

Modélisation parallèle des milieux granulaires à particules déformables

S. Nezamabadi¹, F. Radjai¹, X. Frank²,
J.-Y. Delenne², J. Averseng¹

¹ LMGC, CNRS, Université de Montpellier, {saeid.nezamabadi, frank.radjai, julien.averseng}@umontpellier.fr

² IATE, CIRAD, INRA, Montpellier SupAgro, Université de Montpellier, {xavier.frank, jean-yves.delenne}@inra.fr

Résumé — Afin de modéliser les matériaux à particules molles, une approche numérique est proposée, basée sur la méthode des points matériels associée à la méthode de dynamique des contacts pour traiter les interactions de contact. La parallélisation de cette approche permet de réduire le temps de calcul. Nous analysons les effets des comportements de particules (compressibilité...) dans la relation contrainte-déformation ainsi que le changement de volume pour la compaction des assemblages de particules molles Néo-Hookéennes.

Mots clés — Milieux granulaires ; Matériaux à particules molles ; Méthode des points matériels ; Méthode de dynamique des contacts ; MPI.

1 Instructions générales

Le comportement macroscopique des matériaux particuliers est contrôlé par les mécanismes microscopiques en termes d'interactions entre les particules individuelles ainsi que d'interactions avec un fluide environnant ou des parois de confinement. La compréhension de ces mécanismes peut être efficacement réalisée via des techniques de simulation à l'échelle de particules basées sur des informations micro-dynamiques. La méthode des éléments discrets (DEM) [1, 2] et la méthode de dynamique des contacts (CD) [3, 4] sont reconnues comme des outils de recherche efficaces pour l'investigation de la micromécanique de matériaux particuliers. Ces méthodes sont capables de gérer différentes conditions de chargement, distributions de tailles de particules et propriétés physiques des particules. De telles simulations discrètes peuvent fournir des informations locales détaillées telles que les trajectoires de particules individuelles et les forces transitoires agissant sur celles-ci, qui peuvent être difficiles à obtenir par des expérimentations physiques.

Les méthodes DEM sont basées sur l'approximation des petites déformations de contact entre particules et donc, utilisées pour les particules rigides. Cependant, cette hypothèse est trop rudimentaire pour modéliser les particules très molles telles que les poudres métalliques, de nombreux produits pharmaceutiques et alimentaires et les suspensions colloïdales [5, 6]. Les particules molles peuvent subir de grandes déformations sans se rompre. Contrairement aux matériaux à particules faiblement déformables, le comportement mécanique d'un assemblage de particules molles est régi à la fois par les réarrangements des particules et leur changement de forme, et en partie par leur compressibilité. Les changements de forme modifient profondément le comportement collectif des particules. Par conséquent, ces matériaux peuvent atteindre les compacités élevées au-delà de l'état d'un assemblage aléatoire compact (Random Close Packing : RCP) et les particules peuvent se réarranger tout en changeant de forme.

Pour modéliser les particules molles, il est nécessaire de prendre en compte les degrés de liberté internes de chaque particule ainsi que les interactions de contact entre différentes particules. La première idée peut être d'envisager une approche couplant une méthode de simulation continue pour les grandes déformations des particules au traitement de leurs contacts. Dans ce contexte, nous avons développé une procédure numérique en combinant la méthode des points matériels (MPM) et la méthode CD [7, 8]. Dans cet article, nous proposons une procédure MPM implicite parallèle pour la simulation de particules déformables dans le contexte de l'hypothèse des déformations finies [9]. Elle est une extension de notre méthode précédente basée sur l'hypothèse des déformations infinitésimales. Cette nouvelle formulation permet d'appliquer une large classe de comportements matériels tels que l'hyperélasticité [10]. De plus,

un algorithme parallèle basé sur MPI (Message Passing Interface) est proposé dans le contexte du MPM. Cela permet d'améliorer considérablement les performances de calcul de notre framework MPM. Nous appliquons cette méthode pour étudier la compaction d'un assemblage de particules molles.

2 Approche numérique

Nous avons vu que notre approche numérique est basée sur une combinaison de la MPM et la CD (MPM-CD). Dans la MPM, chaque particule est discrétisée en un ensemble de points matériels. A chaque pas de temps, l'information portée par ces points est projetée sur un maillage sous-jacent, dans lequel sont résolues les équations du mouvement. Cette solution est ensuite utilisée pour mettre à jour les informations associées aux points matériels. Un schéma implicite est mis en oeuvre qui permet une stabilité numérique ainsi qu'un couplage efficace avec la résolution des contacts et du frottement par la méthode CD. Un point important consiste à déterminer les variables entrant en jeu dans le calcul des contacts en même temps que celles associées au comportement volumique. Dans cette section, nous décrivons brièvement l'approche MPM-CD dans le contexte de l'hypothèse des déformations finies. Vous pouvez trouver plus de détails sur cette procédure dans [9].

Considérons un domaine Ω_t dans \mathbb{R}^D , D étant la dimension de domaine décrivant un corps continu. La conservation de sa masse et de sa quantité de mouvement peuvent être définies par les équations suivantes :

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad \text{dans } \Omega_t, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) \quad \text{dans } \Omega_t, \quad (2)$$

où $\rho(\mathbf{x}, t)$ est la densité du matériau, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ est la vitesse, $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ est la contrainte de Cauchy, $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ représente la force volumique et $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$ est l'accélération à la position \mathbf{x} (dans la configuration actuelle Ω_t) et au temps t .

Dans le cadre de la MPM, le corps est divisé en N_p points matériels représentant une quantité de matière fixe, permettant de satisfaire la relation de conservation de la masse (1). En outre, de manière similaire à la méthode des éléments finis, ces points servent de points d'intégration sur le volume dans une formulation faible utilisant une fonction de Dirac. Ainsi, en présence de contacts entre les corps, la forme faible de l'équation du mouvement (2) sous la forme discrétisée peut s'écrire :

$$\mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{nodal}}(t) = \mathbf{F}^{\text{int}}(t) + \mathbf{F}^{\text{ext}}(t) + \mathbf{F}^{\text{C}}(t), \quad (3)$$

où $\mathbf{a}_{\text{nodal}}$ est l'accélération nodale, \mathbf{F}^{C} est la force de contact, \mathbf{F}^{ext} représente la force extérieure appliquée, et :

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \mathbf{N}_p \quad \text{matrice de masse nodale}, \quad (4)$$

$$\mathbf{F}^{\text{int}} = - \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{G}_p \sigma_p V_p \quad \text{vecteur de la force intérieure}. \quad (5)$$

Dans les équations (4) et (5), \mathbf{N}_p et \mathbf{G}_p représentent respectivement la matrice et le gradient de la fonction de forme. m_p et V_p sont la masse et le volume associés au point matériel.

Pour étudier un assemblage de particules déformables, les forces de contact \mathbf{F}^{C} entre les particules nécessitent d'être calculées à l'aide d'un algorithme de contact prenant en compte la condition de non-interpénétration de la matière ainsi que la loi de frottement de Coulomb. Dans le cas des particules rigides, la méthode de dynamique des contacts est une approche implicite pour le traitement des contacts frottants sans régularisation. Comme nous utilisons un schéma implicite pour l'implémentation de la MPM, la méthode CD est un choix naturel pour le traitement des points de contact. Cependant, contrairement à des particules parfaitement rigides, la méthode de résolution doit être adaptée aux particules discrétisées en points matériels. De ce fait, dans la MPM, un algorithme de contact multi-maillage est développé pour implémenter des lois de contact tels que la loi de frottement de Coulomb. Dans ce modèle, les variables de contact sont calculées en même temps que celles associées au comportement volumique ; pour plus de détails, voir [9]

La relation de comportement des particules dans le cadre de l'hypothèse des déformations finies peut être considérée comme suit :

$${}^t_0\Pi({}^0\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}({}^t_0\mathbf{F}({}^0\mathbf{x}, t)) , \quad (6)$$

où ${}^t_0\Pi({}^0\mathbf{x}, t)$ et ${}^t_0\mathbf{F}({}^0\mathbf{x}, t)$ sont, respectivement, la première contrainte de Piola-Kirchhoff et le gradient de déformation à la position ${}^0\mathbf{x}$ (dans la configuration initiale) et au temps t . Notons que ${}^t_0\Pi$ et ${}^t_0\mathbf{F}$ sont définis dans la configuration actuelle 't' par rapport à la configuration initiale au temps $t = 0$. ${}^t\sigma$ est également liée à ${}^t_0\Pi$ via

$${}^t\sigma({}^t\mathbf{x}, t) = \frac{1}{J} {}^t_0\Pi({}^0\mathbf{x}, t) ({}^t_0\mathbf{F}({}^0\mathbf{x}, t))^T , \quad (7)$$

avec $J = \det({}^t_0\mathbf{F}({}^0\mathbf{x}, t))$. Notons que, selon la forme de la loi de comportement (6), diverses lois de comportement, élastique ou inélastique, peuvent être prises en compte dans le cadre de cette approche numérique.

3 Procédure de parallélisation

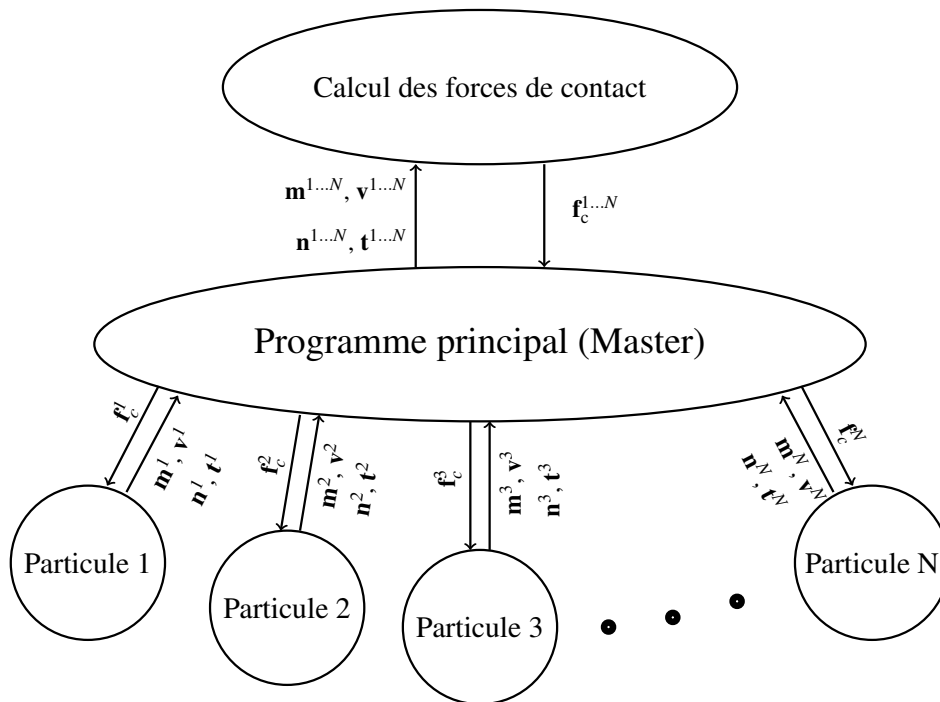


FIGURE 1 – Schéma de la procédure de parallélisation de l'approche MPM-CD ; N est le nombre de particules, et \mathbf{f}_c , \mathbf{m} , \mathbf{n} et \mathbf{t} représentent, respectivement, les vecteurs de force de contact, de masse, normal et tangentiel, pour le noeud de contact potentiel de chaque particule.

L'algorithme parallèle MPM proposé est du style SPMD (Single Program, Multiple Data), basé sur MPI. Les particules dans le domaine de simulation sont réparties entre des sous-domaines. En choisissant un nombre de sous-domaines égal au nombre de processeurs disponibles, les données associées aux particules dans le même sous-domaine sont stockées dans la mémoire d'un seul processeur. L'effort de calcul dépend de la résolution de l'équation (3) pour chaque particule, ce qui est étroitement liée au volume de la particule. En supposant que les processeurs aient des performances égales pour atteindre l'équilibre de charge (nécessaire pour minimiser les retards de synchronisation), les sous-domaines doivent être choisis de telle sorte que la somme des volumes de particules soit presque la même dans tous les sous-domaines. Par conséquent, les particules dans un sous-domaine ne sont pas nécessairement voisines.

Dans l'algorithme MPM proposé, la résolution de l'équation (3) impose de calculer les forces de contact \mathbf{F}_c pour chaque particule, ce qui dépend des interactions entre les particules. Les forces de contact étant calculées sur le processus principal (Master), les seuls échanges de données entre les particules (et donc les processeurs) sont les forces de contact \mathbf{F}_c ; voir la figure 1.

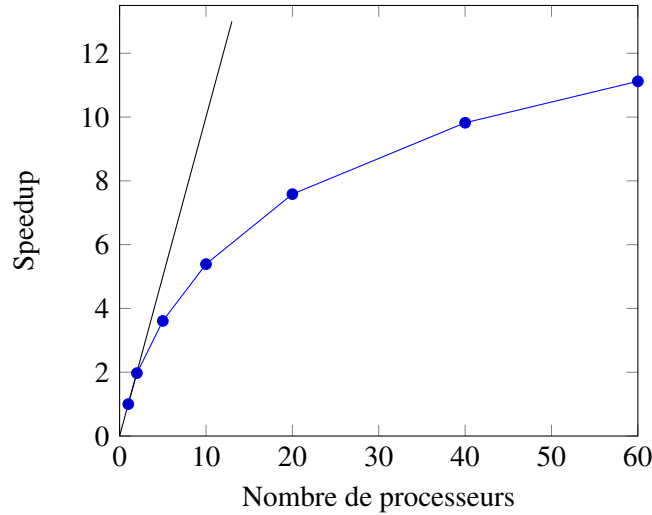


FIGURE 2 – Le speedup mesuré pour la simulation MPM-CD de 300 particules. La ligne représente le scaling parfait.

La scalabilité du code a été étudiée à l’aide du cluster de la plate-forme Genotoul (Toulouse). Dans notre étude, le nombre de processeurs P varie de 1 à 60 et, selon ce nombre, au maximum 20 processeurs ont été utilisés par noeud de calcul. Comme le montre la figure 2, le speedup n’est pas linéaire et l’efficacité décroît assez rapidement lorsque P augmente. Ce comportement s’explique par les communications collectives impliquées dans l’échange de données entre la MPM et la CD entraînant l’envoi ou la réception d’une grande quantité de données par le processeur principal. Un tel point devrait être abordé lors des améliorations futures de notre code.

4 Compression uniaxiale d’un assemblage de particules molles

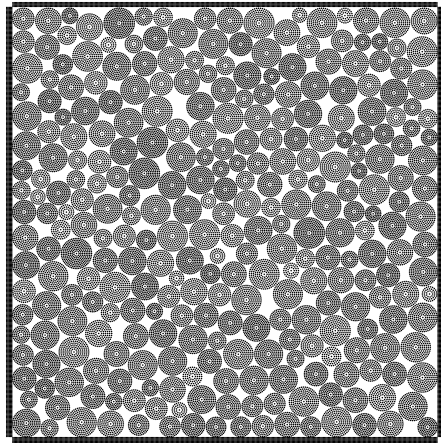
A titre d’exemple, considérons un assemblage de 300 particules de faible poly-dispersité confinées dans une boîte rectangulaire dans laquelle seule la paroi supérieure est mobile. Nous utilisons la nouvelle procédure MPM-CD pour analyser la compaction de cet assemblage. La configuration initiale est préparée en utilisant la DEM. A partir de cette configuration initiale, on modélise la procédure de compaction en déplaçant la paroi supérieure vers le bas à une vitesse constante de 2 m/s et un pas de temps de $\Delta t = 0,1 \mu s$. On suppose qu’il n’y a aucun frottement entre les particules et entre les particules et les parois. L’effet de la gravité est négligé afin d’éviter les gradients de contrainte supplémentaires. On considère un comportement Néo-Hookéen pour les particules :

$$\mathbf{S} = (\lambda \ln(J) - \mu) \mathbf{C}^{-1} + \mu \mathbf{I}, \quad (8)$$

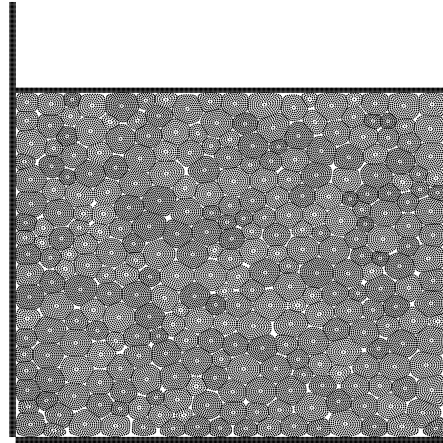
où \mathbf{S} est la seconde contrainte de Piola-Kirchhoff et liée à Π via $\Pi = \mathbf{F} \mathbf{S}$, $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ la déformation de Cauchy-Green droit et $J = \det(\mathbf{F})$. λ et μ représentent les coefficients de Lamé. Dans cette étude, nous avons considéré $\mu = 1,5 \text{ MPa}$, $\rho = 990 \text{ kg/m}^3$ et trois valeurs de $\lambda = 0, 3$ et 100 MPa . Ces différentes valeurs de λ définissent la compressibilité de la particule ; c’est-à-dire, pour $\lambda = 0$, la particule est entièrement compressible alors que pour $\lambda = 100 \text{ MPa}$, la particule est quasi incompressible.

La figure 3 montre les états de l’échantillon au cours de l’essai de compaction pour différentes valeurs de λ . La compacité $\Phi = V_S/V$, où V_S est le volume de particules et V le volume total, augmente avec le changement de forme des particules et, à la fin du compaction, presque tout l’espace est rempli par les particules. La forme des particules passe progressivement de circulaire à presque polygonale, comme le montre sur la figure 3. Notons que les gaps observés entre les particules sont liés à la résolution de maillage, qui peut être augmentée pour une discrétisation plus fine de la zone de contact. De plus, étant donné que les particules moins compressibles peuvent s’allonger plus, les pores entre ces particules sont remplis plus rapidement, même pour une faible déformation globale.

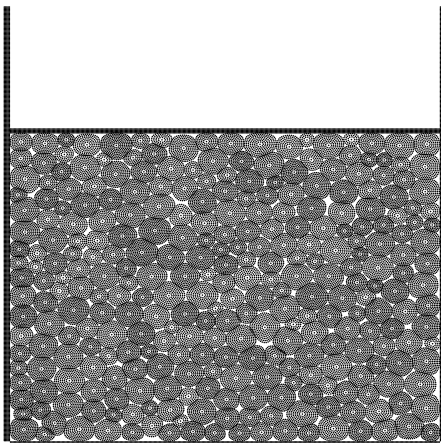
Le caractère mentionné ci-dessus est plus clairement mise en évidence sur la figure 4. Il montre la déformation volumique cumulée des particules définie par $\ln(V_S/V_{S_i})$, où V_{S_i} est le volume initial des



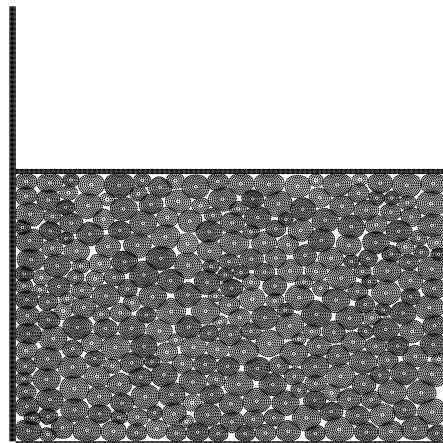
(a) Etat Initial : $\Phi = 0,78$



(b) $\lambda = 100$ MPa et $\varepsilon = 0,25$



(c) $\lambda = 3$ MPa et $\varepsilon = 0,33$



(d) $\lambda = 0$ MPa et $\varepsilon = 0,45$

FIGURE 3 – L'état initial de l'assemblage (a) et trois états de l'assemblage compacté de particules Néo-Hookéennes pour une compacité de 0,97 et plusieurs valeurs de λ (b-d). Notons que, malgré la même valeur de la compacité, le volume des assemblages est différent en raison des compressibilités différentes des particules. Les points noirs représentent les points matériels.

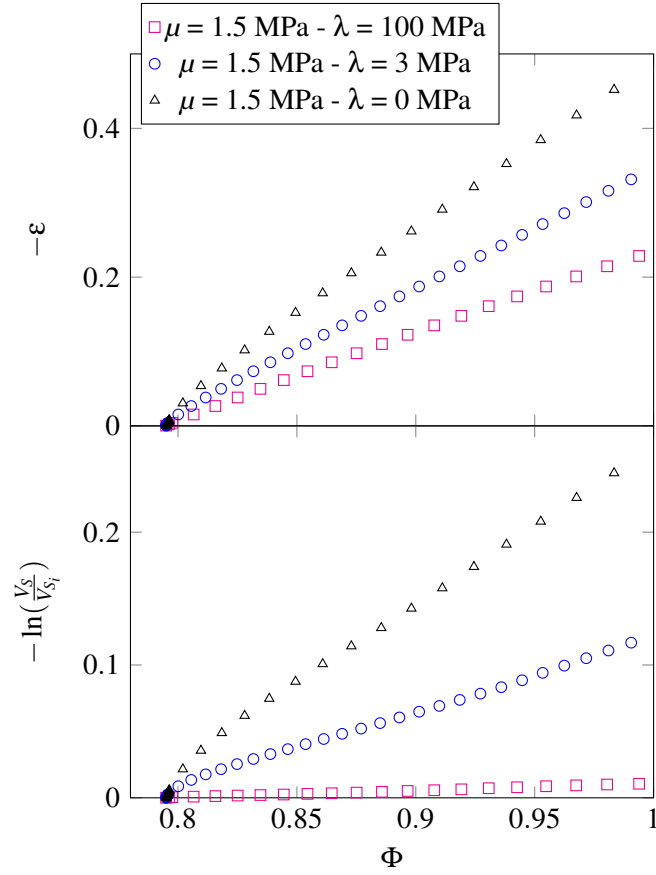


FIGURE 4 – La déformation verticale cumulée, ε , et le changement total du volume de particules, $\ln(V_S/V_{S_i})$, en fonction de la compacité, Φ , pour plusieurs valeurs de λ .

particules, et la déformation verticale cumulée ε en fonction de la compacité Φ . Ce dernier devrait varier en raison du changement de volume élastique des particules résultant de la compressibilité élastique des particules ainsi que de la variation du volume total V due aux réarrangements de particules et au changement de forme. Puisque la largeur de la boîte est constante, nous avons

$$\ln\left(\frac{V_S}{V_{S_i}}\right) = \ln\left(\frac{\Phi}{\Phi_i}\right) + \varepsilon \quad (9)$$

avec $\varepsilon = \ln(h/h_i)$, où h_i est la hauteur initiale de la boîte. Dans la figure 4, les données pour trois valeurs de λ coïncident jusqu'à $\Phi \simeq 0,8$. Au-delà de cette compacité, ε et $\ln(V_S/V_{S_i})$ varient à des taux presque linéaires et différents pour chaque valeur λ . Comme prévu, ce taux augmente lorsque λ (ou la compressibilité) diminue. Notons que pour $\lambda = 100$ MPa (les particules quasi incompressibles), la variation de volume des particules est négligeable, comme le montre sur la figure 4. De plus, on peut considérer que $\Phi \simeq 0,8$ est le point de blocage au-dessus duquel il n'y a plus de réarrangement de particules, et donc l'évolution de l'assemblage est uniquement due au changement de forme des particules.

L'évolution de la contrainte appliquée σ au-delà du point de blocage permet une analyse macroscopique de l'évolution de l'assemblage. La figure 5 montre σ , calculée à partir des forces de contact agissant sur la paroi inférieure et normalisée par le module d'onde de compression des particules M_p ($M_p = \lambda + 2\mu$) en fonction de Φ . Nous constatons un comportement non linéaire pour trois cas avec des taux différents. Nous observons également que la force nécessaire pour comprimer l'assemblage augmente avec la compressibilité des particules. Ces observations peuvent s'expliquer par le fait qu'au-delà du point de blocage, l'assemblage se comporte presque comme un milieu continu, puisqu'il n'y a plus de réarrangements de particules. Cette hypothèse conduit à une relation logarithmique entre σ et Φ (pour plus des détails, voir [9]) :

$$\frac{\sigma}{M_p} = -\frac{Z\Phi}{Z + \frac{M_p}{c_1 K_p}} (\ln(\Phi) + c_2), \quad (10)$$

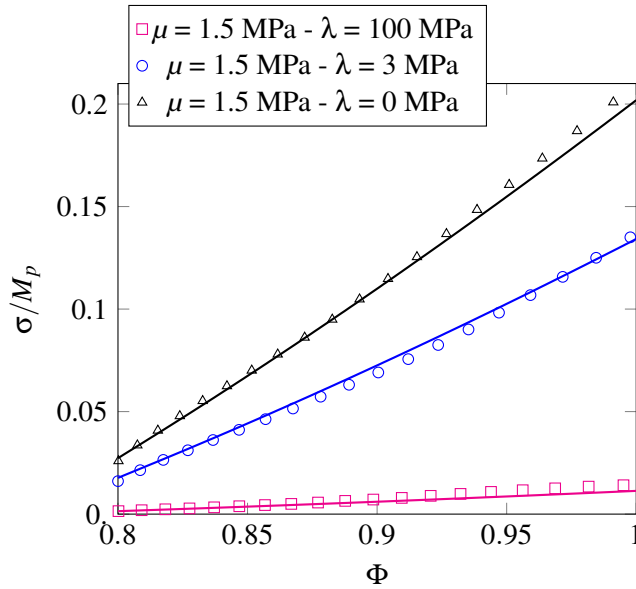


FIGURE 5 – La contrainte appliquée normalisée par le module d’onde de compression M_p en fonction de la compacité pour plusieurs valeurs de λ . Les lignes représentent le comportement prédit par le modèle de compaction introduit dans [9] ; voir l’équation (10).

où K_p est le module d’élasticité isostatique des particules ($K_p = \lambda + \mu$ en 2D), c_1 est un paramètre dépendant du comportement du matériau de la particule et c_2 est un terme constant. Les prédictions de ce modèle (10) sont en bon accord avec nos simulations MPM présentées dans la figure 5 avec $c_2 \simeq 0,27$ et $c_1 \simeq 0,01$ pour $\lambda = 100$ MPa, $c_1 \simeq 0,23$ pour $\lambda = 3$ MPa et $c_1 \simeq 1,3$ pour $\lambda = 0$ MPa. Notons que, bien que ce modèle semble bien prédire la contrainte appliquée σ en fonction de Φ , à des compacités élevées, les particules Néo-Hookéennes peuvent seulement remplir les petits pores restants pour des contraintes beaucoup plus élevées (impliquant des rayons de courbure de plus en plus petits), mais lorsque la compacité tend vers 1, la contrainte appliquée correspondante doit tendre vers l’infini. Par conséquent, ce modèle n’est pas valide pour des valeurs élevées de la compacité. Dans nos simulations, pour résoudre correctement les faibles rayons de courbure au niveau des zones de contact entre les particules, il convient d’affiner dans la même proportion la discrétisation.

5 Conclusions

Dans cet article, nous avons amélioré notre approche pour la modélisation des systèmes à particules molles développées dans [7]. Dans cette nouvelle approche, une formulation de la méthode des points matériels (MPM) est utilisée dans le contexte de l’hypothèse des déformations finies. Le MPM permet de prendre en compte le comportement mécanique réaliste de particules individuelles. Le couplage de la MPM avec la méthode de dynamique des contacts (CD) permet de traiter correctement les contacts frottants entre particules. Pour améliorer les performances de calcul, une procédure de parallélisation a été proposée dans le cadre de cet algorithme. Bien que l’efficacité de cette procédure diminue avec l’augmentation du nombre de processeurs, elle reste utile pour réduire les temps de calcul.

La compaction d’un assemblage de particules molles a été simulé à l’aide de la procédure MPM-CD en prenant en compte plusieurs valeurs de compressibilité des particules (des particules quasi incompressibles aux particules entièrement compressibles). L’assemblage contenant particules plus compressibles peut subir des déformations plus importantes sous l’effet d’une contrainte de compression plus faible en raison de modifications considérables du volume de particules et de l’apparition de chaînes de contrainte plus faibles entre les particules. Il a été démontré que cette contrainte au-delà de l’état RCP varie logarithmiquement avec la compacité.

Remerciement

Nous remercions la plate-forme bioinformatique de Genotoul à Toulouse Midi-Pyrénées (Bioinfo Genotoul) pour avoir fourni des ressources de calcul.

Références

- [1] P. A. Cundall et O. D. L. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*, Géotechnique, 29, 47–65, 1979.
- [2] H. Matuttis, S. Luding et H. Herrmann. *Discrete element simulations of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles*, Powder technology, 109, 278–292, 2000.
- [3] J.J. Moreau. *Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials*, European Journal of Mechanics A - Solids 13, 93, 1994.
- [4] F. Radjai et V. Richefeu. *Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method*, Mechanics of Materials 41, 715, 2009.
- [5] R. Bonnecaze et M. Cloitre. *Micromechanics of soft particle glasses*, Advances in Polymer Science 236, 117–161, 2010.
- [6] M. Barnabe, N. Blanc, T. Chabin, J.-Y. Delenne, A. Duri, X. Frank, V. Hugouvieux, E. Lutton, F. Mabilie, S. Nezamabadi, et al., *Multiscale modeling for bioresources and bioproducts*, Innovative Food Science & Emerging Technologies, 46, 41-53 (2018).
- [7] S. Nezamabadi, F. Radjai, J. Averseng et J.-Y. Delenne. *Implicit frictional-contact model for soft particle systems*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 83, 72, 2015.
- [8] S. Nezamabadi, T.H. Nguyen, J.-Y. Delenne et F. Radjai. *Modeling soft granular materials*, Granular Matter, 19, 8, 2017.
- [9] S. Nezamabadi, X. Frank, J.-Y. Delenne, J. Averseng et F. Radjai. *Parallel implicit contact algorithm for soft particle systems*, Computer Physics Communications, In Press, 2018.
- [10] S. Nezamabadi, H. Zahrouni et J. Yvonnet. *Solving hyperelastic material problems by asymptotic numerical method*, Computational Mechanics 47, 77–92, 2011.