

Modélisation numérique de la cohésion dans les granulaires

Julien DURON,

encadré par Florence BERTAILS-DESCOUBES et Gauthier ROUSSEAU

ENS Rennes, Inria Grenoble Rhône-Alpes

I. INTRODUCTION

On pourra toujours se réjouir du nombre d'applications de la compréhension des milieux granulaires cohésifs, évoquer les industries pharmaceutique, cosmétique et agro-alimentaire, la prévention des avalanches de neige et des glissements de terrain. Mais il n'en demeure pas moins qu'il s'agit avant tout d'un sujet qui résiste encore aujourd'hui à la communauté scientifique.

Afin de simuler numériquement un milieu granulaire on peu vouloir étudier les évolutions de chaque grains. C'est la méthode des éléments discrets (DEM). Cependant elle n'est pas envisageable aux vu du nombre de particules en jeu dans un tas de sable. Le problème est donc de trouver une modélisation du sable et des lois d'évolutions permettant de modéliser des tas de sables de toutes échelles. Pour faire cela, on peut penser à modéliser le milieu granulaire par un milieu continu, dont les lois de comportement doivent refléter les phénomènes de friction et de cohésion. Les lois de Drucker-Prager, que nous présenterons en détail plus tard, permettent de modéliser ce phénomène au prix de quelques approximations. Une autre difficulté, comme nous le montrerons plus tard, est la complexité de la résolution de ces lois et la modélisation des phénomènes de bordures.

Plusieurs travaux sur les méthode de simulation de milieux granulaires cohésifs ont déjà vu le jour. Certains s'appuient directement sur les lois de Drucker-Prager [4] quand d'autres leur préfèrent des lois de viscosité numériquement plus simples, et donc rapides, à résoudre. Il n'y a pas non plus consensus sur la manière de considérer un milieu granulaire comme un milieu continu : on peut passer par une méthode d'éléments finis [5] ou alors utiliser une méthode du point matériel (MPM).

Notre travail s'inscrit dans ce contexte par la vo-

lonté d'adapter Sand6 [4], un modèle MPM continu de sable sec non cohésif et non nécessairement dense pour qu'il puisse représenter en plus les phénomènes de cohésion.

Nous rappellerons dans une première partie les lois générales du frottement solide, et notre modèle de cohésion. Puis dans une deuxième partie nous aborderons la description et la résolution du problème incrémental associé. Ensuite nous verrons comment passer à un modèle continu pour du sable sec, et enfin l'adaptation du modèle que nous envisagerons, ainsi que les résultats.

II. MODÈLE DE FORCES

Nous considérons dans cette partie et la suivante le milieu granulaire comme un ensemble de grains solides et indéformables.

A. Modèle de frottement sec

Dans ce contexte nous pouvons envisager différentes lois de frottements : collisions inélastiques, loi de frottements visqueux, modèle de Tresca, ou bien la loi de frottements de Signorini-Coulomb [2, p. 23]. Ici, nous choisirons une loi macroscopique pour limiter le nombre de calculs à effectuer. De plus, nous tenons à pouvoir capturer des phénomènes de seuils proches de la réalité, ce qui exclu les modèles visqueux et le modèle de Tresca. Nous choisirons donc la loi de frottement de Signorini-Coulomb qui nous semble être la plus adaptée. Elle se présente de la manière suivante.

On se place dans la situation illustrée par la Figure 1. Soient A et B deux objets en contact en un point C et \vec{e} le vecteur normal au point de contact. On note \vec{r} la force de contact entre les deux objets et \vec{u} la vitesse de B par rapport à A en C . Alors il existe une constante μ positive appelée coefficient de frottement, propre aux matériaux composant A

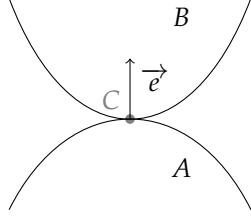


FIGURE 1: Solides A et B en contact

et B, telle que la composante tangentielle de \vec{r} notée \vec{r}_t et sa composante normale r_n vérifient :

$$\begin{cases} \|\vec{r}_t\| = \mu r_n \text{ et } \exists \lambda \in \mathbb{R}^+, \vec{r}_t = -\lambda \vec{u} & \text{si } \|\vec{u}\| > 0 \text{ et } u_n = 0 \\ \|\vec{r}_t\| \leq \mu r_n \text{ si } \|\vec{u}\| = 0 \text{ et } u_n = 0 & \\ \|\vec{r}_t\| = 0 \text{ si } u_n > 0 & \end{cases} \quad (1)$$

Cela peut aussi se comprendre grâce à une vision ensembliste. Notons $K(e, \mu) = \{x \in E \mid x_t < \mu x_n\}$, cône que nous appellerons cône de Coulomb centré sur le vecteur \vec{e} et d'ouverture μ . Alors la relation précédente se traduit par (cf Figure 2) :

$$\begin{cases} \vec{r} \in \partial K(e, \mu) \text{ si } \|\vec{u}\| > 0 \text{ et } u_n = 0 \\ \vec{x} \in K(e, \mu) \text{ si } u_n = 0 \\ \|\vec{r}_t\| = 0 \text{ si } u_n > 0 \end{cases} \quad (2)$$

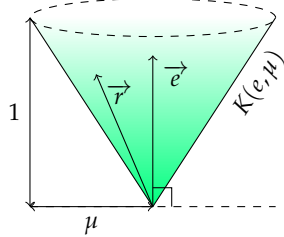


FIGURE 2: Cône de Coulomb

Les deux formulations sont équivalentes et on notera leur satisfaction par u et r : $(u, r) \in C(e, \mu)$.

B. Modèle de forces cohésives

Le modèle de Signorini-Coulomb ne permet de modéliser que les phénomènes de friction. Nous voulons l'étendre aux phénomènes cohésifs. Pour cela, il faut que le vecteur \vec{r} puisse s'opposer à une force écartant les deux solides. Nous choisissons donc une approche consistant à décaler le cône de Coulomb vers le bas d'une constante c dépendant

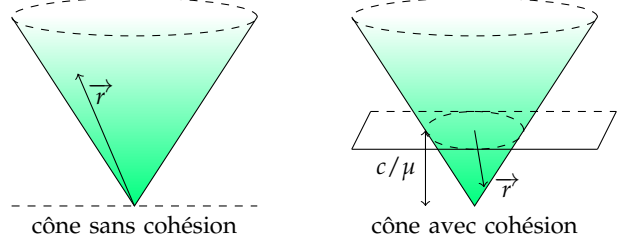


FIGURE 3: Décalage du cône de Coulomb

des matériaux constituant A et B mais aussi du milieu dans lequel ils sont plongés, permettant des forces de réaction attractives. De sorte que $K(e, f, c) = \{x \in E \mid x_t < \mu x_n + c\}$.

III. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME

A. Construction du problème

Plaçons nous dans un système physique en d dimensions, constitué de m solides soumis aux réactions de n contacts en plus des autres forces. Nous notons v le vecteur des vitesses de nos objets selon chaque degré de liberté, et a la dérivée de v par rapport au temps. La loi de Coulomb s'applique au $i^{\text{ème}}$ point de contact et se calcule sur les vecteurs de vitesse u_i et de réaction r_i en se plaçant dans la base propre au contact, à savoir une base constituée du vecteur \vec{e}_i et deux vecteurs tangents à la surface de contact. Nous notons H^\top la matrice de taille $dn * dm$ constituée des matrices de changements de bases permettant tous les changements de base nécessaires. Nous avons

$$u = H^\top v$$

avec $u = (u_1 \dots u_n)$. Nous obtenons alors, pour l'ensemble du système une équation de mouvement de la forme :

$$\begin{cases} Ma = f_{\text{autres}} + Hr \\ u = H^\top v \\ \forall i \in \{1 \dots n\}, (u_i, r_i) \in C(\mu_i, e_i) \end{cases} \quad (3)$$

où r le vecteur des réactions des points de contacts, f_{autres} l'ensemble des forces autres que les forces de réactions et M constituée des inerties de chaque accélération.

Nous discrétisons alors le problème en temps avec un pas de temps dt en posant $a = \frac{(v^+ - v^-)}{dt}$ ce qui nous ramène au système :

$$\begin{cases} Mv^+ + b = dtHr \\ u = H^\top v \\ \forall i, (u_i, r_i) \in C(\mu_i) \end{cases} \quad (4)$$

avec $b = -Mv^- - dtf_{autres}$. Dont les inconnues sont v^+ , u et r .

B. Résolution du problème

Le problème présenté précédemment admet malheureusement des cas particuliers sans solutions, ce qui en illustre les limites. De plus lorsqu'il admet une solution, elle n'est pas nécessairement unique et on sait que certaines configurations rendent la résolution NP-difficile [2, p. 33]. Cependant il est rare en pratique de ne pas avoir de solution et il reste souvent possible de s'en approcher. Pour cela on peut utiliser différents algorithmes d'optimisation qui sont développés dans [2], que ce soit en passant par les fonctions d'Alar-Curnier, le bi-potentiel, ou les méthodes de Fischer-Burmeister. Nous notons que, pour se prémunir des difficultés de résolution, il est possible d'effectuer des approximations sur la loi de Signorini-Coulomb pour obtenir des lois plus simple d'utilisation [6, 1], que ce soit en linéarisant le problème ou en faisant apparaître de la convexité. Ici nous utiliserons Bogus et SolverAC2 [3, 2] afin de résoudre le problème.

C. Limites dans les temps d'exécution

Afin de mieux comprendre les limites de convergence et de temps de calcul associés à ce modèle, nous avons choisi de coder un simulateur en utilisant une méthode des éléments discrets (DEM) et de construire puis résoudre le problème présenté dans cette partie. Comme on peut le voir sur la Figure 4, il nous a permis de modéliser des cas d'effondrement d'un ensemble de sphères. Nous pouvons résoudre des problèmes de l'ordre du millier de contact en quelques secondes. Cependant, lorsque l'on parle de milieux granulaires à notre échelle, ces méthodes sont inefficaces à produire des résultats dans des temps raisonnables.

Le but de notre recherche devient alors l'élaboration d'un modèle continu, qui nous permettra de passer à des échelles plus raisonnables.

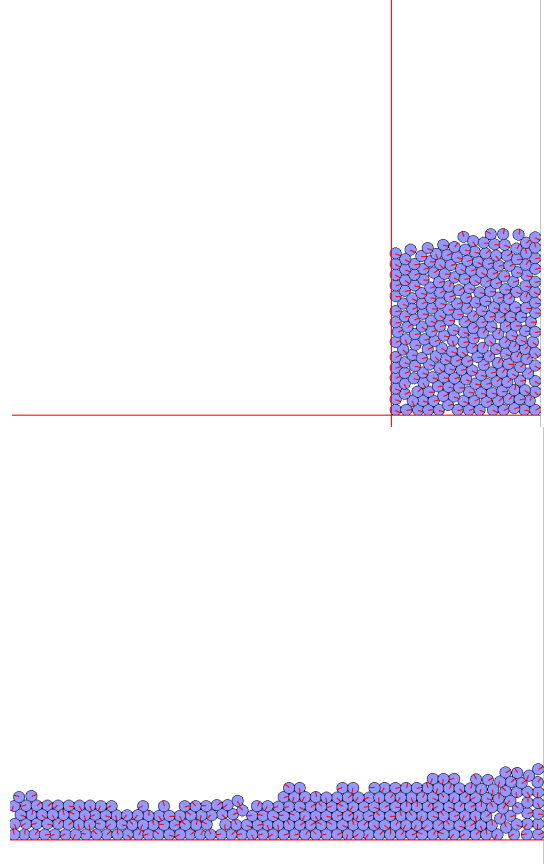


FIGURE 4: Effondrement d'un ensemble de sphères par méthode DEM

IV. PASSAGE AU CONTINU

Nous passons donc dans une vision continue du milieu granulaire.

A. Modèle de forces de Druker-Präger

Tout comme notre modèle discret est soumis à une loi de forttement nous donnant un critère sur la mise en mouvement et la perte d'énergie, un milieu continu est soumis à une loi de rupture ayant les mêmes objectifs. Ici nous considérons le critère de Druker-Prager. Ce critère, que nous allons expliquer, nous donne une inégalité sur les contraintes qui agissent sur un élément infinitésimal du milieu qui détermine si l'élément est stable ou en rupture.

Considérons un élément infinitésimal de notre milieu granulaire continu à l'équilibre, afin de mieux comprendre son comportement, nous le coupons comme représenté par la Figure 5. L'élément subie une contrainte normale σ et une contrainte

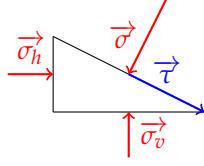


FIGURE 5: Contraintes exercé sur un élément de volume tronqué

tangentielle τ les contraintes σ_v et σ_h permettent d'équilibrer l'élément de volume.

Si nous faisons tourner notre élément de volume, la contrainte σ verra sa norme changer selon l'angle de rotation. Nous notons σ_1 la norme la plus élevée que nous pouvons atteindre et σ_2 la plus faible. On peut établir que la contrainte tangentielle τ_{max} maximale vérifie :

$$\tau_{max} = \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{2}$$

. La loi de Mohr-Coulomb stipule alors que :

$$\tau_{max} \leq \sin(\theta) \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{2}$$

soit

$$\sigma_1 - \sigma_2 \leq \sin(\theta)(\sigma_1 + \sigma_2)$$

où θ est la constante de rupture de notre milieu, analogue au coefficient μ du contact discret. On retrouve d'ailleurs une loi analogue à celle du contact discret en comparant τ_{max} à r_t et $\sigma_1 + \sigma_2$ à r_n .

En deux dimensions, si l'on trace la limite de cette loi de rupture dans l'espace des contraintes, on retrouve un cône analogue au cône de Coulomb de la seconde partie. Cependant lorsque l'on passe en trois dimension, la structure devient un cône à base hexagonale, ce qui est peu pratique d'utilisation. La loi de Druker-Prager est une approximation de la loi de Mohr-Coulomb nous ramenant à un cône à base circulaire en trois dimensions.

Pour ce qui est de la cohésion du milieu, elle est représentée par le paramètre c de la même manière que pour le contact discret : on décale la loi de la constante c :

$$\tau_{max} \leq \sin(\theta) \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{2} + c$$

B. Compression et dilatation

Il reste un dernier phénomène à considérer : contrairement à un milieu fluide classique, un milieu granulaire réagit très différemment sous les

effets de compression et de dilatation : le milieu n'offre aucune opposition à la dilatation, mais il présente très forte opposition à la compression. Pour modéliser ce phénomène, [3] propose d'ajouter une loi sur les forces en jeu. Posons ϕ_{max} la fraction volumique maximale atteignable par notre milieu, et ϕ la fraction volumique actuelle. La loi s'énonce sous la forme :

$$\begin{cases} p - c = 0 & \text{si } \phi_{max} > \phi \\ p - c \geq 0 & \text{si } \phi_{max} = \phi \end{cases} \quad (5)$$

Ce qui signifie que tant que le milieu n'est pas dans un état de concentration maximale, les forces de friction des réactions sont nulles. Cela vient du fait qu'en milieu discret il n'y a pas de forces en jeu s'il n'y a pas de contact.

Cependant, $\phi_{max} > \phi$ impose $p = -c$, donc si le milieu n'est pas le plus dense possible les particules s'attirent et nous n'attendons pas cela d'un milieu granulaire, même cohésif. Gilles Daviet propose donc l'équation adaptée :

$$\begin{cases} p = 0 & \text{si } \phi_{max} > \phi \\ p - c \geq 0 & \text{si } \phi_{max} = \phi \end{cases} \quad (6)$$

C. Modélisation par MPM

Une fois les lois physiques établies, il faut les appliquer à une structure de données adaptée à notre milieu granulaire. Ces dernières années, c'est le modèle de méthode du point matériel (MPM) qui montre les meilleurs résultats. Ce modèle consiste à représenter le milieu sous deux formes duales : une grille d'éléments de volume finis, et un ensemble de particules. Ces deux formes sont reliées par une fonction d'interpolation, qui munit la grille de paramètres physiques issus des paramètres des particules à partir de leurs positions par rapport aux noeuds de la grille. Un pas de temps à l'intérieur de ce modèle consiste à :

- interpoler les paramètres physiques des particules à la grille,
- appliquer les équations d'évolutions à la grille,
- attribuer aux particules les vitesses issues des nouvelles vitesses de la grille,
- intégrer les vitesses et autres variables des particules.

Le logiciel Sand6, développé par [4], est la réalisation pratique de ces formules.

V. LIMITES DE SAND6 DANS L'APPROCHE COHÉSIVE

A. Problème soulevé

Lorsque l'on essaye de simuler un milieu cohésif avec les lois que l'on a présenté plus haut, il survient un artefact inquiétant dû à l'utilisation d'une grille pour la modélisation des forces : les forces à la frontière du sable sont mal gérées.

En effet, supposons avoir la configuration de la Figure 6 (qui représente la répartition des ϕ dans l'angle haut droit du tas simulé en Figure 7) dans laquelle on pose $\phi_{max} = 1$. On observe que le noeud rouge n'est relié à aucun noeud de permettant un frottement. D'après les équations que nous avons présenté, ce noeud n'a donc aucune raison d'être stable et ce quelle que soit la valeur de la constante de cohésion c . C'est ce qui se retrouve dans la simulation effectuée avec le logiciel Sand6 sur la Figure 7.

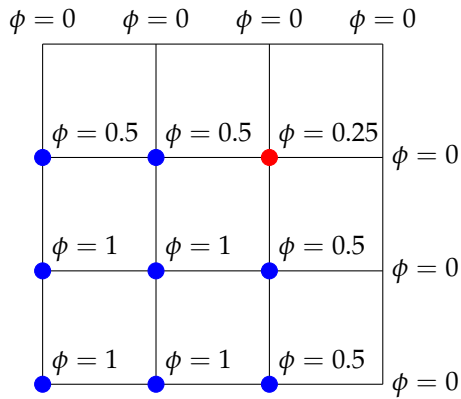
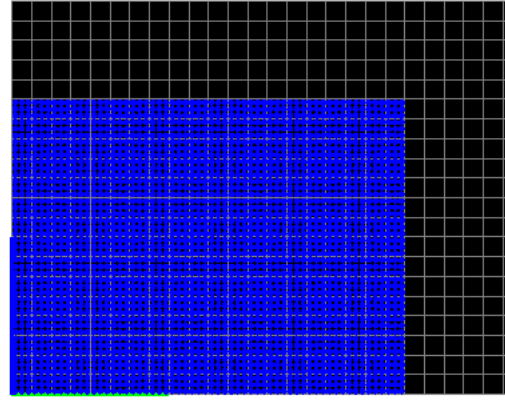


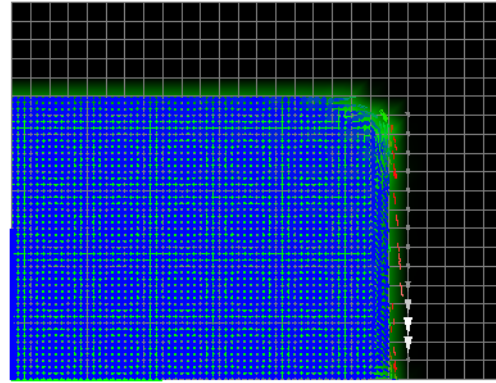
FIGURE 6: Cas de frontière

B. Contribution

Tel qu'on l'a montré, le problème semble venir en particulier de la contrainte rajoutée sur la valeur minimale de ϕ permettant l'activation des forces aux bordure du tas de sable envisagé. Afin de résoudre ce problème, nous pouvons envisager plusieurs alternatives : raffiner ou modifier le grillage aux contours du tas de sable ou alors modifier les contraintes imposées sur les lois d'évolution. Nous avons choisit de nous concentrer sur la seconde option, car une discrétiser l'espace tout en gardant les phénomènes de bordure nous semblait un problème plus complexe, qui doit cependant être approfondi.



(a) Etat initial



(b) Effondrement

FIGURE 7: Effondrement malgré une cohésion élevée

Afin de stabiliser le milieu, nous avons donc compensé les effet de grillage en détectant les frontières, et en y changeant la manière d'opérer de notre force cohésive. Nous remplaçons donc l'équation (6) par :

$$\begin{cases} p = 0 & \text{si } \phi_{max} > \phi \text{ et } div(\phi) < 0 \\ p - c \geq 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (7)$$

$div(\phi)$ est la valeur de la dilatation. Plus précisément, $div(\phi) \geq 0$ correspond à une dilatation quand $div(\phi) \leq 0$ correspond à une compression. Le changement indique donc que, même si le milieu n'est pas dans un état de fraction volumique maximale, une dilatation fera intervenir les forces de frictions et de cohésion. Cela nous permet aussi de conserver les phénomènes de compression, auxquels la loi de cohésion n'est pas censée s'opposer.

C. Résultats

Le modèle que nous proposons nous donne des résultats stables : l’effondrement de notre situation initiale dépend désormais de la cohésion que nous choisissons pour le milieu. Il est donc maintenant envisageable de construire une situation initiale stable. La Figure 8 représente un tas pris dans des conditions initiales identiques à celles de la Figure 7, soumises aux mêmes contraintes et avec les mêmes pas de temps, après autant d’itération que la Figure 7 b. On y remarque de nombreuses flèches blanches qui représentent les valeurs normalisées des vitesses. Nous sommes donc bien dans un système dynamique et stable.

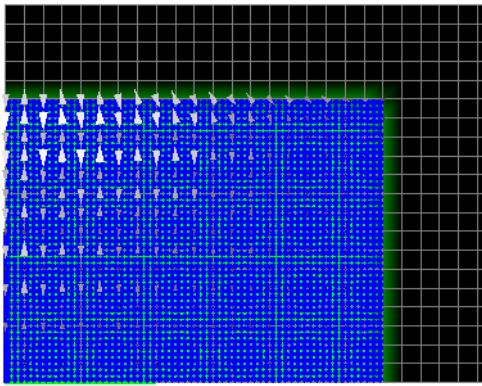


FIGURE 8: Tas stabilisé grâce à la cohésion

D. Validation des résultats

Même si les résultats ont une allure réaliste pour des valeurs de cohésion élevées, il faut pouvoir juger la crédibilité de ce modèle dans des cas plus simples. Par exemple si l’on compare l’ancienne et la nouvelle version de l’algorithme sur des cas de cohésion plus faible, en partant du même état initial qu’à la Figure 7, on obtient les résultats des Figures 9 et 10 qui présentent des différences de comportements macroscopiques significatives. Une comparaison à d’autres modèles est donc vitale, car nous avons dû nous éloigner du cadre strict et rigoureux de notre modèle initial présenté en partie 3.

L’un des objectifs du stage était donc l’élaboration d’un simulateur DEM, que nous avons évoqué plus tôt et qui suit les lois présentées en Partie 3, dont le but est d’être comparé aux deux versions disponibles de Sand6. Cependant, il ne nous a pas

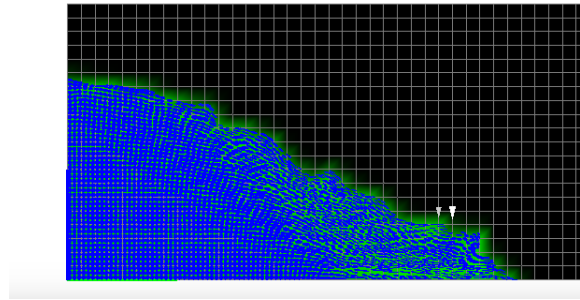


FIGURE 9: État final de l’effondrement sous faible cohésion obtenu par le code original de Sand6

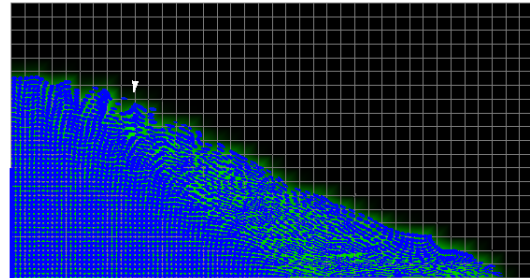


FIGURE 10: État final de l’effondrement sous faible cohésion obtenu par notre adaptation de Sand6

été possible de construire un protocole d’expérimentation solide avant la date de fin du stage.

Enfin, une véritable validation ne peut être obtenue que par comparaison au monde réel, ce qui nécessite un travail à long terme.

VI. CONCLUSION

Nous avons donc réussi à adapter un modèle de milieu granulaire suivant les lois de rupture de Druker-Prager non régulières afin qu’il soit stable pour la cohésion. Cela nous permet de modéliser des structures complexes. Nous avons également pu nous lancer dans l’élaboration d’un logiciel de simulation DEM afin de valider nos résultats. Cependant il reste encore beaucoup à faire pour avoir une validation théorique. Tout d’abord il serait utile de comparer les résultats obtenus à ceux d’autres logiciels développés en parallèle, puis il s’agirait de construire des protocoles expérimentaux permettant aussi la confrontation à la réalité.

RÉFÉRENCES

- [1] M. ANITESCU et F.A. POTRA. “Formulating dynamic multi-rigid-body contact problems with friction as solvable linear complementarity problems”. In : *Nonlinear Dyn.* (1997).
- [2] Florent CADOUX. “Optimisation et analyse convexe pour la dynamique non-régulière”. Thèse de doct. Université Joseph-Fourier, 2009.
- [3] Gilles DAVIET. “Modèles et algorithmes pour la simulation du contact frottant dans les matériaux complexes : application aux milieux fibreux et granulaires”. Thèse de doct. Université Grenoble Alpes, 2016.
- [4] Gilles DAVIET et Florence BERTAILS-DESCOUBES. “A Semi-Implicit Material Point Method for the Continuum Simulation of Granular Materials”. In : SIGGRAPH 16. ACM Transactions on Graphics, Association for Computing Machinery, 2016, p. 1–13.
- [5] P.-Y. LAGRÉE, L. STARON et S. POPINET. “The granular column collapse as a continuum : validity of a twodimensional navier–stokes model with a $\mu(i)$ -rheology.” In : *Journal of Fluid Mechanics* 686, 378–408. (2011).
- [6] P. LÖTSTEDT. “Numerical simulation of time-dependent contact and friction problems in rigid body mechanics”. In : *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* (1984), 5 :370.