG, L. (2001). Normal and tangential force-displacement relations for frictional elasto-plastic contact of spheres. *International Journal of Solids and Structures*, 38:6455–6489.
- WHEELER, S. J., NÄÄTÄNEN, A., KARSTUNEN, M. et LOJANDER, M. (2003). An anisotropic elastoplastic model for soft clays. *Canadian Geotechnical Journal*, 40:403–418.
- WU, C.-Y., COCKS, A. C. F., GILLIA, O. et THOMPSON, D. A. (2003). Experimental and numerical investigations of powder transfer. *Powder Technology*, 138:216–228.
- YIN, Z.-Y., CHANG, C. S., HICHER, P.-Y. et KARSTUNEN, M. (2009). Micromechanical analysis of kinematic hardening in natural clay. *International Journal of Plasticity*, 25:1413–1435.