



# Mécanique des matériaux granulaires

**Guilhem MOLLON**

**P2I7 2017-2018**



## Mécanique des matériaux granulaires

## Enjeux économiques

## Enjeux économiques

Dans le monde, l'industrie manipule des quantités de l'ordre de la dizaine de milliards de tonnes par an de matériaux granulaires :

**10 000 000 000 000 Kg**

La production française de granulats est de **7 tonnes** par habitant et par an.

Dans le monde, les poudres et matériaux granulaires représentent **70%** des matières premières et **50%** des produits finis (en masse).

## Enjeux économiques

Le traitement et le transport de ces matières correspond à **10%** des dépenses énergétiques de la planète (le total vaut approximativement  $4.10^{20} \text{J}$ ).

En France, le chiffre d'affaire associé à la vente de matériaux granulaires correspond à environ **1%** du PIB.

Les procédés associés à ces matériaux sont la plupart du temps rudimentaires, à la fois pour l'extraction, le traitement, et le transport. Ils sont généralement fondés sur l'expérience, et peu optimisés.

**-> Il s'agit d'un important levier économique**



## Mécanique des matériaux granulaires

# Applications industrielles

## Dans l'industrie minière

### -Extraction

#### *Stabilité des murs de mines*



#### *Comportement à l'explosif*



#### *Résistance à l'attaque d'outils de coupe*

## Dans l'industrie minière

-Extraction  
-Stockage

*Erosion éolienne,  
dispersion de particules*



*Stabilité des empilements*



## Dans l'industrie minière

-Extraction  
-Stockage  
-Transport



Stabilité sous vibrations

*Débit des convoyeurs à bande*



*Optimisation du remplissage*

## Dans l'industrie minière

- Extraction
- Stockage
- Transport
- Broyage

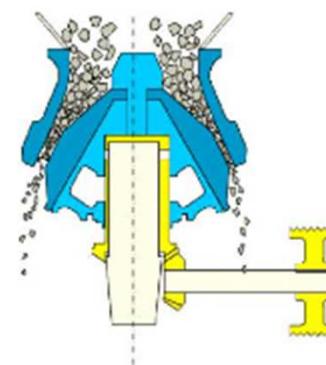
*Débit de concassage*



*Energie de broyage*



*Usure des outils*



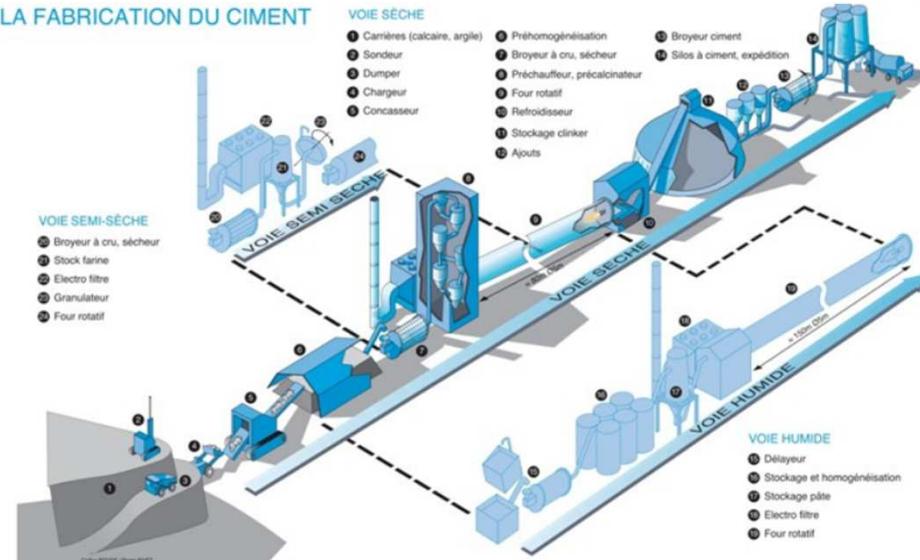
## Dans la construction et le génie civil

### -Ciment/Béton



*Extraction, fabrication  
et conditionnement du  
ciment*

### LA FABRICATION DU CIMENT



*Formulation et mise en œuvre de  
bétons hautes performances*



## Dans la construction et le génie civil

-Ciment/Béton  
-Géotechnique



*Soutènements*



**Applications industrielles**



*Fondations profondes*



## Dans la construction et le génie civil

- Ciment/Béton
- Géotechnique
- Terrassements



*Barrages poids*



*Iles artificielles*



## Dans la construction et le génie civil

- Ciment/Béton
- Géotechnique
- Terrassements
- Transports

*Ballast ferroviaire*



*Remblais autoroutiers*

## Dans l'énergie

### -Extraction de ressources

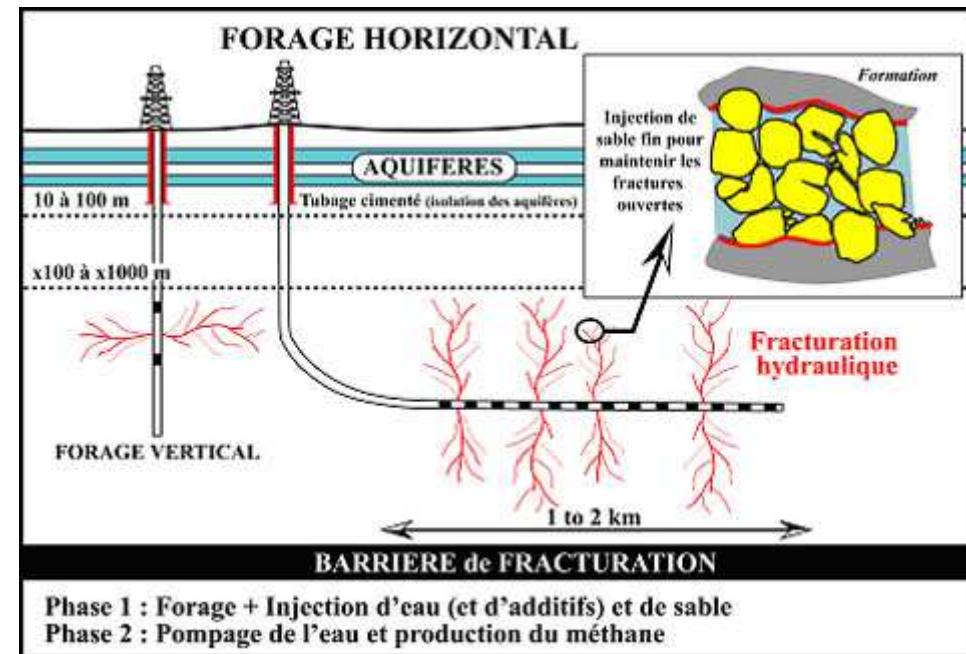
#### Ancrages offshore



#### Forages pétroliers



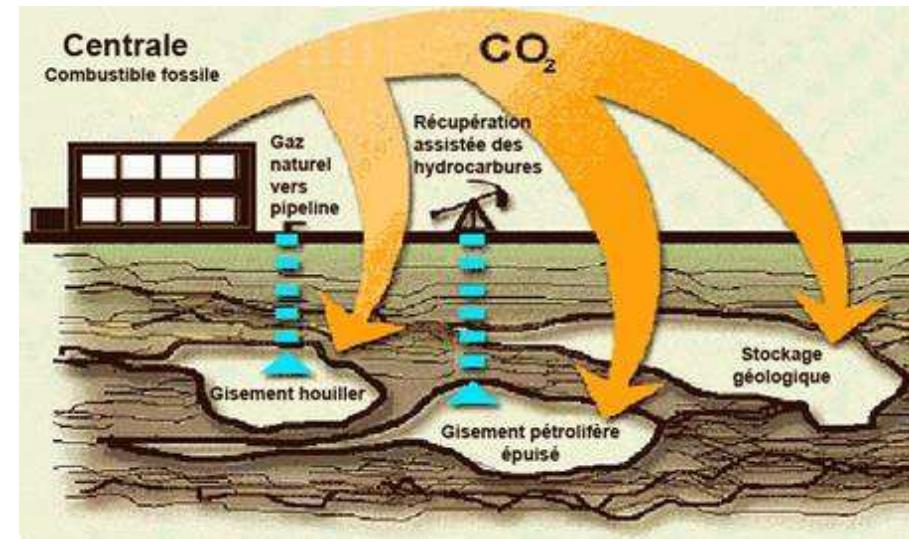
#### Fracturation hydraulique



## Dans l'énergie

- Extraction de ressources
- Aspects environnementaux

### *Energies renouvelables*



*Stockage de Co<sub>2</sub> en couches profondes*



*Filtres à particules*

## Dans les industries de transformation

### -Agroalimentaire

*Granules pour animaux*



*Aliments en poudre*



*Fruits*



*Céréales*



## Dans les industries de transformation

-Agroalimentaire  
-Pharmaceutique

*Broyage, mélange de précision et compaction des poudres*



*Traitement, tri et transport des granules*



## Dans les industries de transformation

-Agroalimentaire  
-Pharmaceutique  
-Chimique



*Filtres par charbons actifs*



*Combustibles solides*



*Réacteurs à lits fluidisés*

*Industrie cosmétique*

## Dans les industries de transformation

- Agroalimentaire
- Pharmaceutique
- Chimique
- Mécanique



Transport pneumatique

*Production des petites pièces*





**Mécanique des matériaux granulaires**

# **Géophysique, environnement et physique**

## Stabilité et Instabilités de pentes



Salvador

Inde



Taiwan



## Stabilité et Instabilités de pentes



Déclenchement



Propagation



Arrêt

## Stabilité et Instabilités de pentes

- Glissements de terrain
- Avalanches rocheuses
- Avalanches de neige



*Plaques*

*Neige granulaire*



*Aérosol*



## Stabilité et Instabilités de pentes

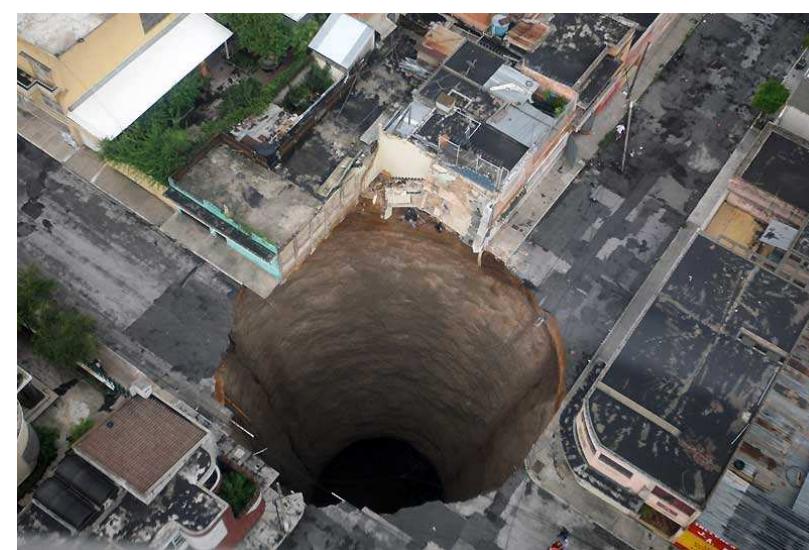
- Glissements de terrain
- Avalanches rocheuses
- Avalanches de neige
- Fontis



*Prévention*



*Réparation*



*Compréhension*

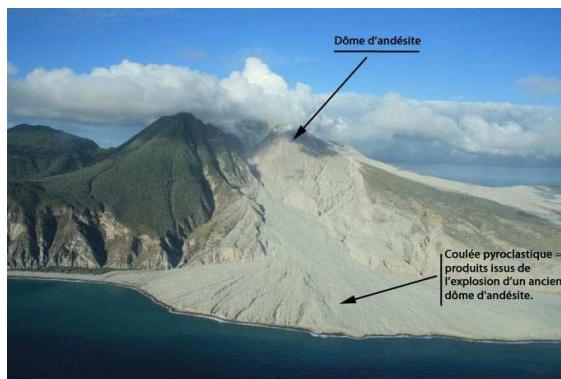


## Volcanologie et sismologie

### -Volcans



*Coulées pyroclastiques*

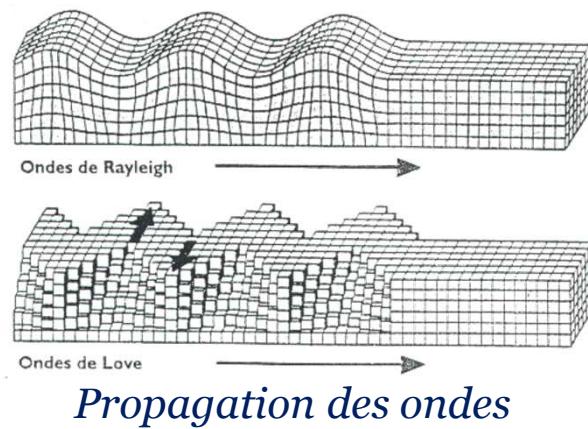


*Dynamique atmosphérique des nuages de cendres*



## Volcanologie et sismologie

-Volcans  
-Séismes



Fracturation



Liquéfaction du sable



## Sédimentologie

### -Hydrologie



*Crues*



*Ensablement*



*Erosion hydrique*



*Dynamique fluviale*

## Sédimentologie

-Hydrologie

-Dynamique du littoral



*Enrochement*



*Evolution des écosystèmes*

*Préservation du patrimoine*



*Erosion côtière*



## Sédimentologie

- Hydrologie
- Dynamique du littoral
- Dunes



Désertification

Transport



Formation

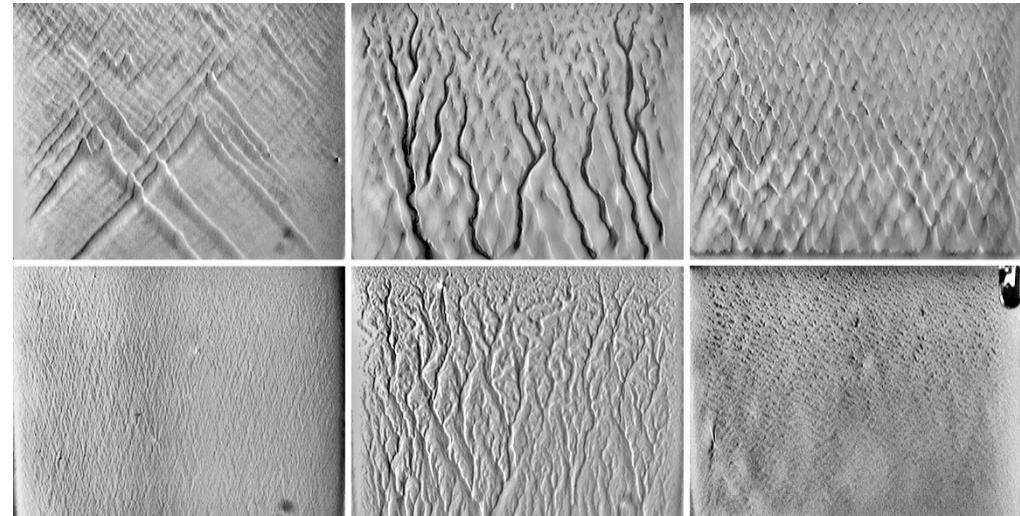


## Chez les physiciens

### -Physique granulaire

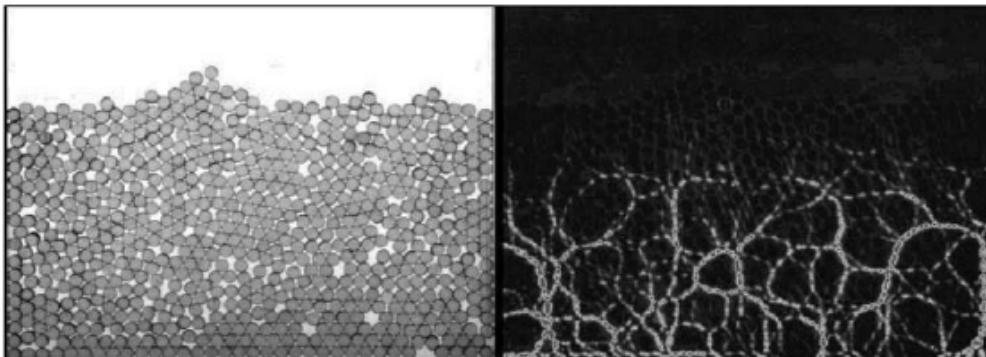


Ségrégation



Formation de motifs

Chaînes de forces



Corrugation





## Chez les physiciens

- Physique granulaire
- Planétologie

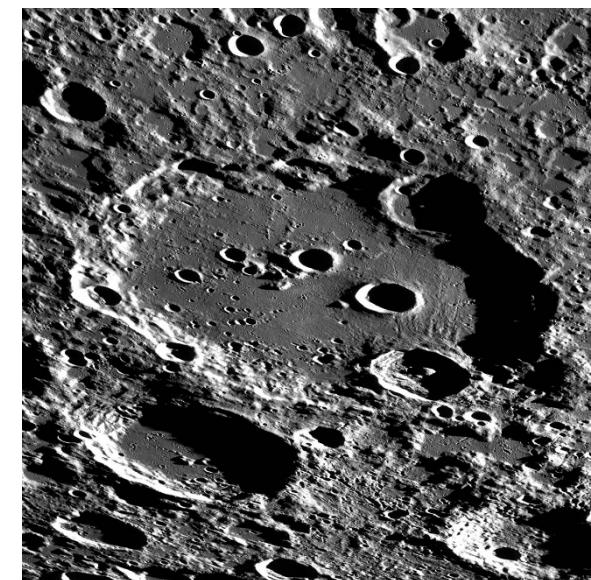


*Locomotion des véhicules d'exploration*



*Anneaux de Saturne*

*Cratères d'impact*





**Mécanique des matériaux granulaires**

## **Spécificités des milieux granulaires**

## Spécificités

-Pas de mise en équation universelle

Solides élastiques : Loi de Hooke

$$\bar{\sigma} = \lambda \cdot \text{tr}(\bar{\varepsilon}) \cdot \bar{I} + 2\mu \cdot \bar{\varepsilon}$$



**Robert Hooke**  
(1695-1703)

Fluides Newtoniens : Loi de Navier-Stokes

$$\rho \vec{\gamma} = -\overrightarrow{\text{grad}}(p) + \rho \vec{g} + \mu \Delta \vec{V} + \frac{\mu}{3} \overrightarrow{\text{grad}}(\text{div } \vec{V})$$



**Henri Navier**  
(1785-1836)

Milieux granulaires : Loi de ????

$$????=????$$

## Spécificités

-Pas de mise en équation universelle

-Grands nombres de particules

Environ  $10^5$  grains de sucre



Environ  $10^{20}$  grains de sable



*Dune du Pyla*

## Spécificités

- Pas de mise en équation universelle
- Grands nombres de particules
- Interactions complexes aux contacts

Les phénomènes non-triviaux de la dynamique des contacts et de la tribologie se retrouvent, à petite échelle, au niveau de chacun des innombrables contacts d'une masse granulaire.

## Spécificités

- Pas de mise en équation universelle**
- Grands nombres de particules**
- Interactions complexes aux contacts**
- Milieux fortement dissipatifs**

Du fait du grand nombre de contacts, les milieux granulaires dissipent énormément l'énergie aux petites échelles. Toutes les approches macroscopiques reposant sur des théories conservatives sont vouées à l'échec.

## Spécificités

- Pas de mise en équation universelle
- Grands nombres de particules
- Interactions complexes aux contacts
- Milieux fortement dissipatifs
- Surface spécifique élevée

La surface spécifique est la surface totale de solide accessible au milieu extérieur, rapporté à la masse de solide. Elle dépend énormément de la finesse des grains, par exemple pour des sphères de rayon  $R$  et de masse volumique  $\rho$  on a :

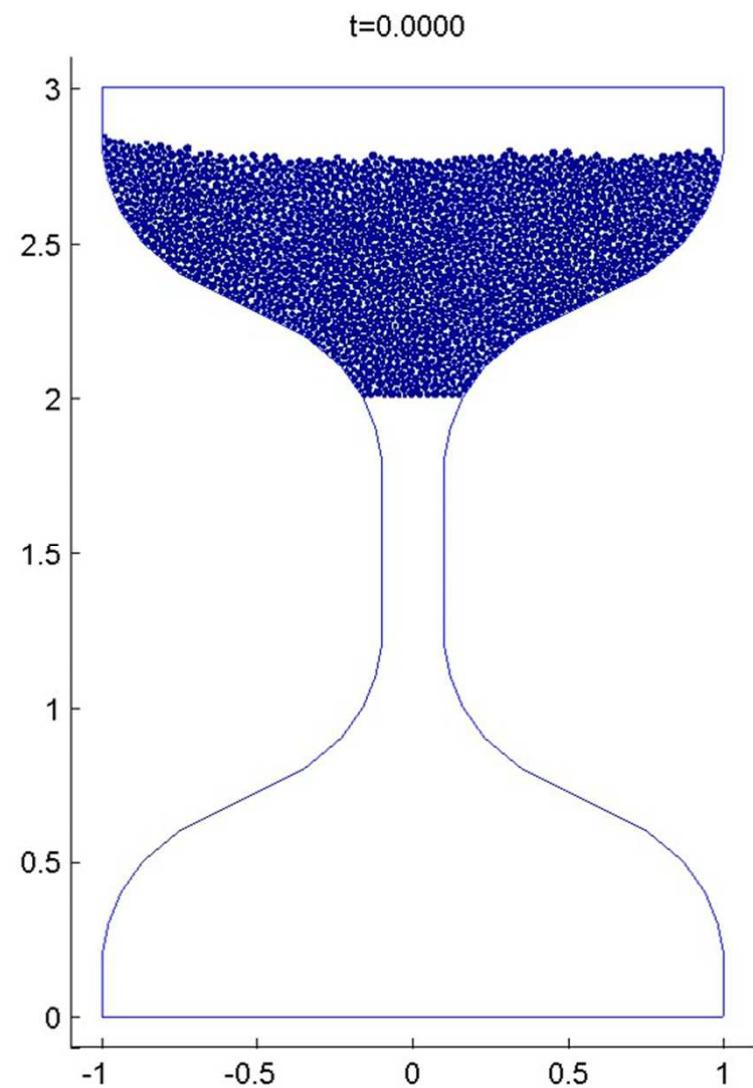
$$S_{spé} = 3/(\rho R)$$

Quelques exemples :	Grains de blé :	0.1 m <sup>2</sup> /kg
	Farine de blé :	100 m <sup>2</sup> /kg
	Ciment :	500 m <sup>2</sup> /kg
	Fumées de silice :	20000 m <sup>2</sup> /kg

## Plusieurs « états »

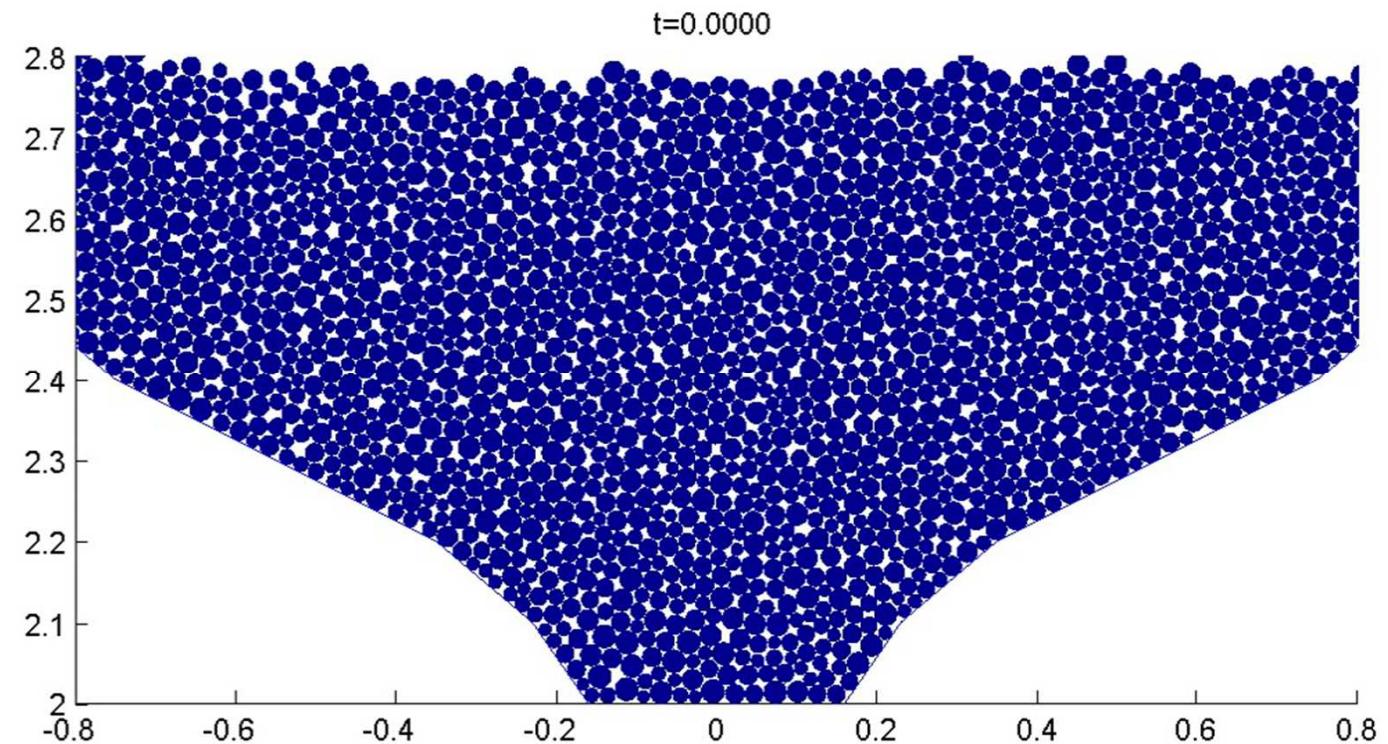
### -Une expérience simple

Ecoulement 2D dans un sablier,  
modélisé par une méthode aux éléments  
discrets.



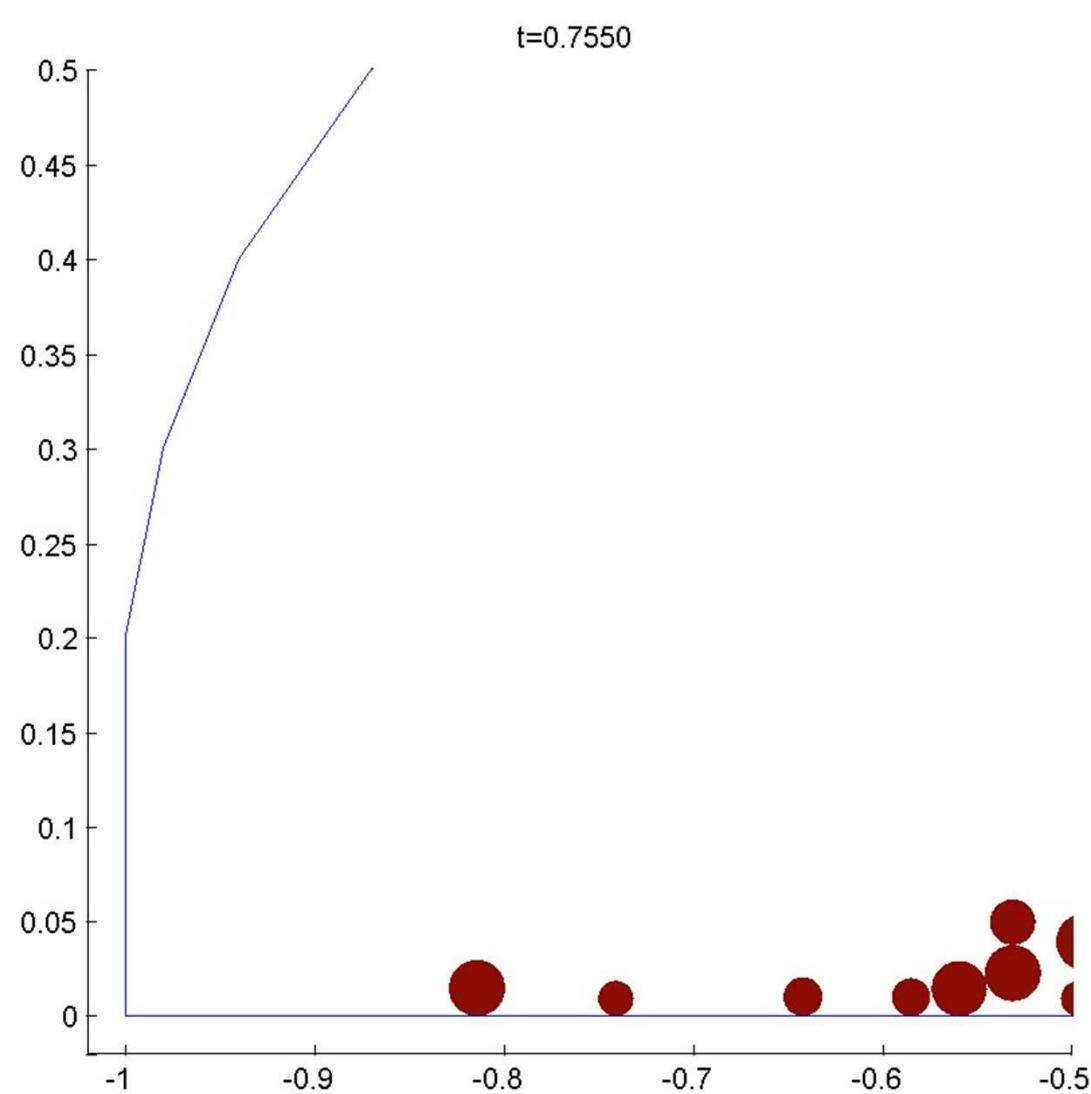
## Plusieurs « états »

- Une expérience simple
- Comportement liquide



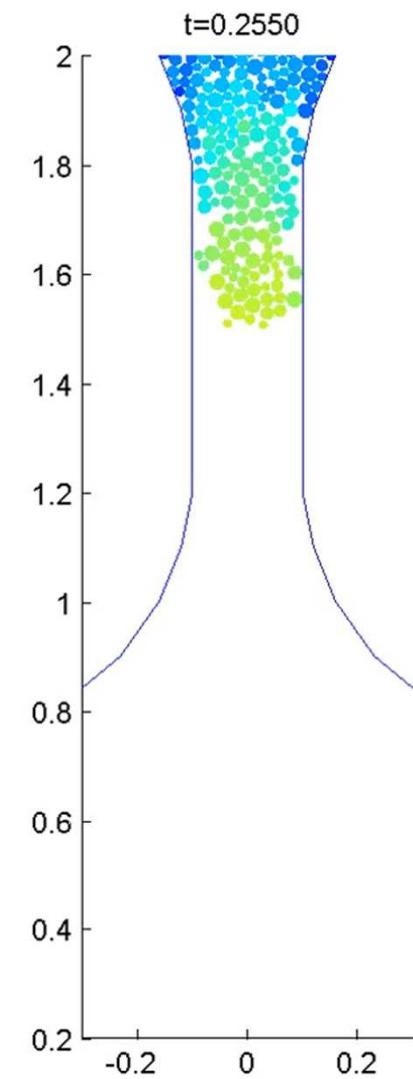
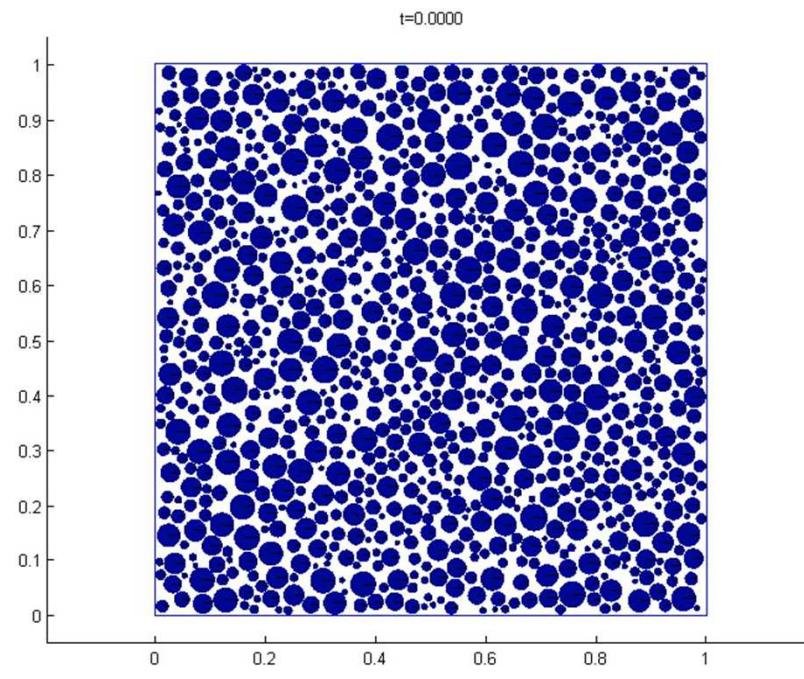
## Plusieurs « états »

- Une expérience simple
- Comportement liquide
- Comportement solide



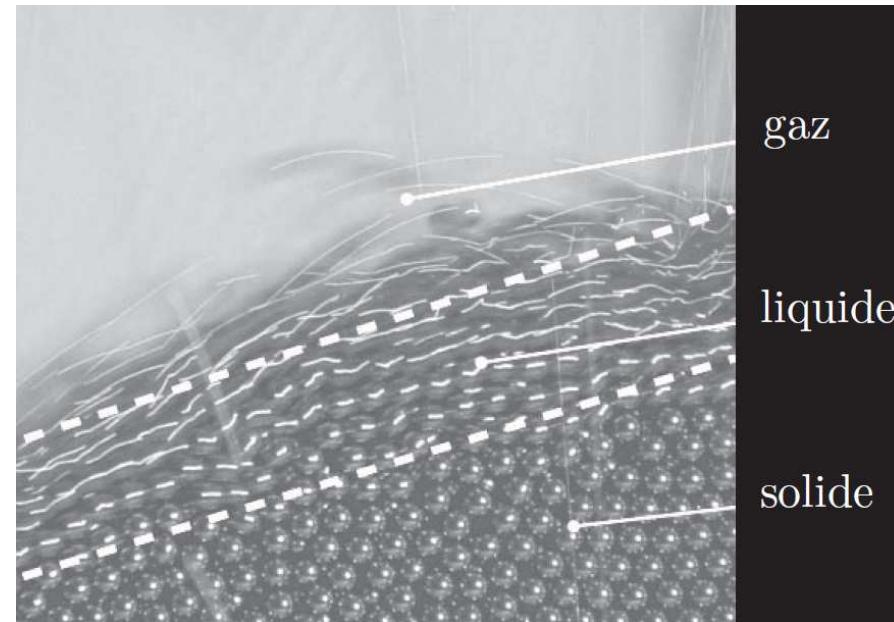
## Plusieurs « états »

- Une expérience simple
- Comportement liquide
- Comportement solide
- Comportement gazeux



## Plusieurs « états »

- Une expérience simple
- Comportement liquide
- Comportement solide
- Comportement gazeux
- Difficultés



Plusieurs phases coexistent souvent au sein d'un même système granulaire. Il est difficile de prévoir exactement quels sont les critères qui font passer d'un comportement à l'autre.

Plus que la compréhension de chaque comportement, c'est la problématique du changement de phase qui est particulièrement complexe.



## Mécanique des matériaux granulaires

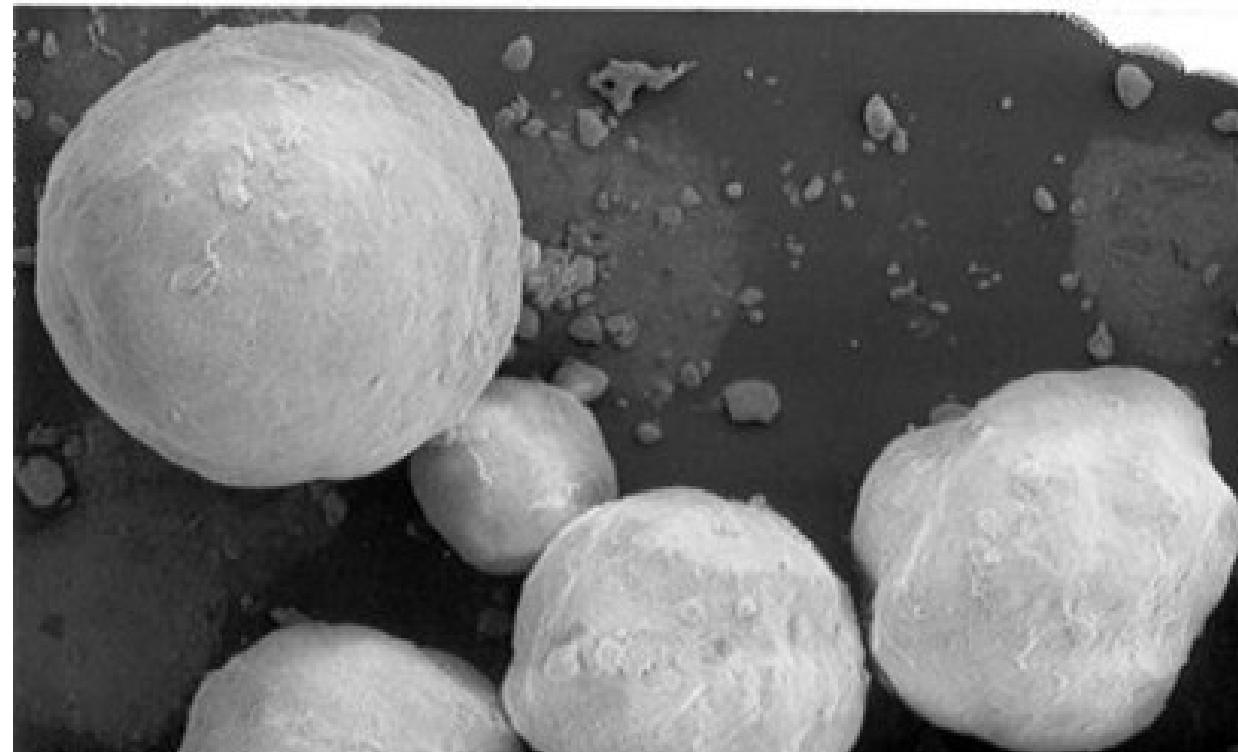
# Ordres de grandeur

## L'exemple du béton

### -Fumées de silice

Diamètre typique : 200 nm

Exemples équivalents :  
-Nanoparticules  
-Colloïdes



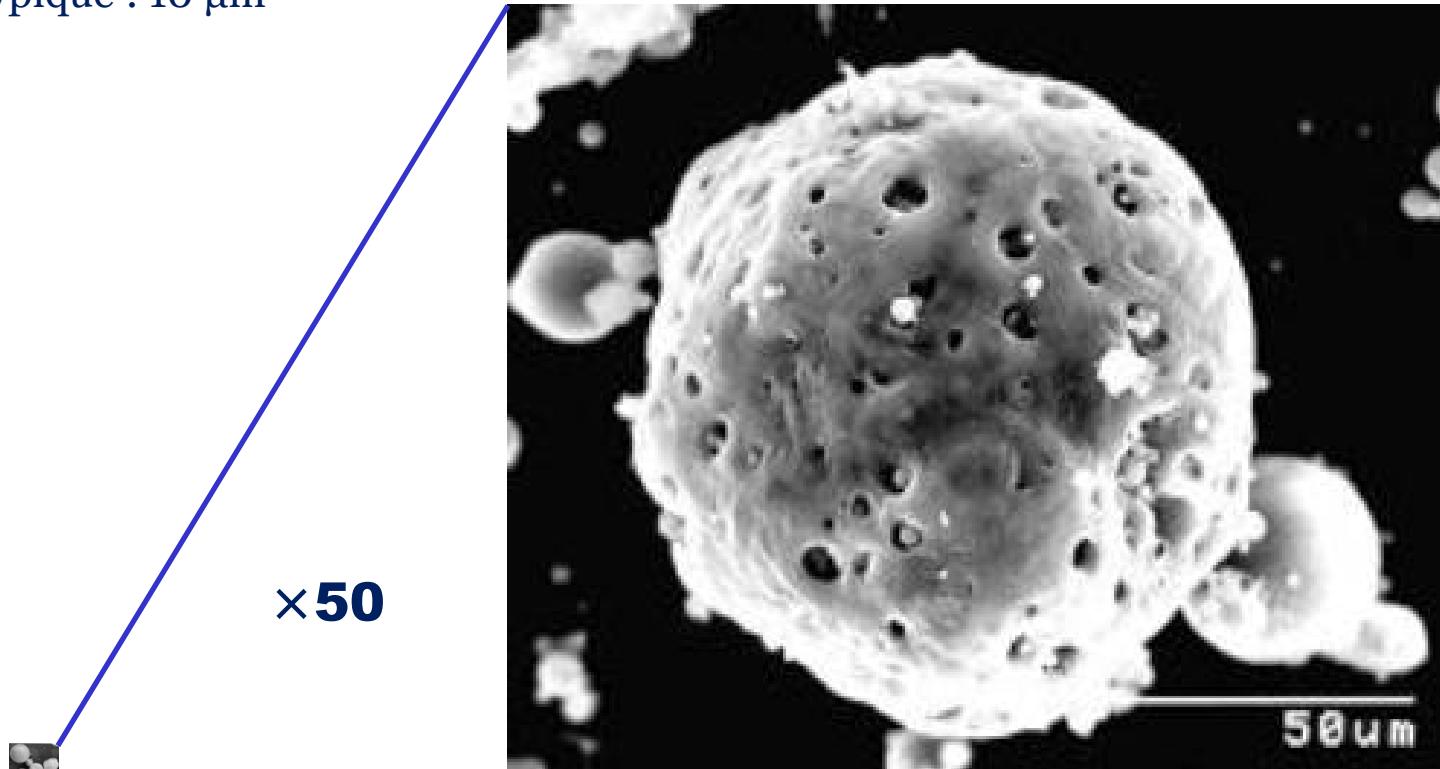
## L'exemple du béton

- Fumées de silice
- Cendres volantes

Diamètre typique : 10 µm

Exemples équivalents :

- Argiles
- Particules atmosphériques
- Poudres cosmétiques
- Cendres volcaniques



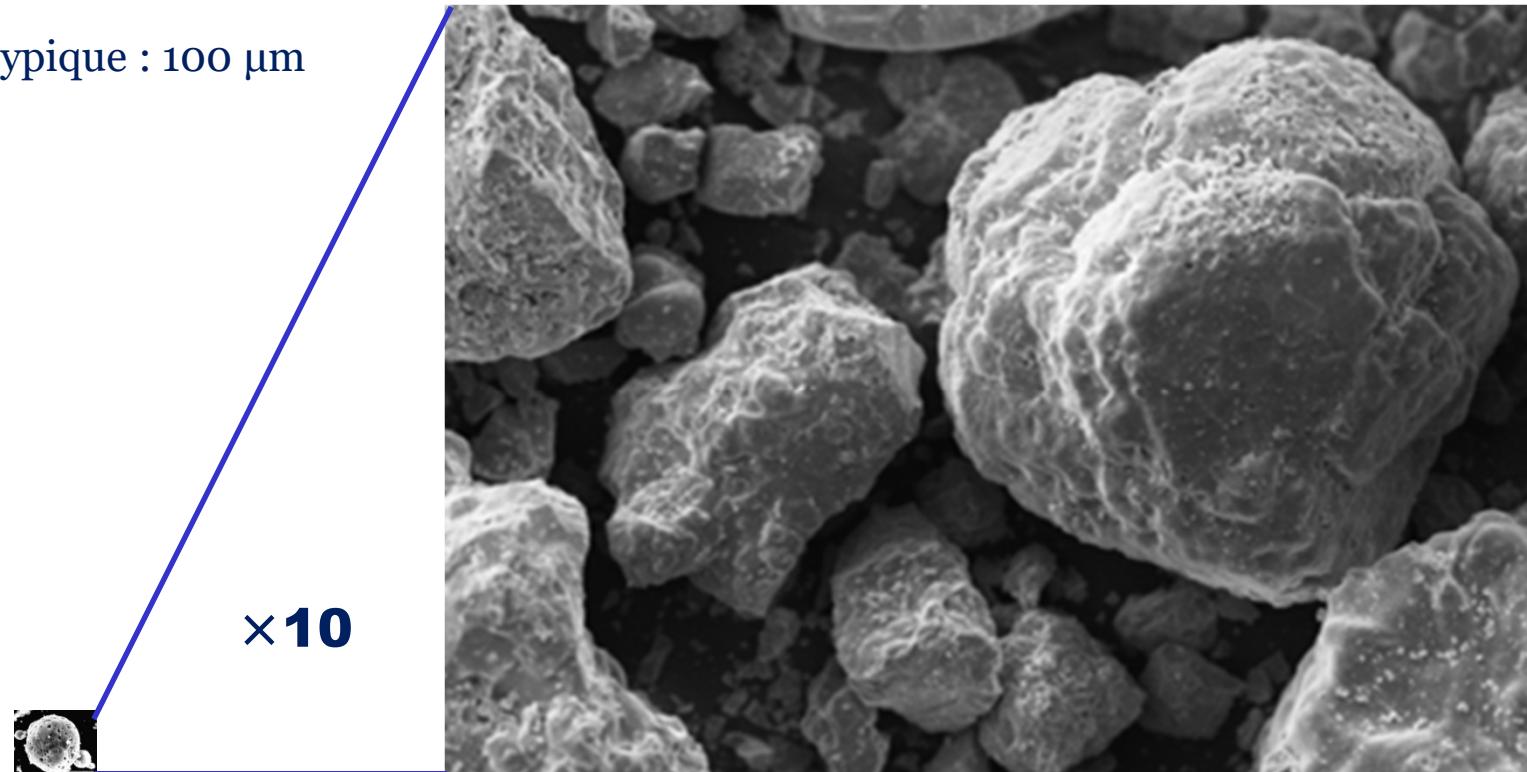
## L'exemple du béton

- Fumées de silice
- Cendres volantes
- Ciment

Diamètre typique : 100 µm

Exemples équivalents :

- Poudres pharmaceutiques
- Combustibles solides
- Lait en poudre



## L'exemple du béton

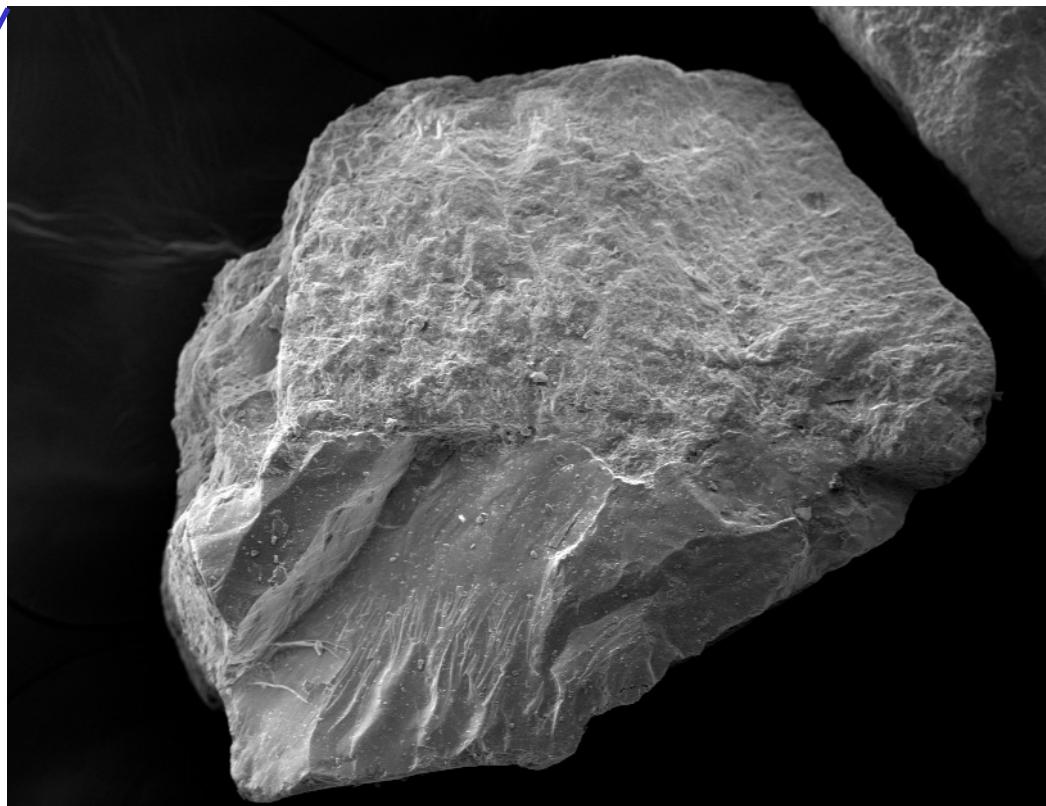
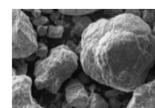
- Fumées de silice
- Cendres volantes
- Ciment
- Sable

Diamètre typique : 1 mm

Exemples équivalents :

- Céréales
- Sucre en poudre
- Cristaux de glace

×10



## L'exemple du béton

- Fumées de silice
- Cendres volantes
- Ciment
- Sable
- Granulats**

Diamètre typique : >10 mm

Exemples équivalents :

- Fruits
- Gélules
- Blocs d'avalanches rocheuses



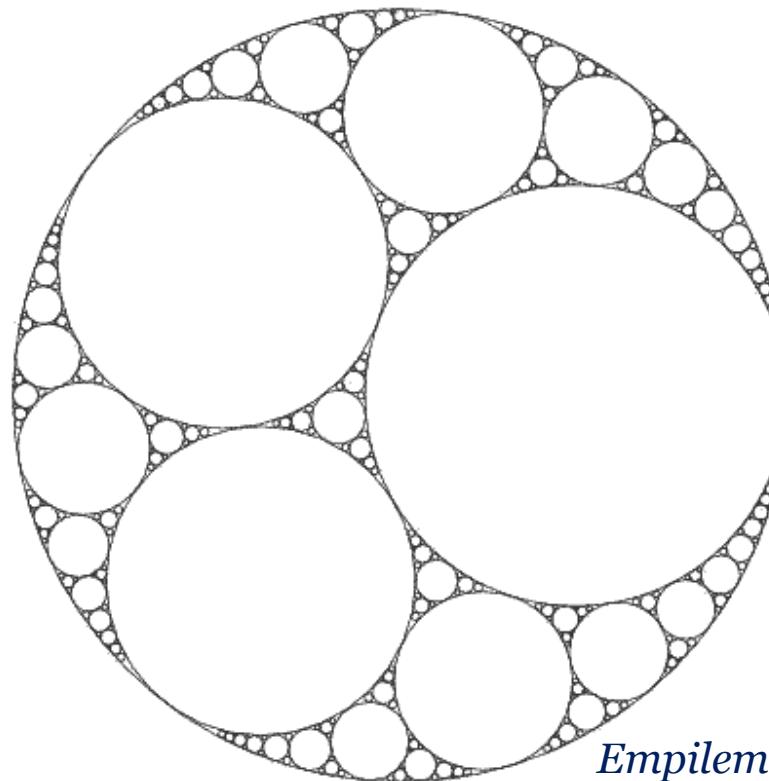
## L'exemple du béton

### -Empilement d'Apollonius

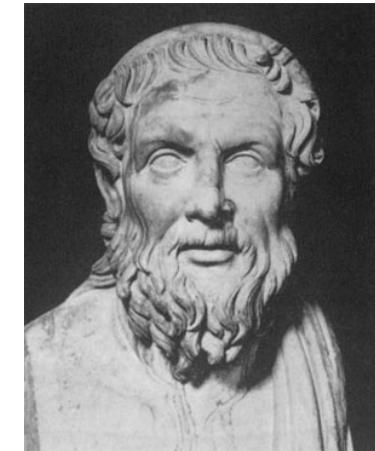
L'intérêt de multiplier les échelles granulaires dans un même matériau est d'augmenter sa compacité et donc ses propriétés mécaniques.

Les principes géométriques étaient déjà esquissés dans la Grèce Antique.

Cette exigence est souvent la source de grande difficultés liées aux procédés de mélange.



*Empilement apollonien*



**Apollonius de Perge**  
(262BC-190BC)



**Mécanique des matériaux granulaires**

## **Aspects micromécaniques**

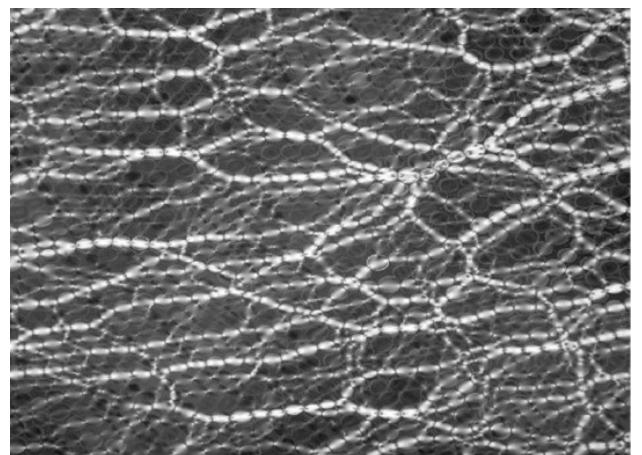
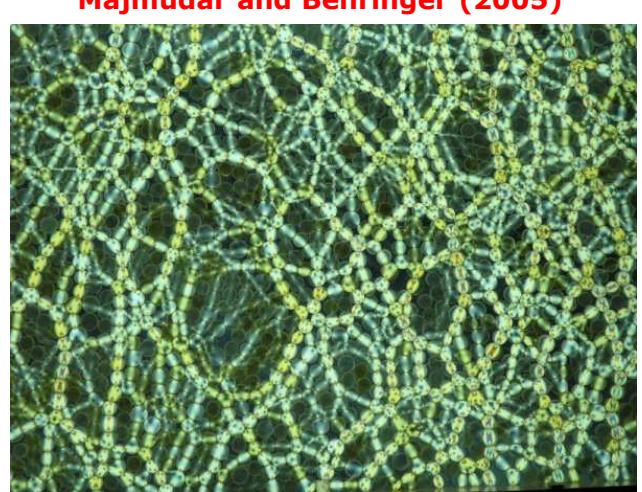
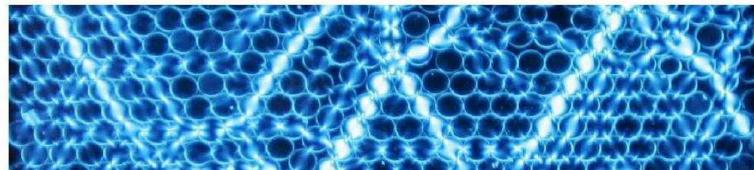
## Chaînes de forces

### -Mise en évidence expérimentale

Observation de disques biréfringents sous lumière polarisée, pour distinguer les grains soumis à des contraintes importantes des grains peu chargés. Les efforts se répartissent de façon inhomogène selon des chaînes de grains, même si l'empilement est monodisperse et régulier. On en déduit l'heuristique suivante :

- les grains les plus chargés (situés sur les chaînes de forces) reprennent l'essentiel des sollicitations mécaniques

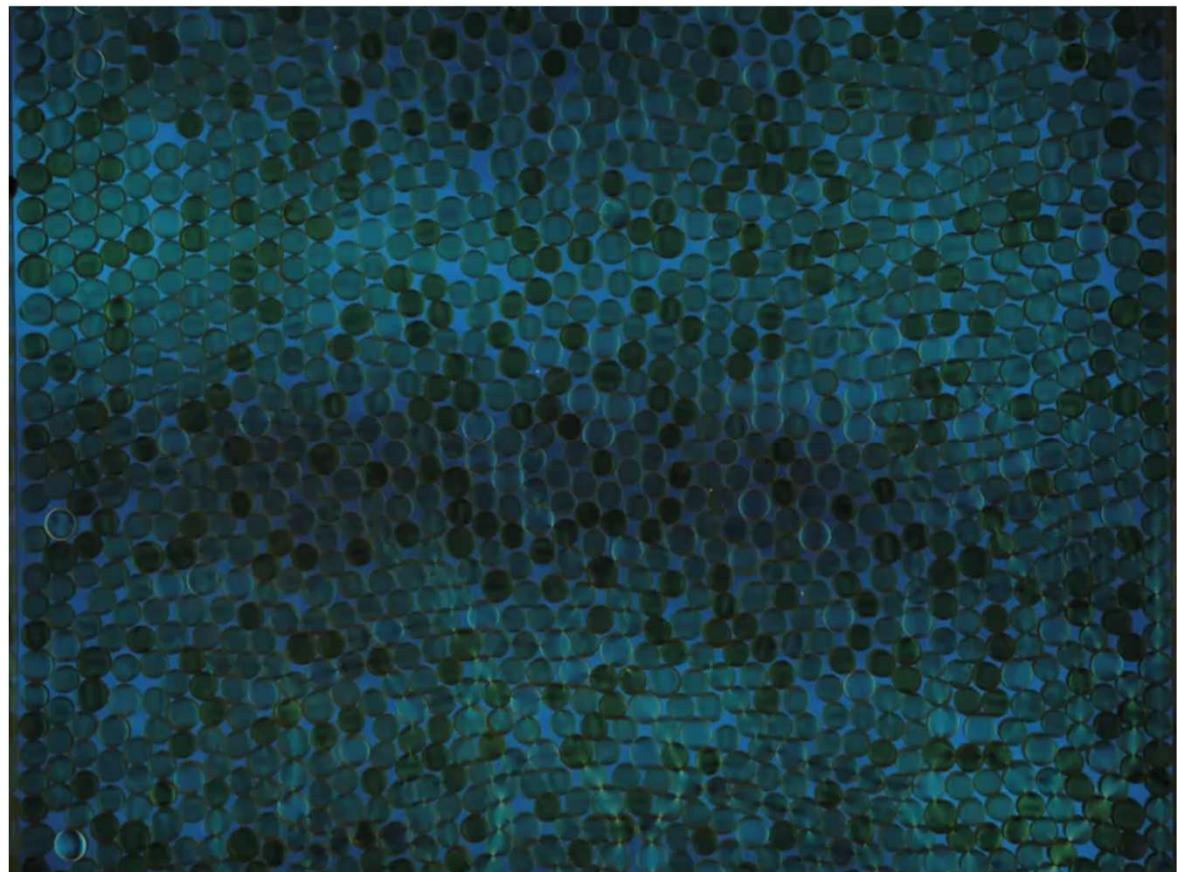
- les grains en dehors de ces chaînes les empêchent de flamber selon leurs directions transversales.



## Chaînes de forces

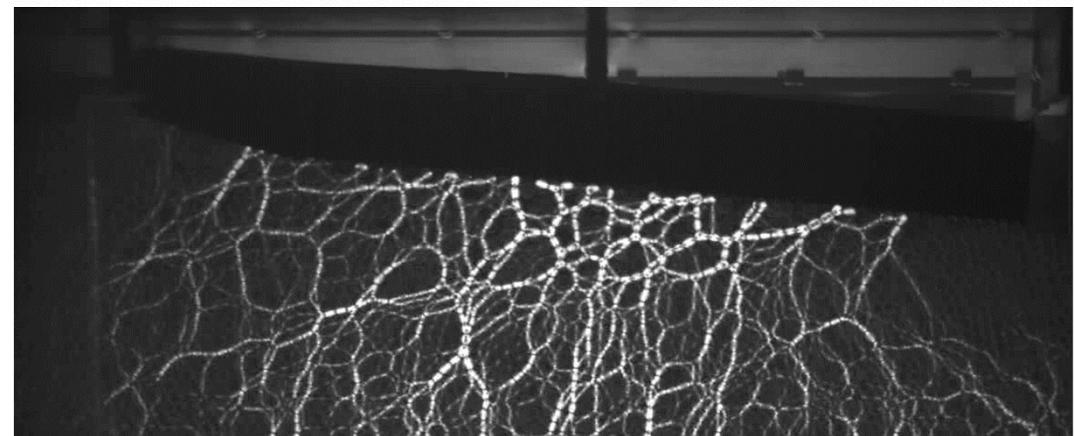
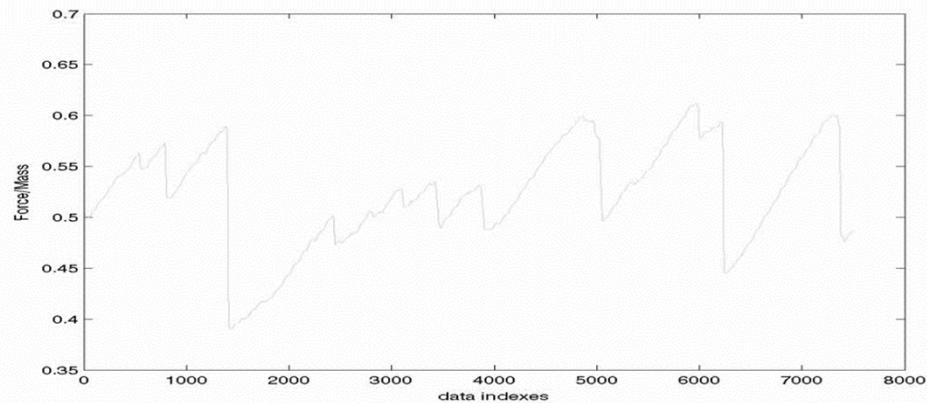
- Mise en évidence expérimentale
- Anisotropie du réseau de forces

Duke University



## Chaînes de forces

- Mise en évidence expérimentale
- Anisotropie du réseau de forces
- Fluctuations du réseau de forces

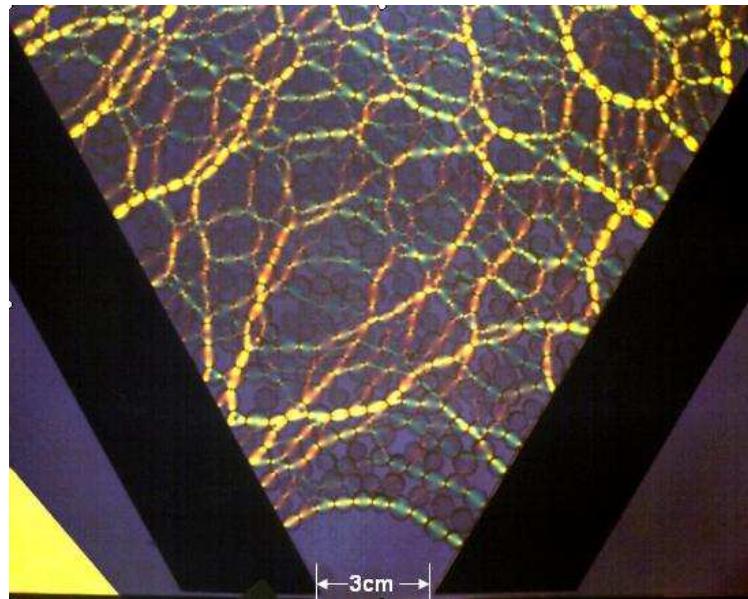


Duke University

## Effet de voûte

L'effet de voûte, traditionnellement utilisé en architecture, est un comportement spectaculaire typique des matériaux granulaires.

Il peut être à l'origine de situations néfastes (blocages) dans les systèmes de stockage de type trémies convergentes.





**Mécanique des matériaux granulaires**

**Modélisation discrète**

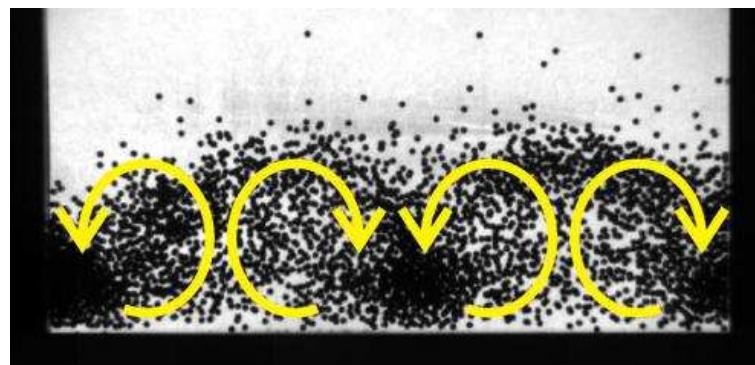
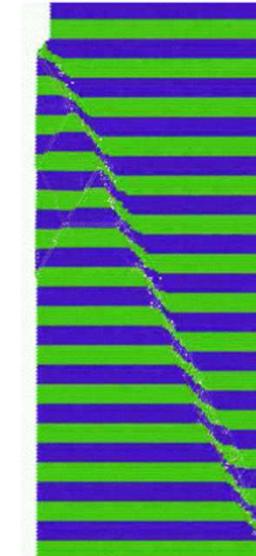
## Principes de la méthode

### -Limites des modèles continus

- Comportement « solide »
  - > Elastoplasticité de Mohr-Coulomb, etc.

- Ecoulements denses
  - > Approches hydrodynamiques de Saint-Venant, etc.

- Ecoulements collisionnels
  - > Théorie cinétique des gaz granulaires, etc.



## Principes de la méthode

- Limites des modèles continus**
- Idée directrice de la méthode**

La modélisation discrète (DEM) consiste à revenir sur l'hypothèse de continuité, et à utiliser une conception plus intuitive de la notion de matériau granulaire.

Puisqu'on ne connaît pas de loi macroscopique qui contrôle le comportement de ce type de matériau dans tous les régimes possibles, on revient vers ce qu'on connaît : les lois qui gouvernent le comportement de chaque grain, modélisé par un solide rigide.

Elles sont de deux types :

- lois gouvernant le mouvement des grains (lois de la dynamique)
- lois gouvernant les efforts appliqués aux grains (modèles de contacts)

La DEM se nourrit donc de deux disciplines : la dynamique des solides et la mécanique du contact. Elle ne s'appuie plus sur la mécanique des milieux continus.

## Principes de la méthode

- Limites des modèles continus
- Idée directrice de la méthode
- Avantages**

L'avantage principal de la DEM est sa simplicité conceptuelle. Elle consiste simplement à résoudre l'équation du mouvement de Newton appliquée à chaque grain :

$$m_i \frac{d^2 \vec{x}_i}{dt^2} = \sum \vec{F}_i$$

Avec  $m_i$  la masse du grain

$\vec{x}_i$  son vecteur position

$\sum \vec{F}_i$  la résultante des efforts subis par ce grain (efforts à distance et efforts de contact)

Une équation comparable doit être considérée pour les degrés de liberté rotationnels

## Principes de la méthode

- Limites des modèles continus
- Idée directrice de la méthode
- Avantages**

Par ailleurs, la DEM présente l'avantage d'être :

-flexible: les efforts de contact entre les grains sont contrôlés par des modèles de contact, dans lesquels on est libre d'introduire la complexité et la physique que l'on souhaite (frottement, cohésion, cimentation, endommagement, lois multi-physiques, etc.).

-générale : dans une seule méthode on est capable de traiter la totalité des régimes de comportement des matériaux granulaires : quasi-statique, plasticité, écoulements denses et collisionnels, etc.

-instructive : La méthode permet d'accéder numériquement à des informations qui sont inaccessibles à la mesure expérimentale : statut et efforts de contacts, cinématiques individuelles des grains, etc. On parle donc souvent « d'expérimentation numérique ».

## Principes de la méthode

- Limites des modèles continus
- Idée directrice de la méthode
- Avantages
- Inconvénient

L'unique inconvénient de la DEM est très problématique : il s'agit de son coût calculatoire.

Ce coût augmente très vite avec le nombre de grains composant le système et avec la durée du phénomène simulé. Il peut atteindre plusieurs heures/jours/semaines/mois selon le cas. Pour cette raison, la technique est aujourd'hui généralement restreinte à:

- des phénomènes courts (quelques secondes)
- des systèmes modestes (de 1000 à 100000 grains)

Cet inconvénient est le principal frein à l'utilisation de cette technique dans un cadre industriel. Elle a donc longtemps été restreinte au champ de la recherche universitaire, bien que les choses commencent à évoluer.



## Mécanique des matériaux granulaires

# Efforts de contact standards

## Efforts de contact standards

Puisque l'on va écrire la dynamique de chacun des grains, on doit décrire de manière très précise les efforts auxquels ils sont soumis au cours de la simulation.

On va passer en revue plusieurs types de forces existant lors d'un contact : efforts normaux (raideur et amortissement), efforts tangentiels (raideur et frottement) et couples (dus aux efforts tangentiels ou à une résistance au roulement).

Par simplicité, on se limite ici au cas de grains :

- en deux dimensions
- de formes circulaires

Chacune de ces hypothèses peut être levée par des techniques adaptées, mais les principes resteront les mêmes.

## Efforts de contact standards

On considère donc deux grains  $i$  et  $j$ , de centres et de rayons connus, en contact en un point  $C$ .

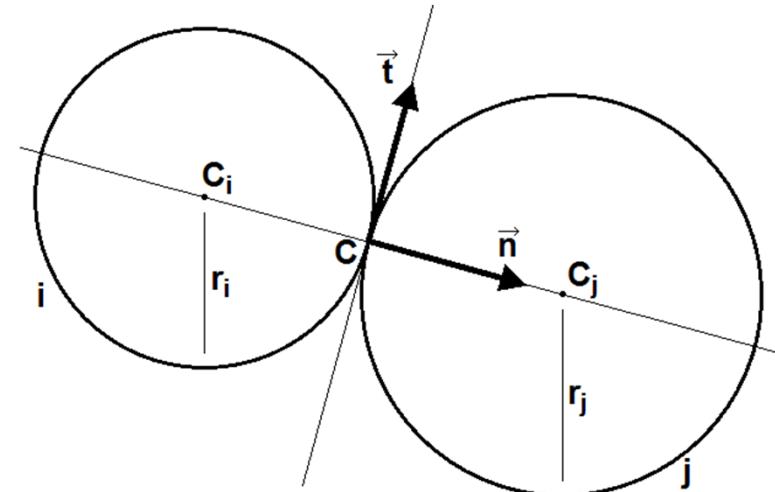
Puisque les particules sont circulaires, les points  $C_i$ ,  $C_j$ , et  $C$  sont alignés, et définissent une direction normale au plan de contact et notée  $\vec{n}$ .

Par ailleurs, la droite tangente aux cercles au niveau du point de contact définit la direction tangentielle, notée  $\vec{t}$ .

Avec ces conventions, toute force de contact appliquée par  $i$  sur  $j$  peut s'exprimer sous la forme :

$$\vec{F}_{ij} = F_n \vec{n} + F_t \vec{t}$$

Les composantes normale et tangentielle de l'effort de contact sont calculées à partir de lois différentes, en fonction notamment de la position et de la vitesse des deux grains.



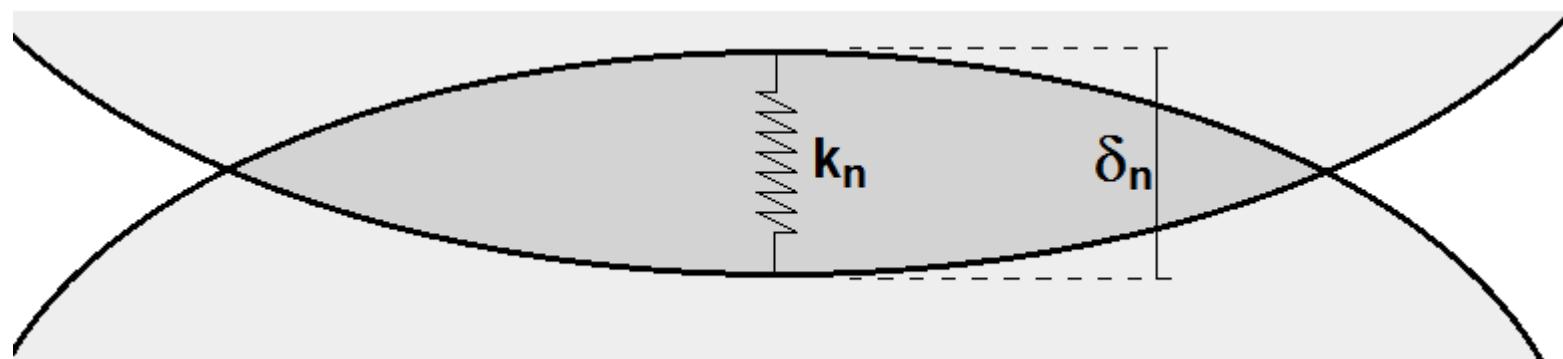
## Efforts de contact standards

### -Raideur normale

Dans le cas général du contact entre deux solides, les zones proches du contact sont soumises à des déformations (par exemple élastiques, selon la théorie de Hertz). On peut les quantifier en utilisant la MMC, mais elles restent généralement négligeables devant la taille des solides.

En DEM classique, elles sont prises en compte par un modèle très simplifié :

- Les grains restent parfaitement rigides et indéformables
- Il ont la possibilité de s'interpénétrer très légèrement
- En cas d'interpénétration, une force répulsive se développe pour s'y opposer



## Efforts de contact standards

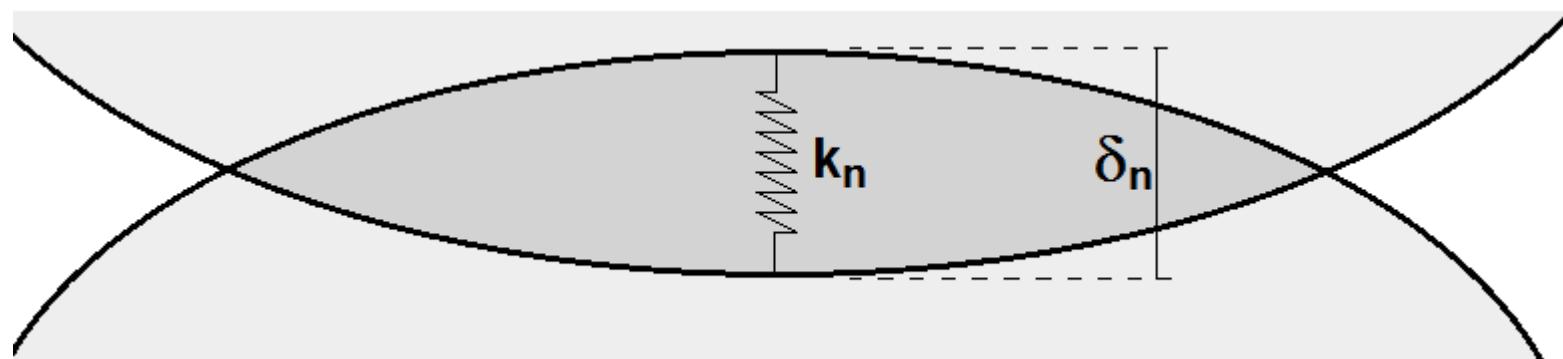
### -Raideur normale

On définit donc une distance d'interpénétration :

$$\delta_n = \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\| - r_i - r_j$$

- Lorsque  $\delta_n > 0$ , les grains ne se touchent pas, et il n'y a pas d'effort de répulsion.
- Lorsque  $\delta_n < 0$ , les grains s'interpénètrent, et on développe un effort normal répulsif proportionnel à l'interpénétration :

$$F_n = \begin{cases} 0 & \text{si } \delta_n > 0 \\ -k_n \cdot \delta_n & \text{si } \delta_n < 0 \end{cases}$$



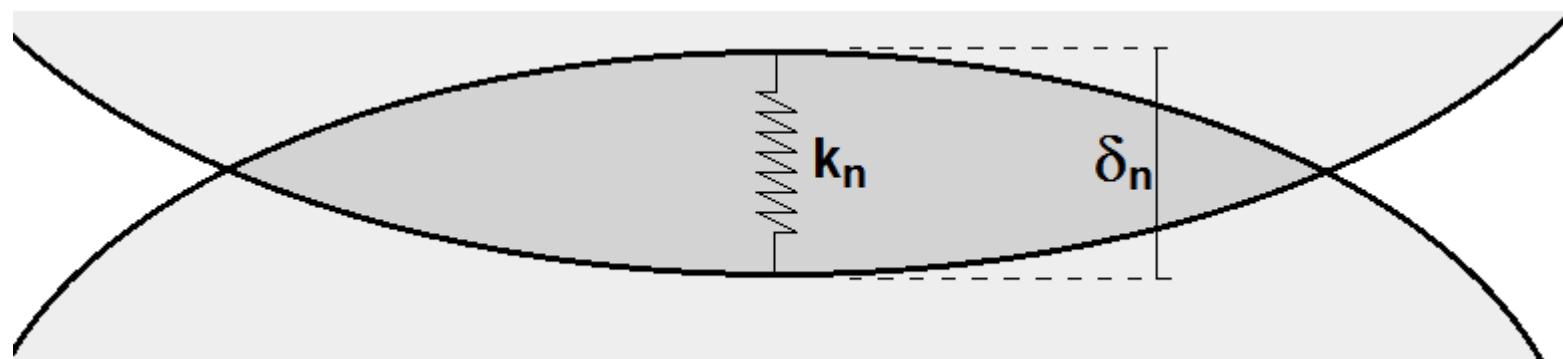
## Efforts de contact standards

### -Raideur normale

La constante  $k_n$  est appelée « raideur normale de contact », et correspond à la raideur d'un ressort fictif que l'on commencerait à étendre à l'instant de la mise en contact.

Le fait d'utiliser une raideur linéaire est en désaccord avec la théorie de Hertz. Pour cette raison, on doit garder à l'esprit que cette raideur est avant tout un paramètre numérique, et non pas un paramètre physique représentant le comportement local du grain. On parle aussi de « paramètre de régularisation » ou de « pénalisation de contact ».

Elle doit être choisie suffisamment élevée pour que les distances d'interpénétration restent faibles par rapport aux diamètres des grains.



## Efforts de contact standards

-Raideur normale

-Amortissement visqueux

Le caractère fortement dissipatif des matériaux granulaires est absent de la modélisation précédente, car le ressort normal est purement élastique, et donc conservatif.

Par ailleurs, la notion de coefficient de restitution est utile en mécanique analytique, mais inapplicable directement en DEM car elle repose sur un choc infiniment court : la vitesse restituée doit être « prescrite », alors qu'en DEM elle est entièrement contrôlée par l'équation de la dynamique et les forces appliquées au grain.

La dissipation énergétique doit donc être introduite dans les forces de contact. La manière la plus simple consiste à placer un amortisseur visqueux en parallèle de la raideur de contact.

## Efforts de contact standards

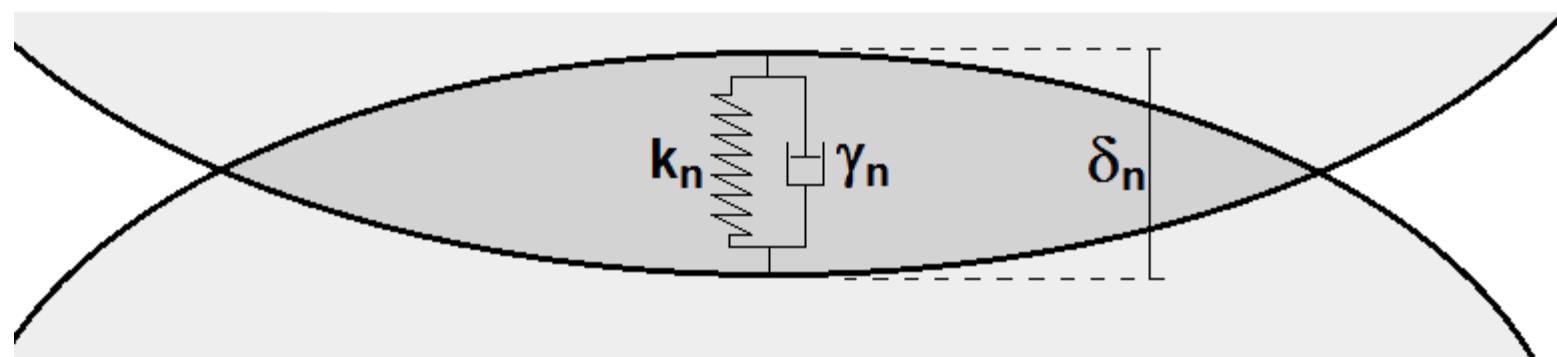
-Raideur normale

-Amortissement visqueux

On note  $\gamma_n$  le coefficient d'amortissement visqueux au contact.

Cet amortissement applique un effort proportionnel à la vitesse relative entre les grains, et dans la direction opposée : il s'oppose toujours au mouvement, et fournit donc un travail négatif : la dissipation normale.

$$F_n = \begin{cases} 0 & \text{si } \delta_n > 0 \\ -k_n \cdot \delta_n - \gamma_n \cdot \frac{d\delta_n}{dt} & \text{si } \delta_n < 0 \end{cases}$$



## Efforts de contact standards

-Raideur normale

-Amortissement visqueux

Le calcul de la force normale fait intervenir deux termes qui sont des grandeurs cinématiques locales :

$$\delta_n \quad \frac{d\delta_n}{dt}$$

Ces grandeurs doivent être calculées à partir de la cinématique des grains exprimée dans un repère global, puisqu'il s'agit des inconnues principales du problème :

$$\vec{x}_i \quad \vec{x}_j \quad \vec{v}_i \quad \vec{v}_j$$

Les grandeurs globales (nécessaires à l'intégration des équations du mouvement) et locales (nécessaires au calcul des efforts de contact) sont reliées par l'intermédiaire de relation linéaires réversibles que l'on appelle des « mappings » :

$$\delta_n = \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\| - r_i - r_j \quad \frac{d\delta_n}{dt} = (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{n}$$

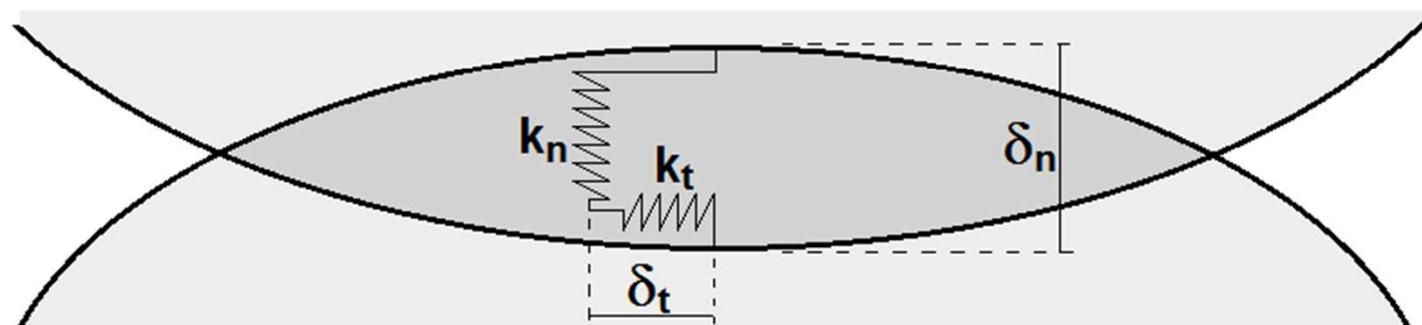
## Efforts de contact standards

- Raideur normale
- Amortissement visqueux
- Raideur tangentielle

Pour profiter de la souplesse de la régularisation de contact utilisée dans la direction normale, on souhaite l'appliquer également dans la direction tangentielle. On définit donc un nouveau paramètre : la raideur tangentielle  $k_t$ .

Pour calculer l'effort tangentiel développé entre deux grains, on doit également définir une « interpénétration tangentielle », notée  $\delta_t$ . L'effort appliqué est donc :

$$F_t = -k_t \cdot \delta_t$$



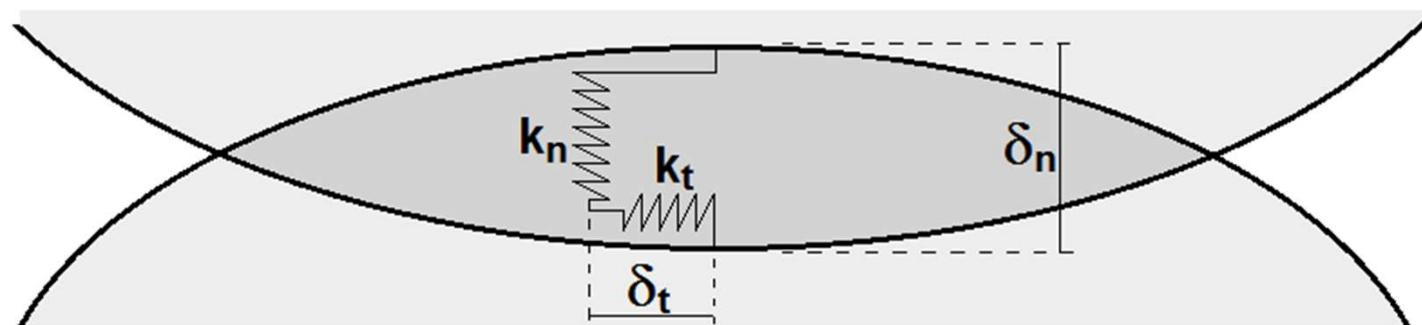
## Efforts de contact standards

- Raideur normale
- Amortissement visqueux
- Raideur tangentielle

La grandeur  $\delta_t$  correspond à l'allongement d'un ressort fictif que l'on aurait commencé à étirer à l'instant de la mise en contact.

On ne peut pas calculer sa valeur instantanément, car celle-ci dépend de l'historique des déplacements relatifs des grains en contact. On doit donc l'intégrer au cours du temps à partir de la vitesse tangentielle relative des grains (en ignorant pour l'instant les rotations) :

$$\frac{d\delta_t}{dt} = (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{t}$$



## Efforts de contact standards

- Raideur normale
- Amortissement visqueux
- Raideur tangentielle
- Frottement et glissement**

Pour que le contact soit réaliste, on doit introduire la possibilité d'un glissement de l'interface, par l'intermédiaire d'une loi de frottement.

On borne donc la norme de l'effort tangentiel par une certaine fraction de l'effort normal, cette fraction étant une constante appelée coefficient de frottement  $\mu$  :

$$|F_t| \leq \mu \cdot F_n$$

Pour appliquer cette loi, on doit d'abord calculer l'effort tangentiel à partir de l'allongement du ressort tangentiel. On détermine ensuite si on est en situation d'adhérence ou de glissement :

$$F_t = \begin{cases} -k_t \cdot \delta_t & \text{si } |-k_t \cdot \delta_t| \leq \mu \cdot F_n \\ sign(-k_t \cdot \delta_t) \cdot \mu \cdot F_n & \text{si } |-k_t \cdot \delta_t| > \mu \cdot F_n \end{cases}$$

## Efforts de contact standards

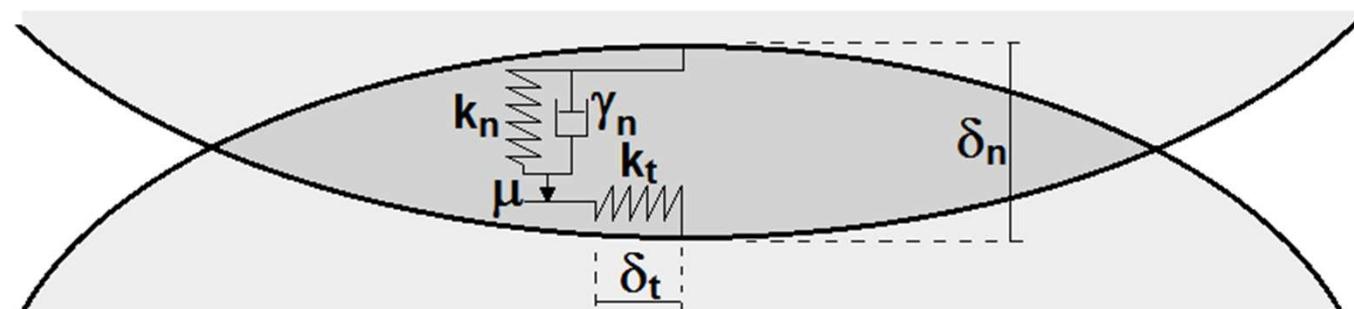
- Raideur normale
- Amortissement visqueux
- Raideur tangentielle
- Frottement et glissement**

Lorsqu'on rentre en glissement, il faut veiller à stopper l'allongement du ressort tangentiel : celui-ci suit le glissement dans son mouvement.

On fixe alors sa valeur à son allongement maximal supportable par le coefficient de frottement, soit :

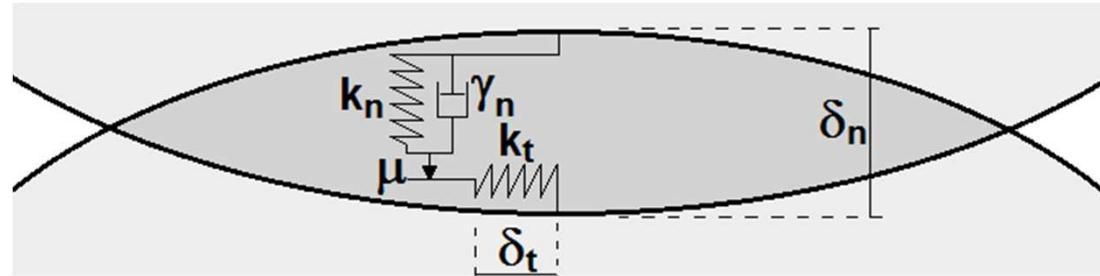
$$\delta_t = \pm \mu F_n / k_t$$

Ceci revient à décaler progressivement la position d'équilibre du ressort.



## Efforts de contact standards

- Raideur normale
- Amortissement visqueux
- Raideur tangentielle
- Frottement et glissement
- Modèle standard



Pour résumer, le modèle de contact standard contient :

-deux paramètres numériques de régularisation, qui ne portent pas de sens physique mais sont nécessaires à la résolution numérique du problème :

$$k_n \qquad \qquad k_t$$

-deux paramètres « physiques » de dissipation énergétique, qui contrôlent le comportement mécanique de l'échantillon granulaire :

$$\gamma_n \qquad \qquad \mu$$



## Mécanique des matériaux granulaires

## Résolution numérique

## Résolution numérique

### -Schéma explicite

La résolution numérique du problème repose sur l'intégration temporelle d'un système composé de  $n_g \times n_d$  équations différentielles ordinaires, où :

- $n_g$  est le nombre de grains
- $n_d$  est le nombre de degrés de liberté par grains (3 en 2D)

La littérature scientifique propose un grand nombre d'algorithmes de résolution d'un tel problème :

- Schéma de Newmark (dynamique vibratoire des structures)
- Schéma prédicteur-correcteur de Gear (dynamique moléculaire)
- Theta-méthode (dynamique des contacts)
- ...

En DEM classique, le schéma le plus utilisé est celui de Verlet, également appelé « leapfrog » (saute-mouton). Contrairement à beaucoup d'autres schémas, il n'a pas besoin que les grandeurs soient suffisamment dérivables, et traite efficacement les changements brutaux de directions lors des contacts.

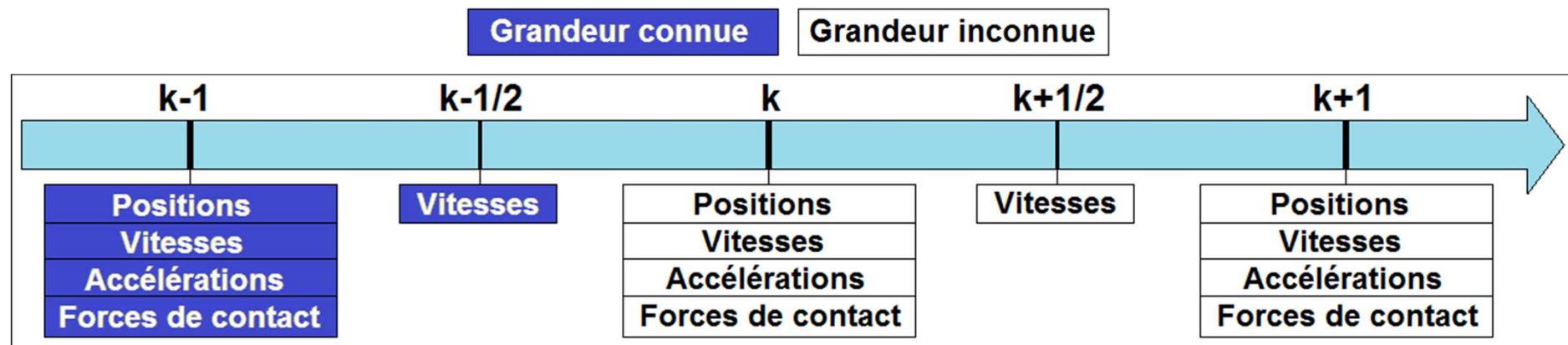
## Résolution numérique

### -Schéma explicite

Le principe du schéma de Verlet est d'utiliser les pas de temps (i.e.  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t$ , etc.) pour décrire les positions des particules et des milieux de pas de temps (i.e.  $t = \Delta t/2, 3\Delta t/2, 5\Delta t/2$ , etc.) pour décrire les vitesses.

Il s'agit d'un calcul par récurrence. On suppose que l'état du système est entièrement connu à un instant  $k - 1$ , et on suppose par ailleurs que les vitesses sont connues à l'instant  $k - 1/2$ .

On va alors progresser pas à pas pour déterminer tous ces paramètres à l'instant suivant.



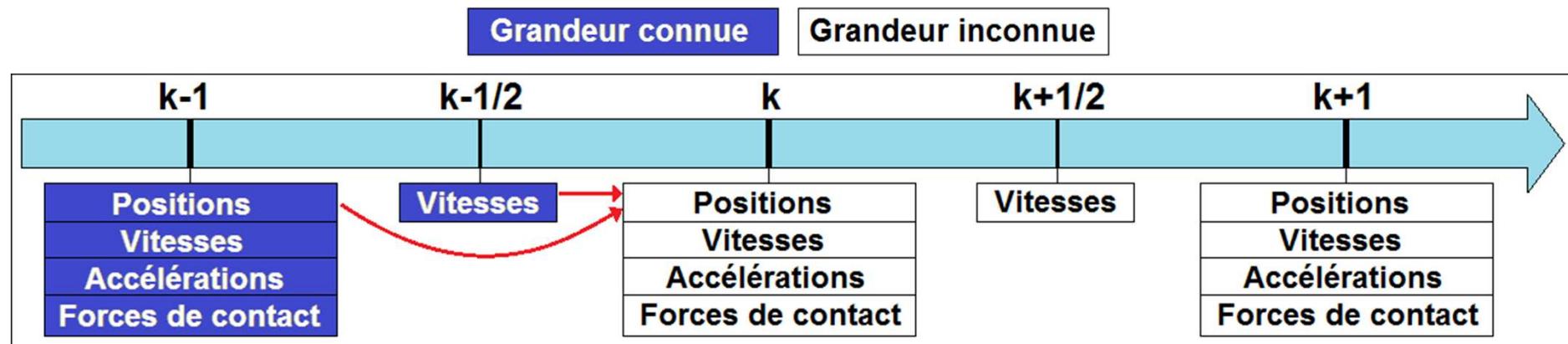
## Résolution numérique

### -Schéma explicite

La première étape consiste à déterminer la position des particules à l'instant  $k$ , à partir des positions à l'instant précédent et de la vitesse à l'instant intermédiaire entre les deux :

$$\vec{x}_k = \vec{x}_{k-1} + \vec{v}_{k-1/2} \cdot \Delta t$$

L'erreur liée à cette linéarisation est minimisée par le fait que la grandeur dérivée (ici la vitesse) est prise au milieu de l'intervalle, et non au début. Il s'agit du premier « saute-mouton ».



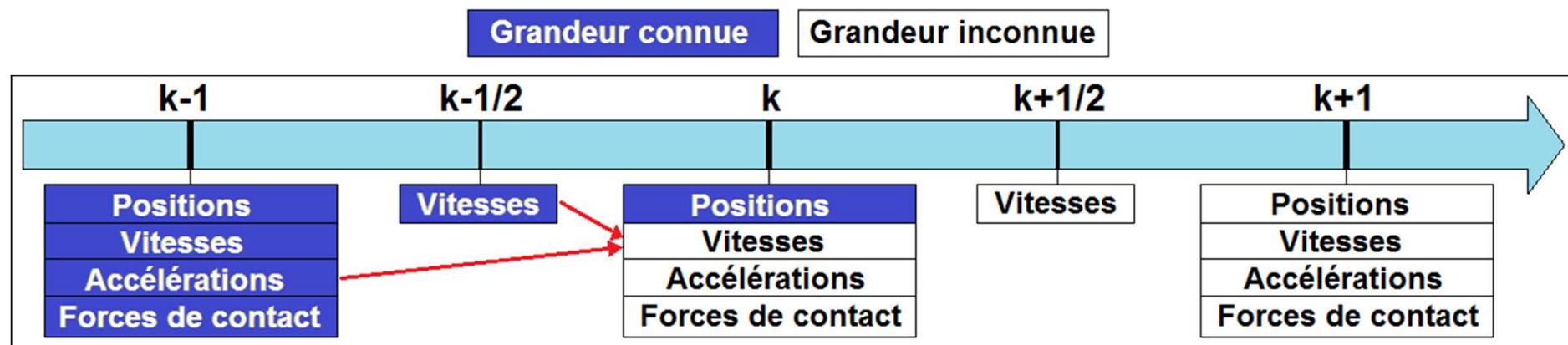
## Résolution numérique

### -Schéma explicite

On calcule également la vitesse à l'instant  $k$ , à partir de la vitesse de demi-pas de temps et de l'accélération précédente :

$$\vec{v}_k = \vec{v}_{k-1/2} + \vec{a}_{k-1} \cdot \Delta t / 2$$

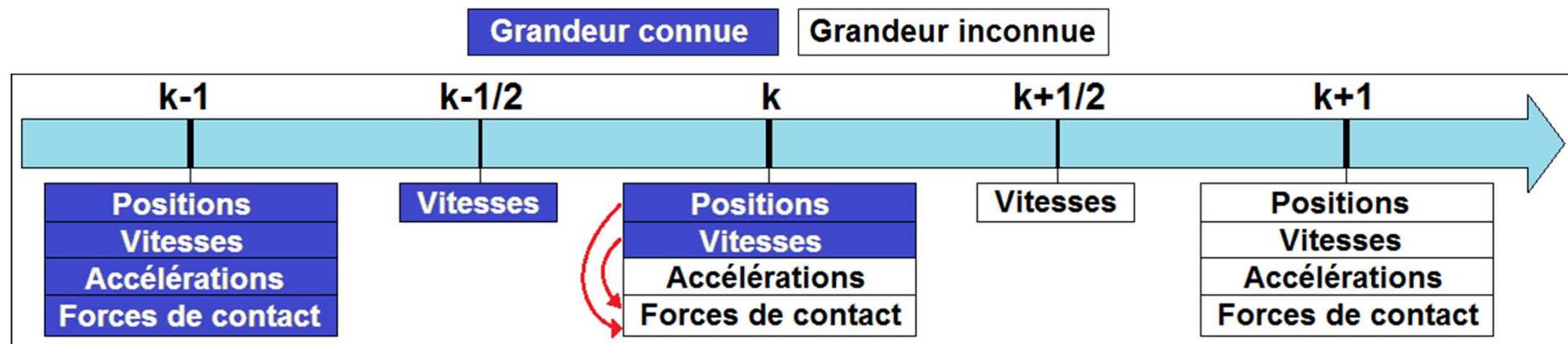
Ce calcul est moins précis (car la grandeur dérivée n'est pas située au milieu de l'intervalle), mais ce n'est pas un problème car il n'a pas le même objectif. La vitesse ainsi calculée ne sera pas utilisée pour continuer le calcul cinématique, mais seulement pour évaluer les efforts de contact qui lui sont liés (typiquement, les efforts d'amortissement)



## Résolution numérique

### -Schéma explicite

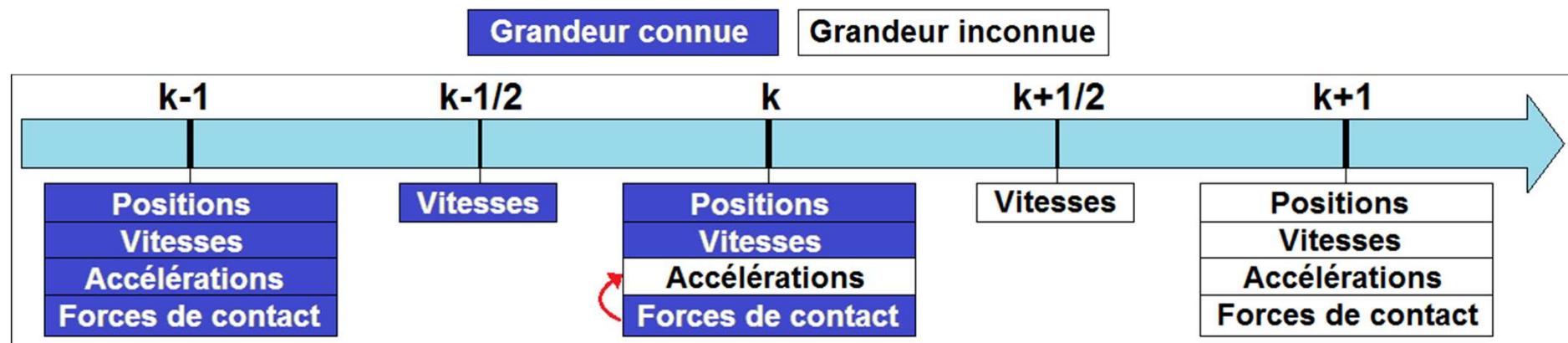
La connaissance des positions et des vitesses des particules à l'instant  $k$  permet d'en déduire les efforts de contacts appliqués à chaque particule à ces instant, par simple application des modèles décrits dans la section précédente.



## Résolution numérique

### -Schéma explicite

Les équations de la dynamique permettent d'en déduire immédiatement l'accélération des particules (à la fois pour les degrés de liberté translationnels et rotationnels).



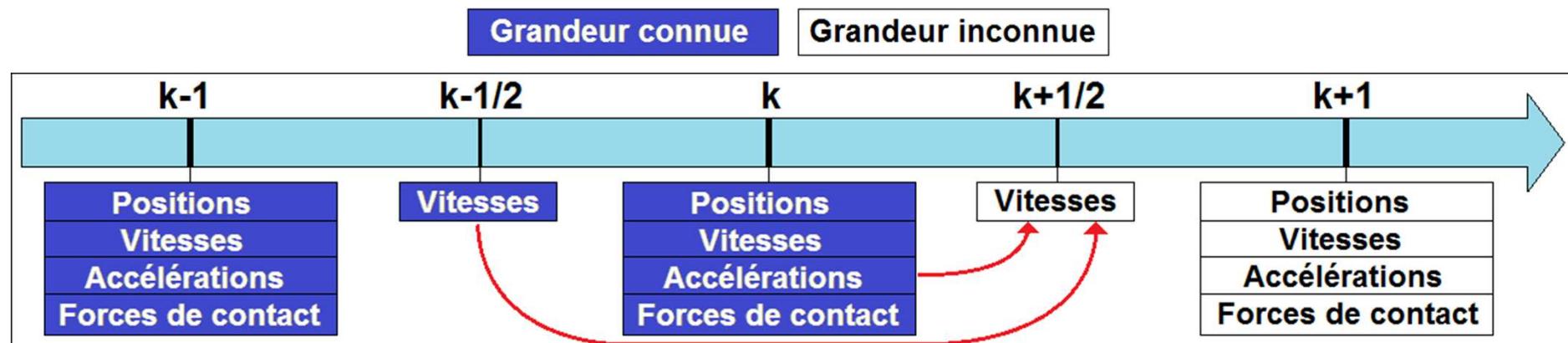
## Résolution numérique

### -Schéma explicite

Par un deuxième « saute-mouton », on évalue la vitesse au demi-pas de temps suivant, en utilisant l'accélération au pas de temps entier :

$$\overrightarrow{v_{k+1/2}} = \overrightarrow{v_{k-1/2}} + \overrightarrow{a_k} \cdot \Delta t$$

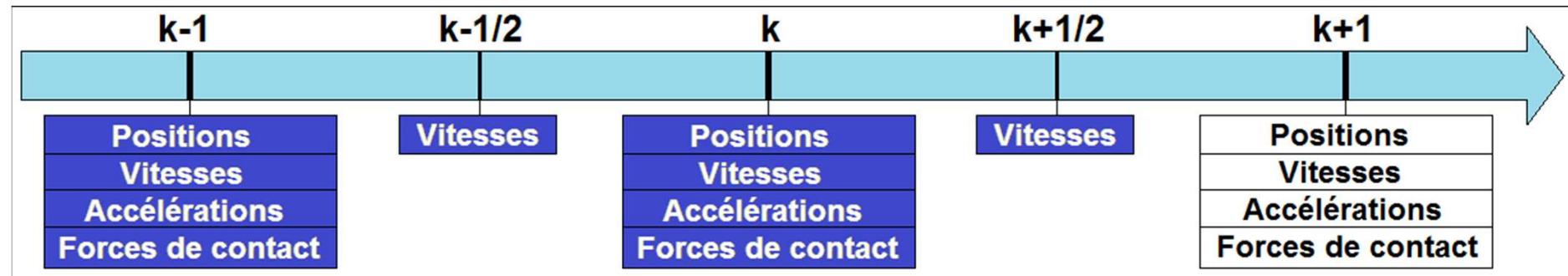
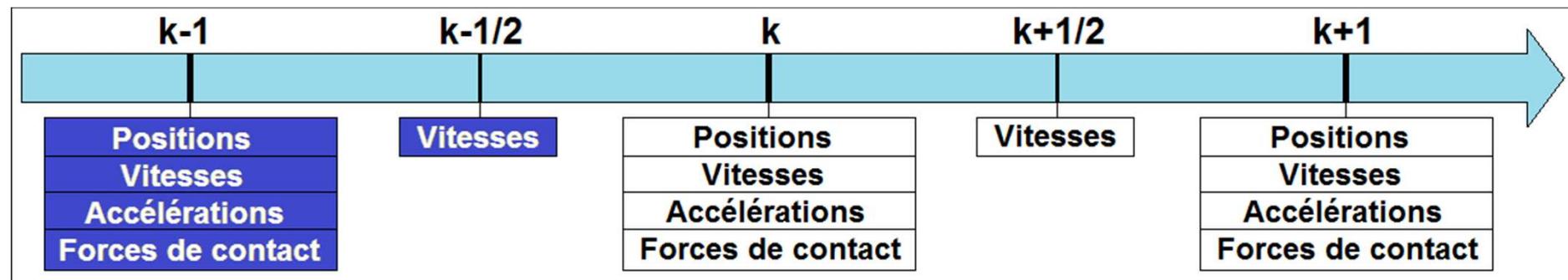
On constate que cette expression ne fait pas intervenir directement  $\overrightarrow{v_k}$ , dont on a vu que le calcul n'était pas aussi précis.



## Résolution numérique

### -Schéma explicite

Par application de ce schéma, on a donc décalé d'un pas de temps notre connaissance de l'état du système. Ces étapes sont bouclées, à partir d'un état initial donné, jusqu'à la fin du phénomène physique que l'on souhaite simuler.



## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

Dans sa version la plus simple, l'algorithme général de la DEM repose sur trois boucles imbriquées.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11. Fin de la boucle sur  $i$
  12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18. Fin de la boucle sur  $j$
      19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    21. Fin de la boucle sur  $i$
    22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  23. Fin de la boucle principale

# Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

## *Initialisation du calcul*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6.     Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7.     Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8.         Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9.         Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10.         Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11.         Fin de la boucle sur  $i$
  12.         Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13.             Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14.             Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15.             Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16.                 En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17.                 Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18.                 Fin de la boucle sur  $j$
      19.             Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20.             Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
      21.         Fin de la boucle sur  $i$
      22.         Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    23.         Fin de la boucle principale

# Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

*Boucle temporelle principale du schéma de Verlet*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11. Fin de la boucle sur  $i$
  12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18. Fin de la boucle sur  $j$
      19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    21. Fin de la boucle sur  $i$
    22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    23. Fin de la boucle principale

# Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

*Boucle sur les grains i,  
calcul des positions et  
vitesses à l'instant suivant*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11. Fin de la boucle sur  $i$
  12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18. Fin de la boucle sur  $j$
      19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    21. Fin de la boucle sur  $i$
    22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  23. Fin de la boucle principale

# Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

*Boucle sur les grains i pour le calcul des résultantes d'efforts, des accélérations, et des nouvelles vitesses de demi-pas de temps*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11. Fin de la boucle sur  $i$
  12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18. Fin de la boucle sur  $j$
      19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    21. Fin de la boucle sur  $i$
    22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    23. Fin de la boucle principale

# Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

*Boucle sur toutes les paires pour détecter les contacts*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
11. Fin de la boucle sur  $i$
12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
  14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
  15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
    16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
    17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
  18. Fin de la boucle sur  $j$
  19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
  20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
  21. Fin de la boucle sur  $i$
  22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  23. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

Ces trois boucles imbriquées sont responsables du coût calculatoire important de la DEM.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6.     Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7.     Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8.         Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9.         Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10.         Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
11.     Fin de la boucle sur  $i$
12.     Boucle sur tous les grains  $i$ 
  13.         Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
  14.         Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
  15.         Boucle sur tous les grains  $j$ 
    16.             En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
    17.             Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
  18.         Fin de la boucle sur  $j$
  19.         Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
  20.         Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
21.     Fin de la boucle sur  $i$
22.     Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
23. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

Dans cet algorithme, à chaque itération de la boucle principale, on est obligé de tester toutes les paires de grains pour détecter d'éventuels contacts.

-> complexité en  $n_{grains}^2$

Pourtant, beaucoup de ces calculs sont inutiles.

Deux particules très éloignées à un instant donné ne se rencontreront pas à l'instant suivant, le test est inutile.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Initialisation du temps :  $k = 0$
5. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
6. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
7. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  8. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  9. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  10. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  11. Fin de la boucle sur  $i$
  12. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    13. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    14. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    15. Boucle sur tous les grains  $j$ 
      16. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      17. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      18. Fin de la boucle sur  $j$
      19. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      20. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
      21. Fin de la boucle sur  $i$
      22. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    23. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

-Algorithme amélioré

Pour résoudre ce problème, un algorithme optimisé est utilisé.

Il est très proche de l'algorithme initial, mais introduit la notion de liste de voisinage.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
    15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
    16. Fin du test sur  $k$
    17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
      20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
    22. Fin de la boucle sur  $j$
    23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
    24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
  25. Fin de la boucle sur  $i$
  26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  27. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

-Algorithme amélioré

*Au lieu de la double-boucle testant tous les couples potentiels de particules, on teste simplement les contacts faisant partie de la liste de voisinage de chaque grains i.*

*Il s'agit de la liste des grains raisonnablement susceptibles d'entrer en contact avec i dans un avenir proche.*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
    15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
    16. Fin du test sur  $k$
    17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
      20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
    22. Fin de la boucle sur  $j$
    23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
    24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
  25. Fin de la boucle sur  $i$
  26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  27. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

-Algorithme amélioré

*Bien entendu, cette liste de voisinage doit être mise à jour périodiquement, à une fréquence qui dépend de l'agitation du milieu.*

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$
14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
  15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
  16. Fin du test sur  $k$
  17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
  18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
  19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
    20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
    21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
  22. Fin de la boucle sur  $j$
  23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
  24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
25. Fin de la boucle sur  $i$
26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
27. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

-Schéma explicite

-Algorithme général

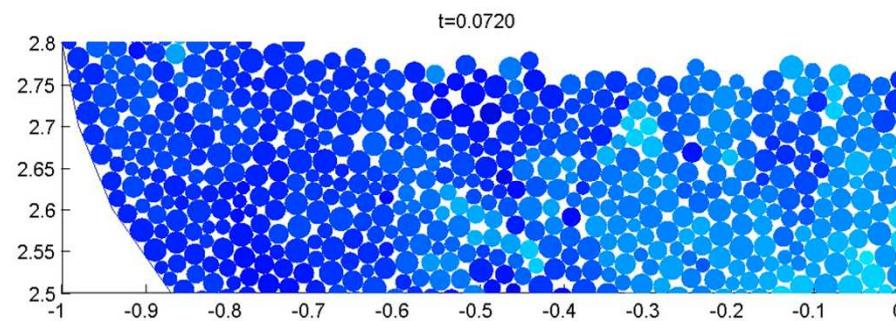
-Algorithme amélioré

Cette technique permet donc de passer à un coût calculatoire proche de  $n_{grains} \cdot n_{voisins}$ , à comparer au coût en  $n_{grains}^2$  de l'algorithme principal.

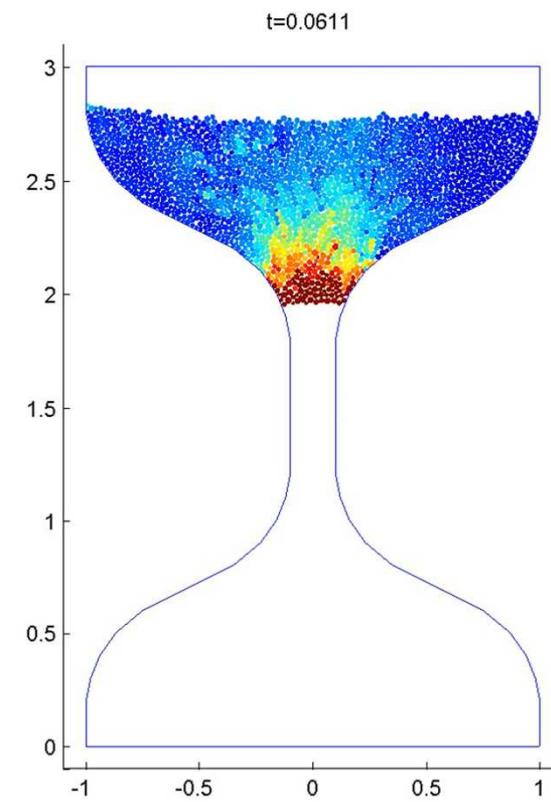
1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
    15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
    16. Fin du test sur  $k$
    17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
      20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
    22. Fin de la boucle sur  $j$
    23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
    24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
  25. Fin de la boucle sur  $i$
  26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  27. Fin de la boucle principale

## Résolution numérique

- Schéma explicite
- Algorithme général
- Algorithme amélioré
- Détermination des paramètres numériques**



Lorsque les paramètres sont mal choisis, ils conduisent à des instabilités numériques.





**Mécanique des matériaux granulaires**

## **Techniques de simulation**

## Détection de voisinage

### -Principes

Dans l'algorithme DEM optimisé, l'opération de détection du voisinage a une importance cruciale.

Elle consiste, pour chaque particule  $i$ , à déterminer la liste des particules  $j$  qu'elle est susceptible de rencontrer dans un avenir proche. Cette étape doit :

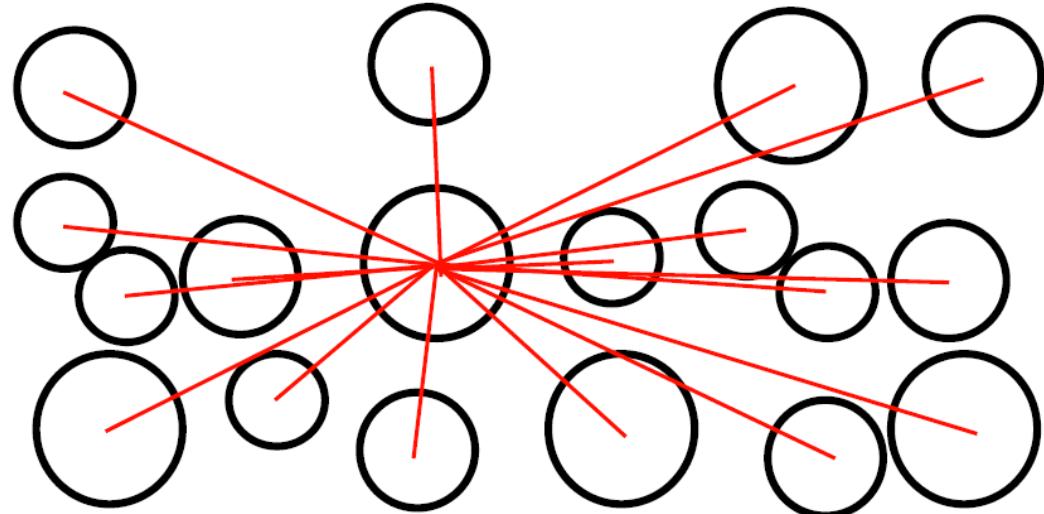
- être peu gourmande en temps de calcul

- éviter de surestimer le nombre de contacts potentiels de chaque grain

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
    15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
16. Fin du test sur  $k$
17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
  20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
  21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
22. Fin de la boucle sur  $j$
23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
25. Fin de la boucle sur  $i$
26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
27. Fin de la boucle principale

## Détection de voisinage

- Principes
- Méthode directe



La méthode la plus évidente consiste à effectuer une double boucle sur l'ensemble des paires de grains, et à sélectionner comme voisins toutes les paires dont la distance de séparation  $\delta_n$  est inférieure à une certaine distance  $\delta_{voisin}$ .

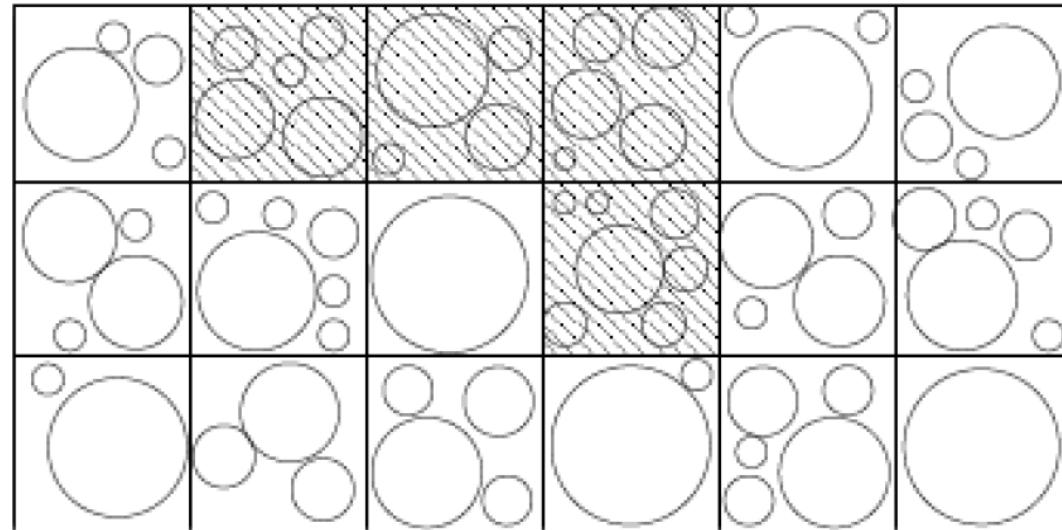
Celle-ci est choisie par le modélisateur, par exemple telle que :

$$\delta_{voisin} \cong D_{max}$$

Cette méthode est la plus simple, la plus robuste, mais aussi la plus coûteuse. Elle doit être effectuée à une certaine fréquence qui dépend de l'agitation du milieu. Le choix de cette fréquence relève de l'art du modélisateur...

## Détection de voisinage

- Principes
- Méthode directe
- Méthode de partition



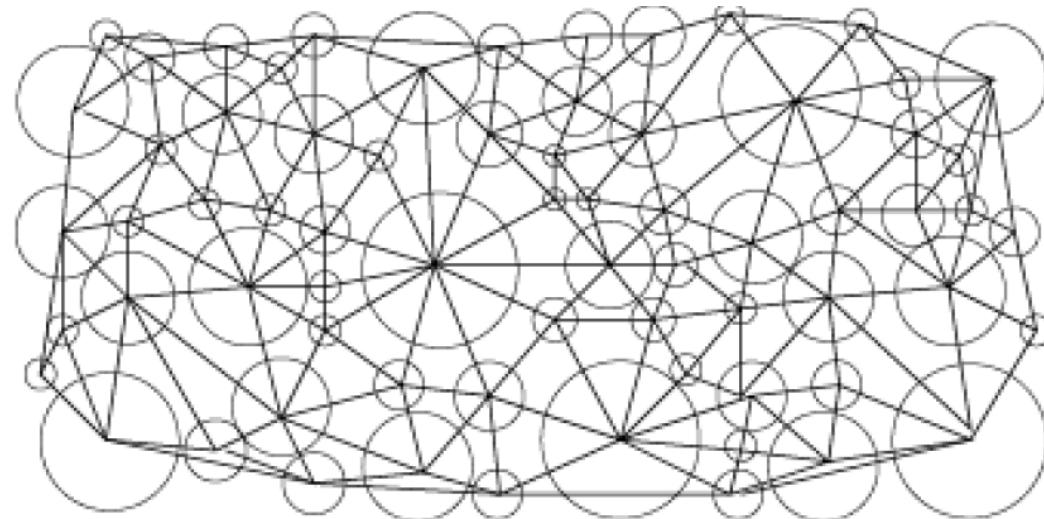
L'ensemble du système est subdivisé selon une grille régulière (avec un pas proche du plus gros diamètre), et chaque particule appartient à une case donnée. L'attribution d'une case à chaque particule est une opération peu couteuse.

La liste des voisins de chaque particule est ensuite composée de toutes les particules appartenant à la même case et aux cases voisines.

Cette méthode est la plus répandue. Son seul inconvénient est un coût mémoire important si le système est très dilué.

## Détection de voisinage

- Principes
- Méthode directe
- Méthode de partition
- Méthode de triangulation**



La triangulation de Delaunay est un outil mathématique de partition de l'espace en triangles, les plus réguliers possibles, à partir d'un nuage de points. Dans le contexte DEM, elle est appliquée aux centres des grains.

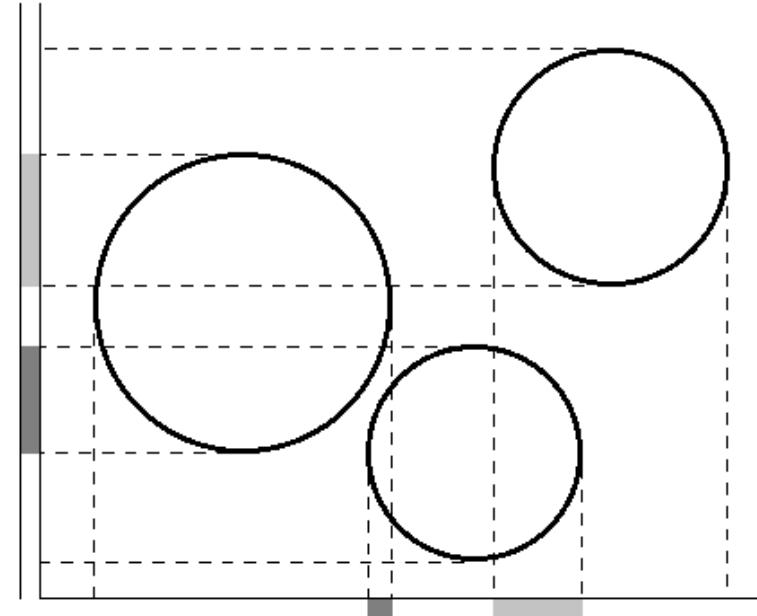
Une fois la triangulation effectuée, la liste des voisins est automatiquement connue pour chaque particule. Des problèmes peuvent survenir dans les échantillons très polydisperses (on peut rater des voisinages) et aux limites de l'échantillon (on rajoute des voisins peu pertinents).

La méthode reste peu utilisée en DEM.

## Détection de voisinage

- Principes
- Méthode directe
- Méthode de partition du conteneur
- Méthode de triangulation
- Méthode sweep-and-prune

Cette méthode consiste à déterminer les coordonnées extrêmes de chaque particule sur chaque axe (par exemple  $[x_{min}, x_{max}]$  ).



On détermine ensuite un voisinage « par axe », en déterminant les intersections entre les intervalles représentatifs des différents grains. Finalement, deux particules sont considérées voisines si elles le sont sur chaque axe.

Le principal intérêt de cette approche apparaît lorsque l'on travaille avec des particules non-sphériques, pour lesquelles les intervalles projetés sur les axes sont une approximation peu coûteuse mais efficace d'une forme complexe.

## Génération d'un état initial

### -Principes

Dans le processus de simulation, la réalisation de l'état initial est une étape cruciale.

Elle consiste à déterminer les positions et vitesses de toutes les particules dans l'état souhaité pour le démarrage du calcul.

Si elle est mal réalisée, elle peut avoir un coût calculatoire plus élevé que la simulation elle-même.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
  9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
  10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
  11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
12. Fin de la boucle sur  $i$
13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
  14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
    15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
    16. Fin du test sur  $k$
    17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
    18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
    19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
      20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
      21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
    22. Fin de la boucle sur  $j$
    23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
    24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
  25. Fin de la boucle sur  $i$
  26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
  27. Fin de la boucle principale

## Génération d'un état initial

### -Principes

Les étapes sont toujours les mêmes :

1. Générer par une méthode géométrique un échantillon de départ (positions et diamètres), en l'absence de contact.
2. Par simulation discrète, amener cet échantillon vers l'état de compacité et de contrainte souhaité.
3. Réaliser la simulation proprement dite.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
  7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
  8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
    9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
    10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
    11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  12. Fin de la boucle sur  $i$
  13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
      15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
      16. Fin du test sur  $k$
      17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
      18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
      19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
        20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
        21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      22. Fin de la boucle sur  $j$
      23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    25. Fin de la boucle sur  $i$
    26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    27. Fin de la boucle principale

## Génération d'un état initial

### -Principes

La première étape est la plus importante. Elle doit :

-Etre la moins coûteuse possible

-Conduire à l'échantillon le plus dense possible, pour réduire le coût de sa compaction par DEM.

1. Définition de l'état initial :  $\vec{x}_0$  et  $\vec{v}_{1/2}$  pour chaque particule composant l'échantillon
2. Définition de la valeur du pas de temps :  $\Delta t$
3. Définition de la durée souhaitée de la simulation :  $k_{fin} = t_{fin}/\Delta t$
4. Définition de la période  $n_v$  de mise à jour des listes de voisinage
5. Initialisation du temps :  $k = 0$
6. Tant que  $k < k_{fin}$ , boucle principale :
  7. Avancée dans le temps :  $k = k + 1$
  8. Boucle sur tous les grains  $i$  :
    9. Calcul de la nouvelle position  $\vec{x}_k$  du grain  $i$
    10. Calcul de la vitesse  $\vec{v}_k$  du grain  $i$
    11. Mise à jour de l'allongement  $\delta_t$  des ressorts tangentiels
  12. Fin de la boucle sur  $i$
  13. Boucle sur tous les grains  $i$ 
    14. Si  $k$  est un multiple de  $n_v$ 
      15. Mise à jour de la liste de voisinage du grain  $i$
      16. Fin du test sur  $k$
      17. Initialisation des résultantes d'efforts sur le grain  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{0}$
      18. Application des efforts à distance (par exemple la pesanteur) :  $\vec{F}_i = \vec{F}_{dist}$
      19. Boucle sur tous les grains  $j$  appartenant à la liste de voisinage de  $i$ 
        20. En cas de contact entre  $i$  et  $j$ , calcul de l'effort de contact  $\vec{F}_{ij}$
        21. Mise à jour de la résultante des forces sur  $i$  :  $\vec{F}_i = \vec{F}_i + \vec{F}_{ij}$
      22. Fin de la boucle sur  $j$
      23. Calcul de l'accélération  $\vec{a}_k$  du grain  $i$
      24. Calcul de la vitesse de demi-pas de temps  $\vec{v}_{k+1/2}$
    25. Fin de la boucle sur  $i$
    26. Sauvegarde, Tracé, Monitoring, etc.
    27. Fin de la boucle principale

## Génération d'un état initial

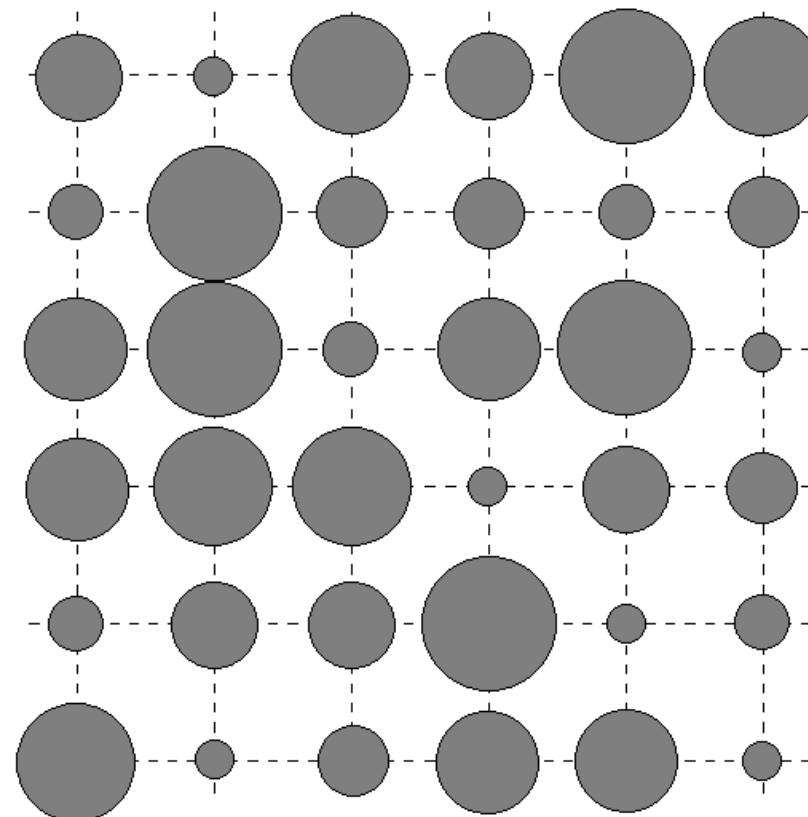
-Principes

-Mise en place sur grille fixe

La méthode la plus simple et la plus rapide pour la mise en place initiale des grains consiste à les disposer sur une grille fixe.

Le pas de la grille est pris égal au plus gros diamètre, pour éviter les interpénétrations initiales.

Les fractions solides obtenues sont très faibles, en particulier pour les échantillons fortement polydisperses. L'étape de compaction sera donc très coûteuse, et cette méthode est peu utilisée.



## Génération d'un état initial

**-Principes**

**-Mise en place sur grille fixe**

**-Mise en place aléatoire**

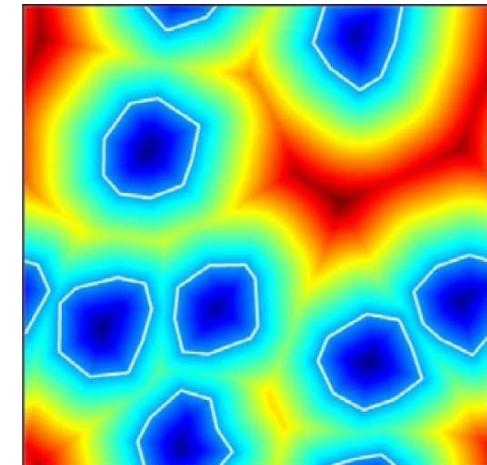
Une alternative à la grille fixe consiste simplement à placer les grains de manière aléatoire dans un contenant, tout en s'assurant qu'aucune interpénétration n'existe.

Pour chaque nouveau grain placé dans le conteneur à une position donnée, on doit donc vérifier ses éventuels contacts avec tous les autres grains déjà en place.

La méthode peut donc devenir très coûteuse, puisqu'il y a de plus en plus de tests à effectuer et de moins en moins d'espace libre quand le processus avance.

On peut l'accélérer en plaçant les grains par ordre décroissant de tailles.

Une approche moderne, fondée sur les « level-sets », permet de rendre cette méthode extrêmement performante.



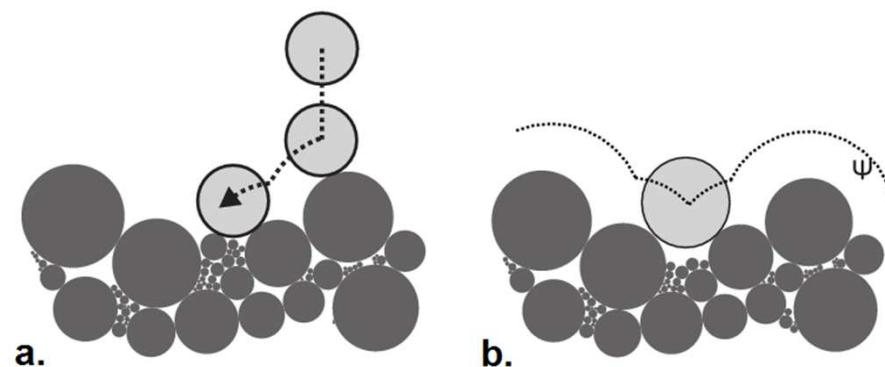
## Génération d'un état initial

- Principes
- Mise en place sur grille fixe
- Mise en place aléatoire
- Minimisation de potentiel**

La méthode consiste à positionner les grains dans le conteneur du bas vers le haut par couches successives, en plaçant chaque nouveau grain aussi bas que possible sur la dernière couche déjà en place. Cette minimisation du potentiel peut s'effectuer :

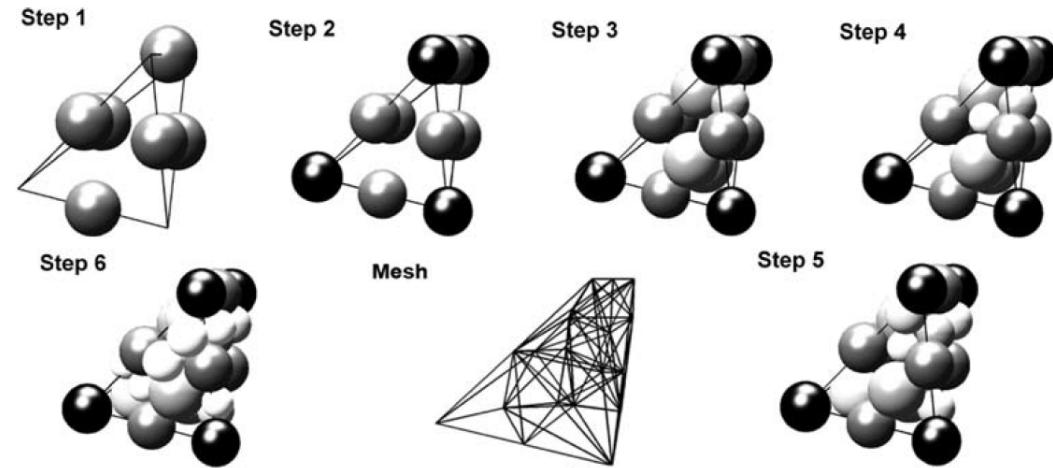
- localement, en choisissant aléatoirement une position sur la couche et en relaxant la position du grain pour qu'il aille au minimum local par une méthode de descente.
- globalement, en gardant en mémoire en permanence le profil de terrain de la couche.

Cette méthode reste généralement complexe à implémenter. Elle laisse souvent des vides sous les grosses particules.



## Génération d'un état initial

- Principes
- Mise en place sur grille fixe
- Mise en place aléatoire
- Minimisation de potentiel
- Assemblage géométrique

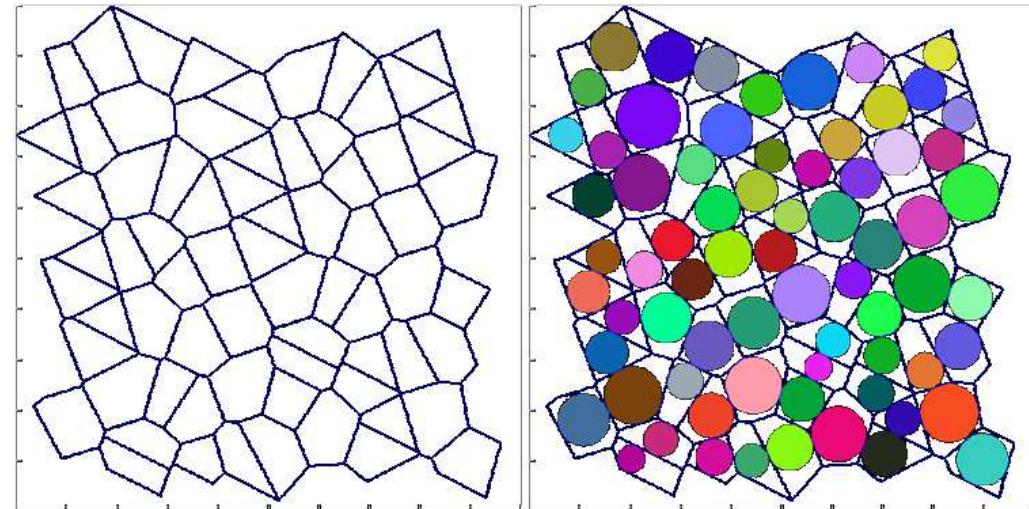


Certaines méthodes géométriques permettent de réaliser des assemblages denses de disques ou de sphères à partir de propriétés géométriques du triangle ou du tétraèdre.

Elles peuvent conduire à des compacités initiales très intéressantes, mais elles n'offrent que peu de contrôle sur la granulométrie de l'échantillon, et sont difficiles à coder.

## Génération d'un état initial

- Principes
- Mise en place sur grille fixe
- Mise en place aléatoire
- Minimisation de potentiel
- Assemblage géométrique
- Partition de Voronoi contrainte**



Une méthode récente propose de diviser le conteneur par une partition de Voronoi. Il s'agit d'une méthode géométrique, duale de celle de Delaunay. A partir d'un ensemble de points positionnés dans l'espace, elle définit pour chaque point  $i$  la région (polygonale ou polyédrique) qui lui correspond (i.e. l'ensemble des points de l'espace plus près de  $i$  que de tout autre  $j$ ).

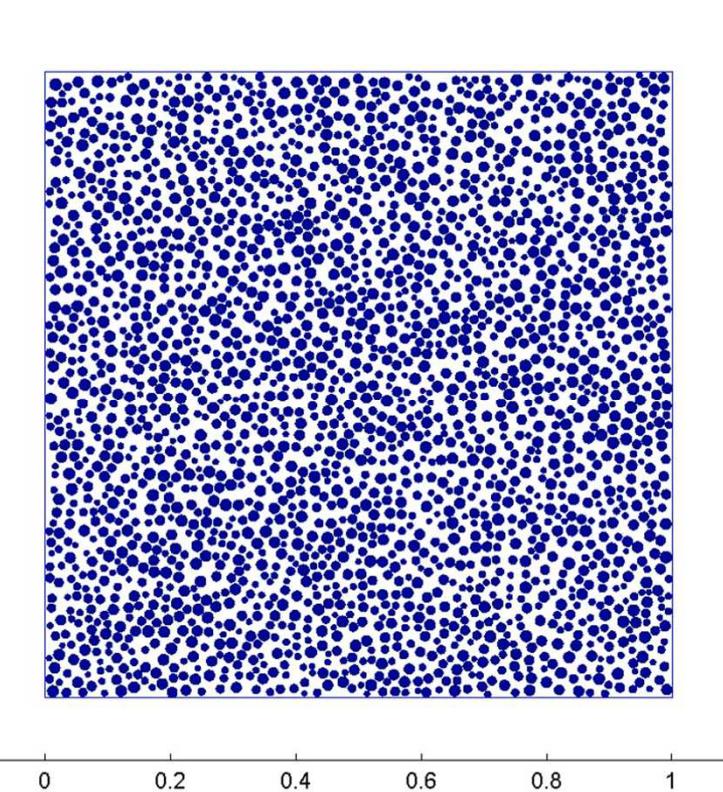
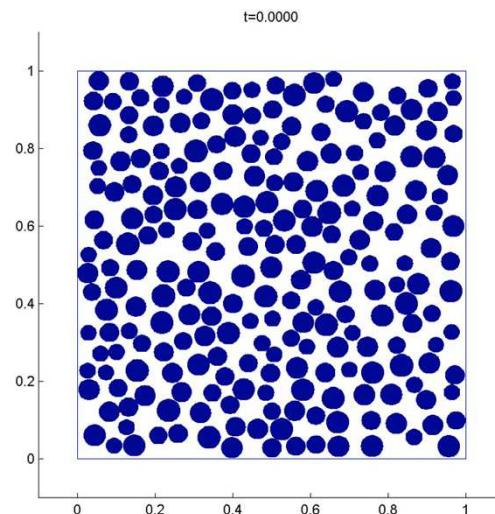
Chaque région est appelée « cellule ». Grâce à des développements récents, on sait modifier le nuage de points initial pour contrôler les propriétés de la partition de Voronoi, en particulier sa granulométrie.

Il est ensuite aisément de remplir chaque cellule avec un grain.

## Génération d'un état initial

- Principes
- Mise en place sur grille fixe
- Mise en place aléatoire
- Minimisation de potentiel
- Assemblage géométrique
- Partition de Voronoi contrainte
- Compaction**

*Compaction isotrope*

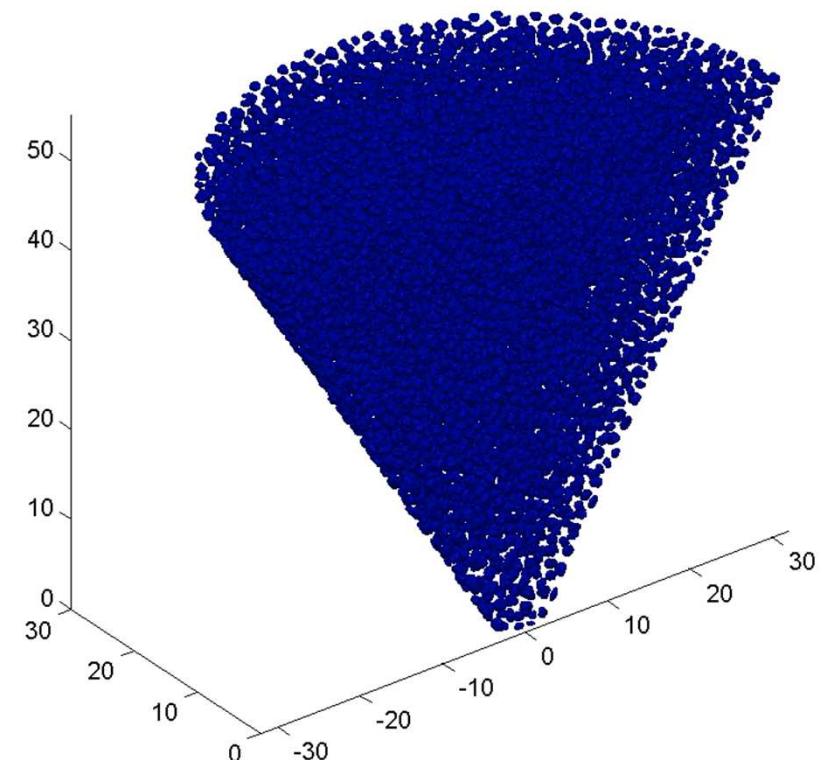


*Compaction gravitaire*



## Génération d'un état initial

- Principes
- Mise en place sur grille fixe
- Mise en place aléatoire
- Minimisation de potentiel
- Assemblage géométrique
- Partition de Voronoi contrainte
- Compaction



*Compaction pour écoulement en silo*

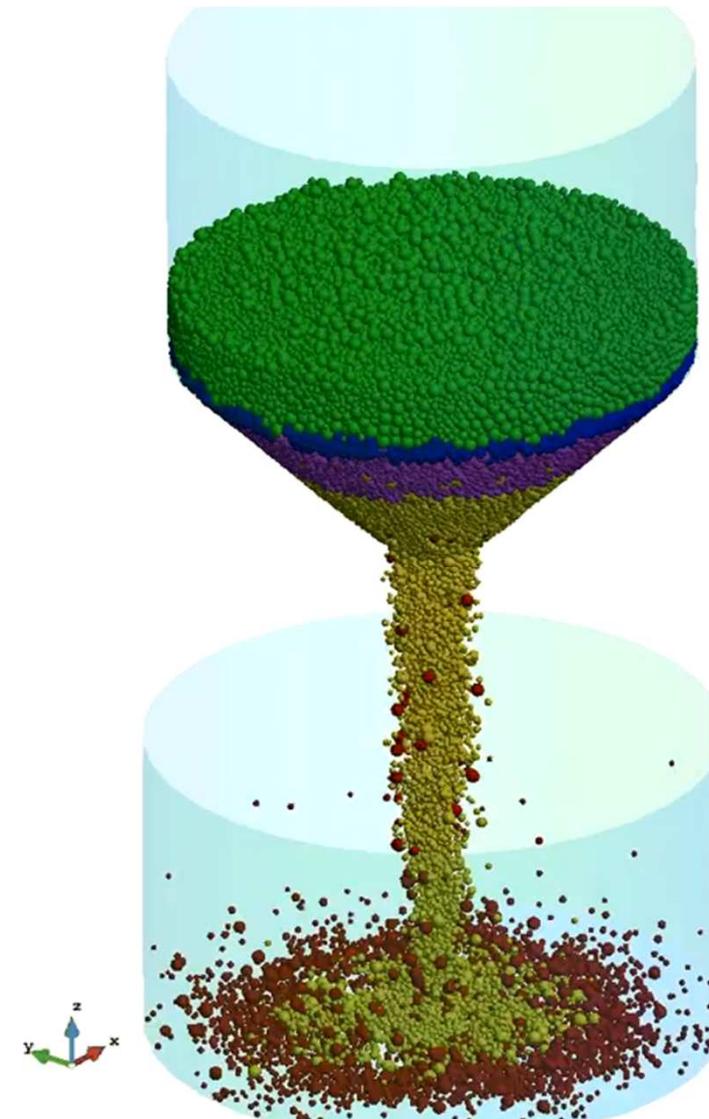


## Mécanique des matériaux granulaires

## Exemples

## Exemples

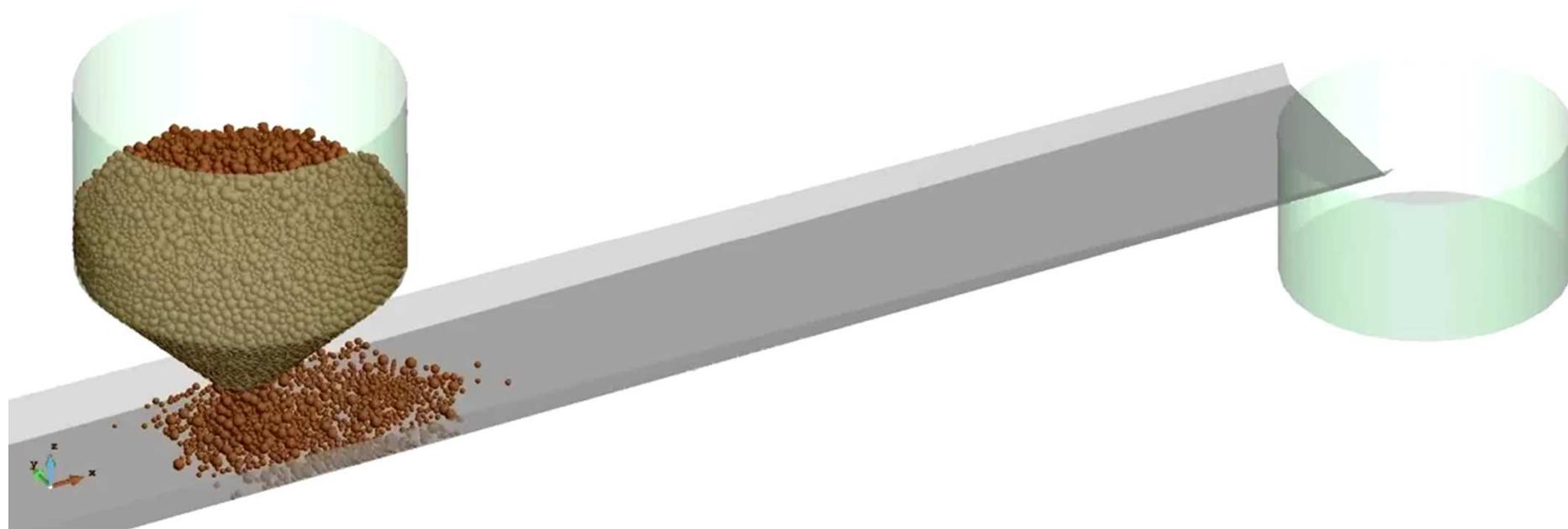
### -Silos



## Exemples

-Silos

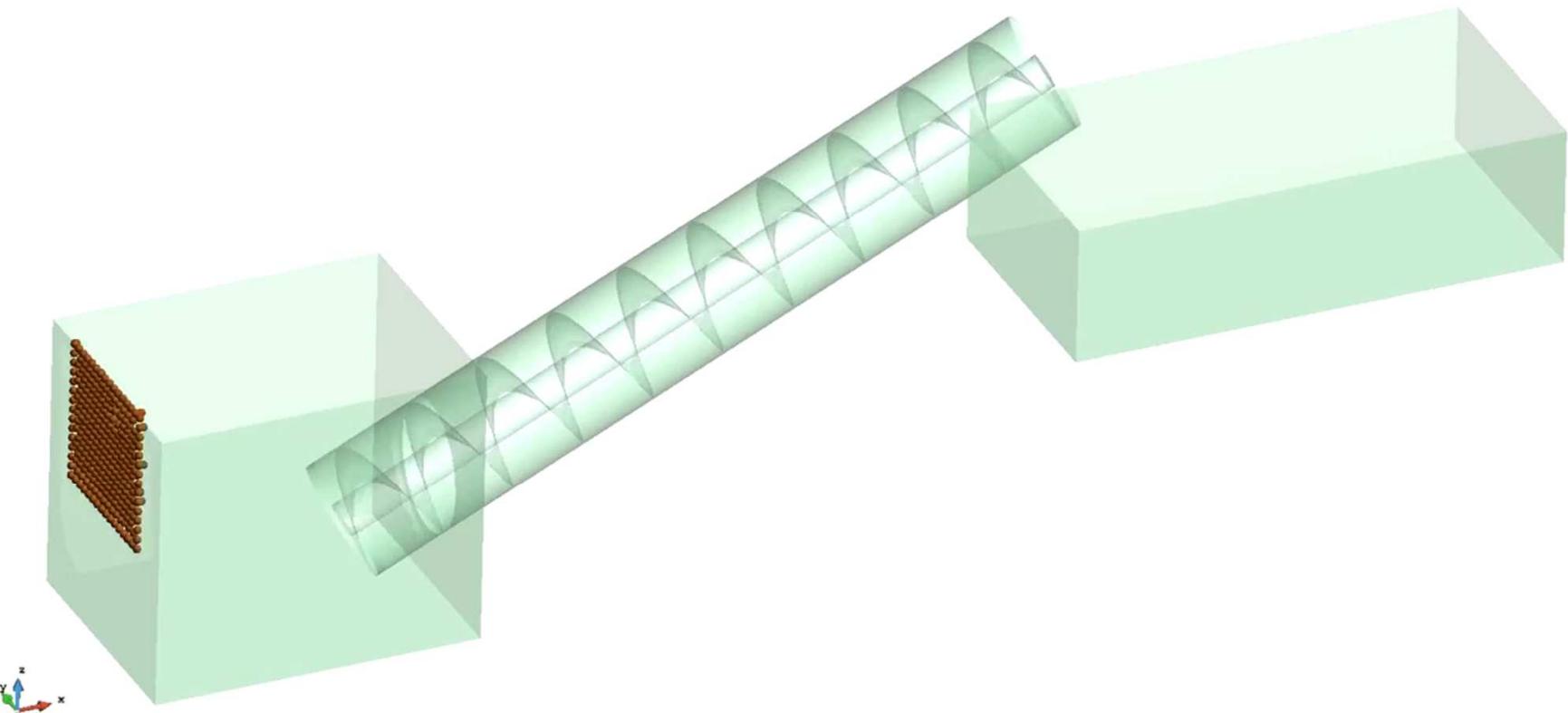
-Convoyage



## Exemples

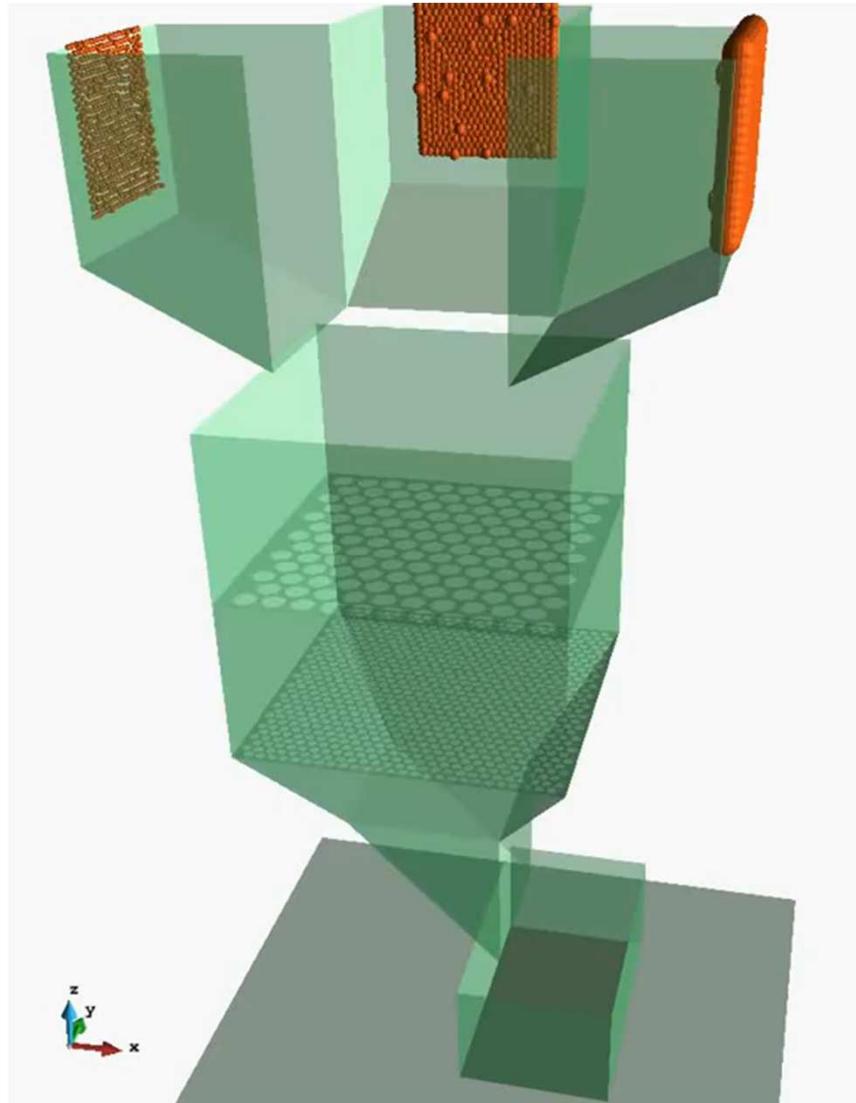
-Silos

-Convoyage



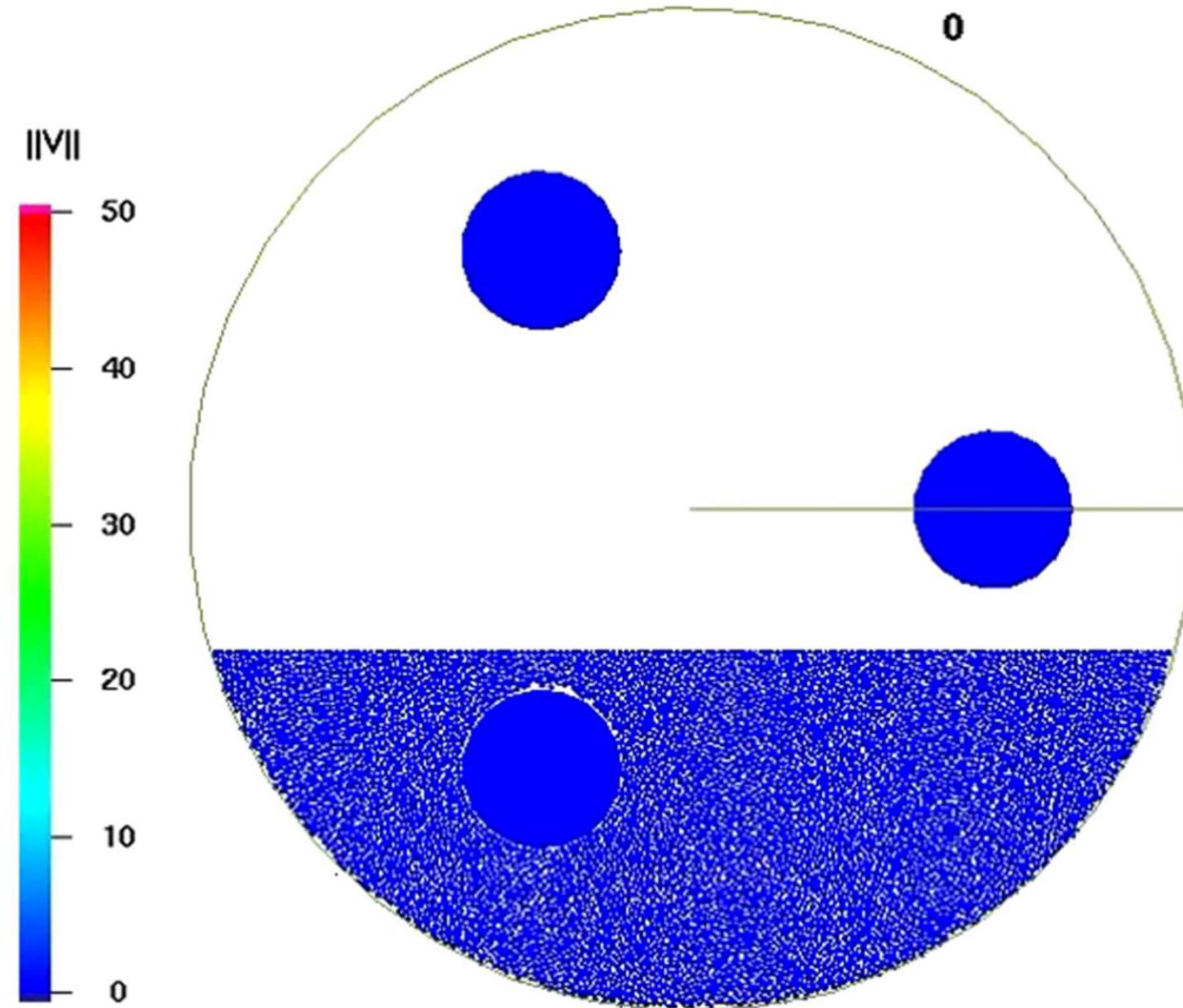
## Exemples

- Silos
- Convoyage
- Tamisage



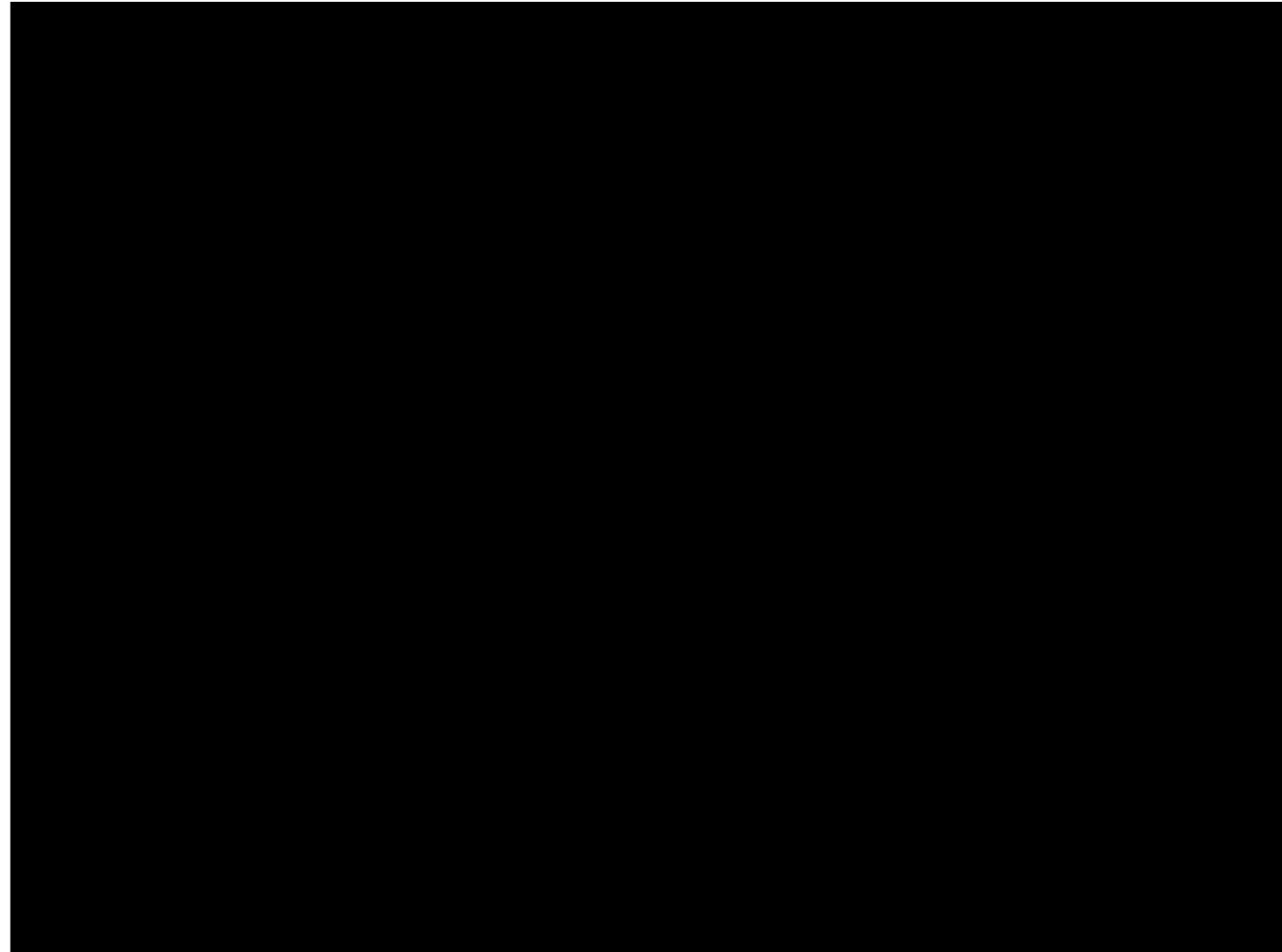
## Exemples

- Silos
- Convoyage
- Tamisage
- Broyage



## Exemples

- Silos
- Convoyage
- Tamisage
- Broyage
- Ségrégation



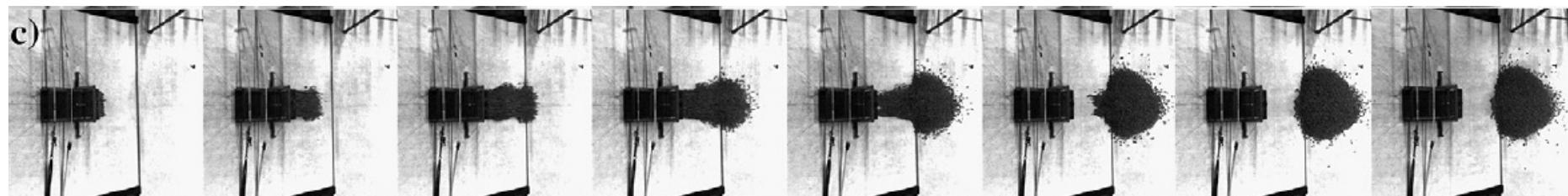
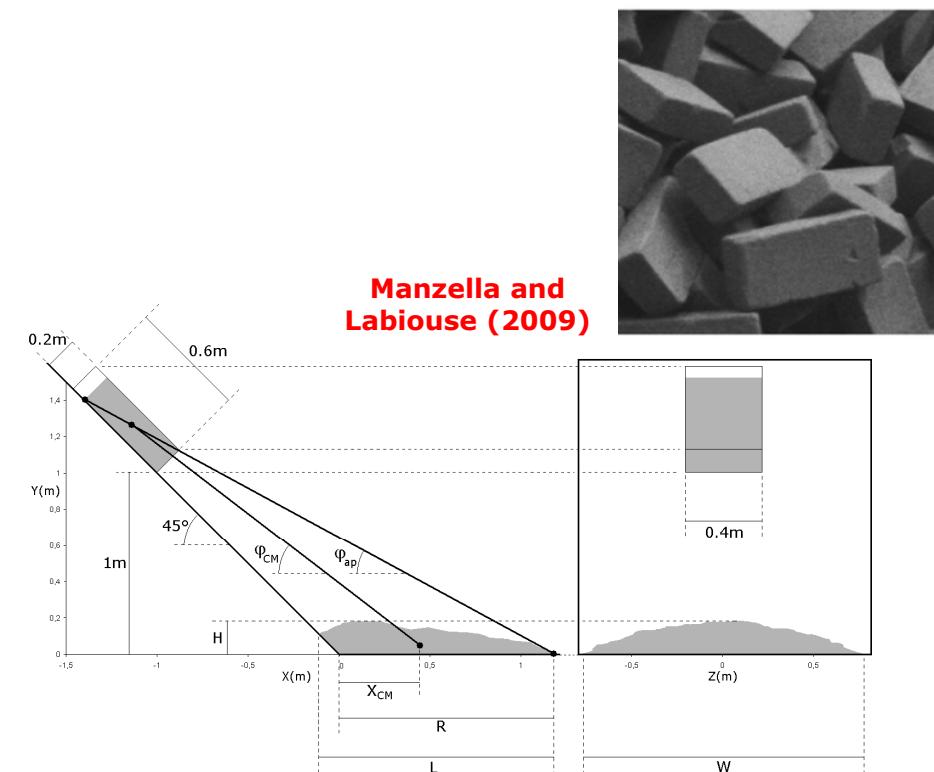


## Mécanique des matériaux granulaires

### Exemple détaillé

## Exemple détaillé

Lors d'une étude récente, on a souhaité savoir si la modélisation discrète était capable de reproduire des résultats expérimentaux d'avalanches rocheuses reproduites en laboratoire.

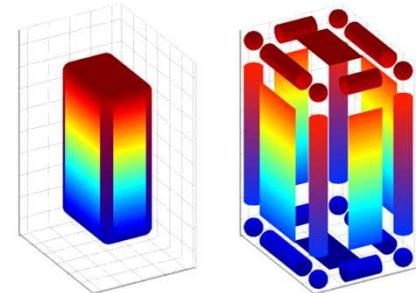


## Exemple détaillé

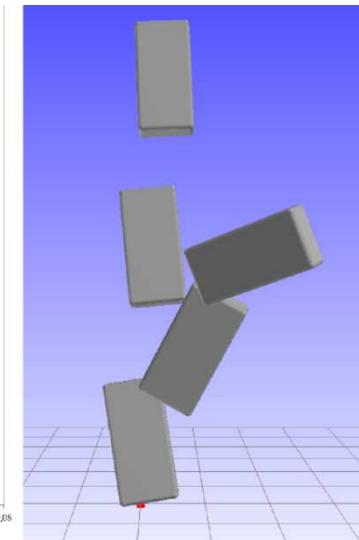
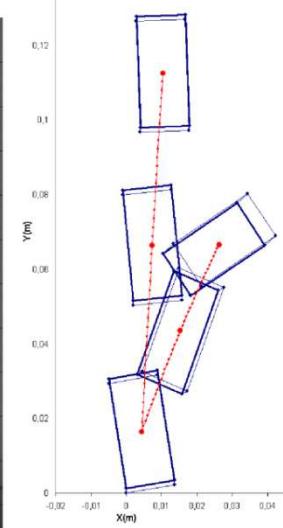
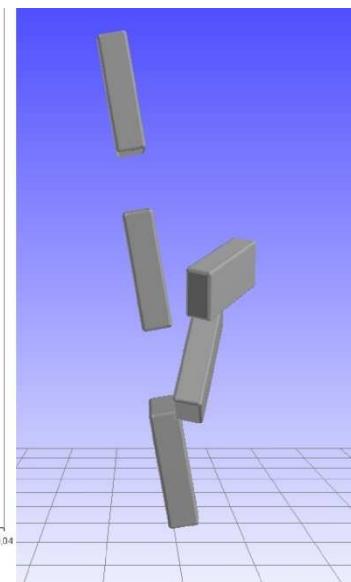
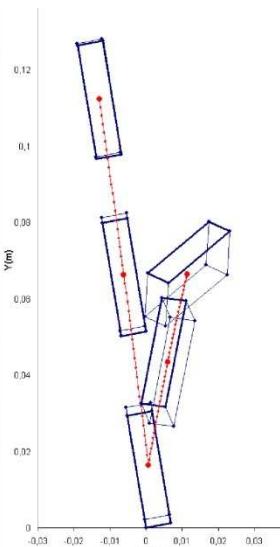
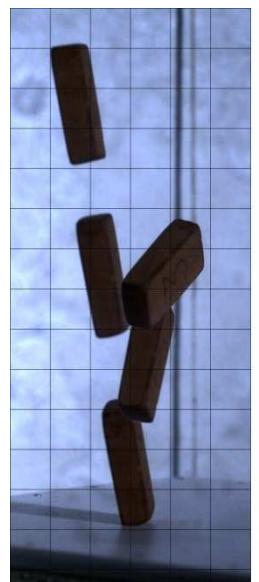
-> Réalisation d'essais d'impact individuels, filmés par deux caméras rapides.



## Exemple détaillé

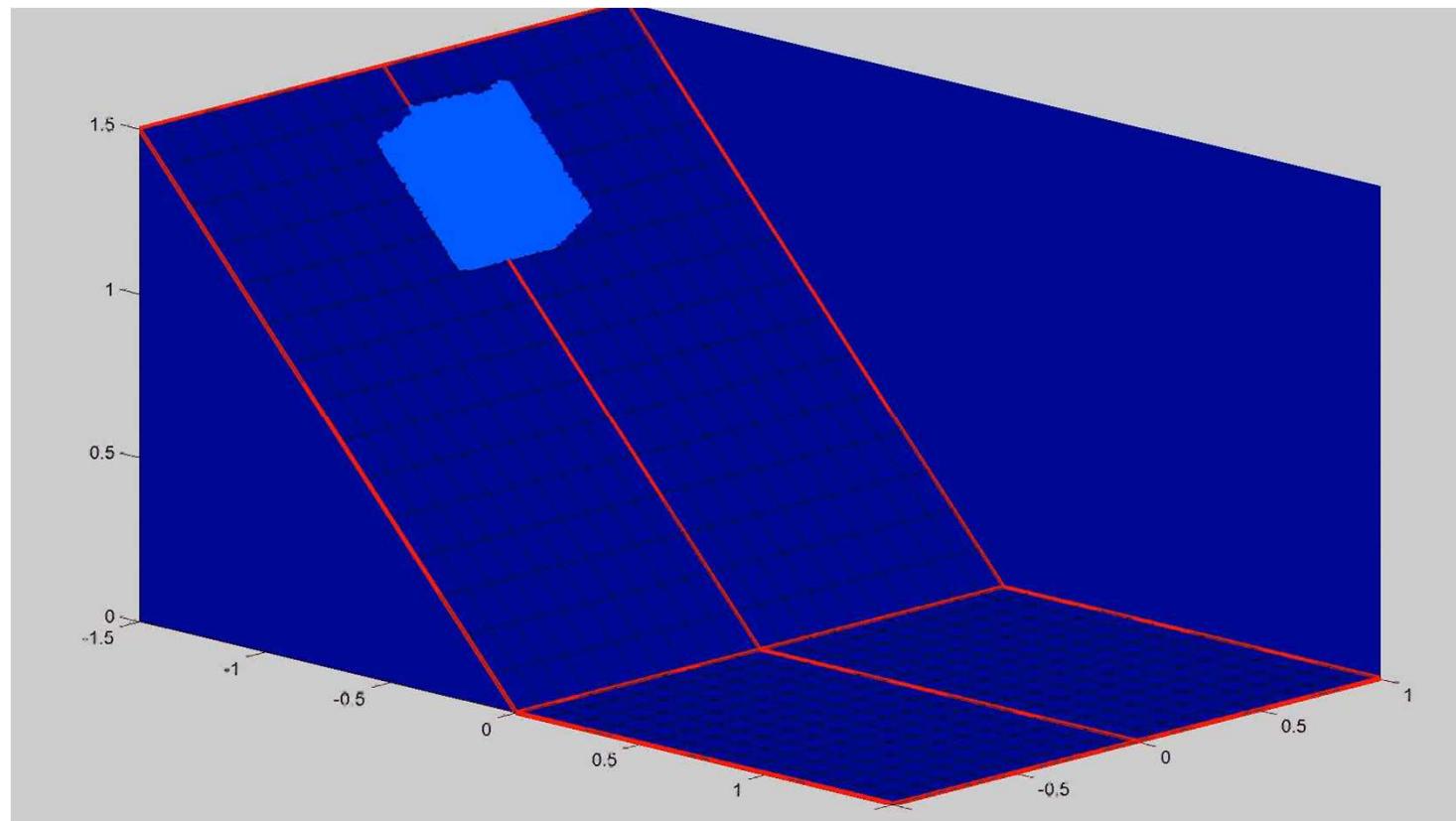


-> Calibration des lois de contact sur les cinématiques de rebonds, avec une modélisation des briques par sphéropolyèdres.



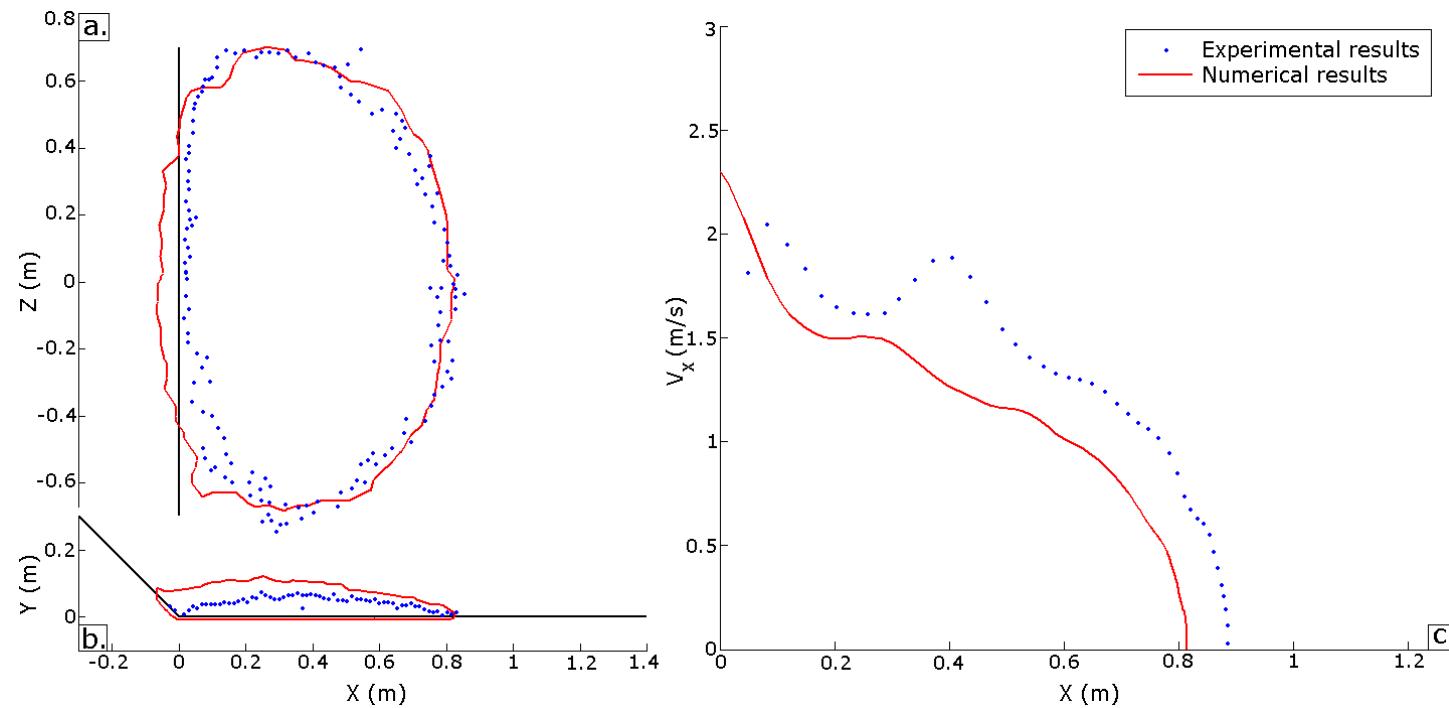
## Exemple détaillé

-> Introduction de ces paramètres de contact dans une simulation de l'évènement complet.



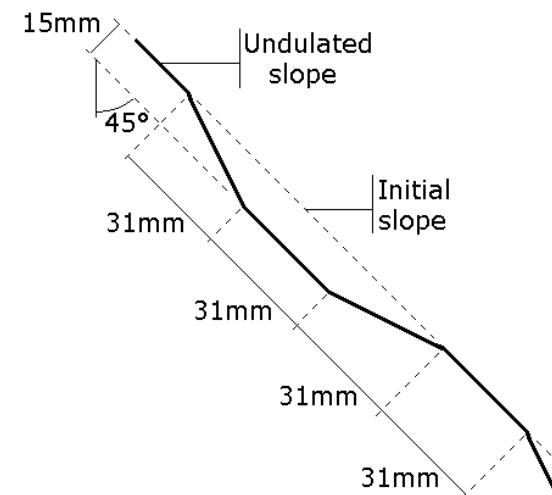
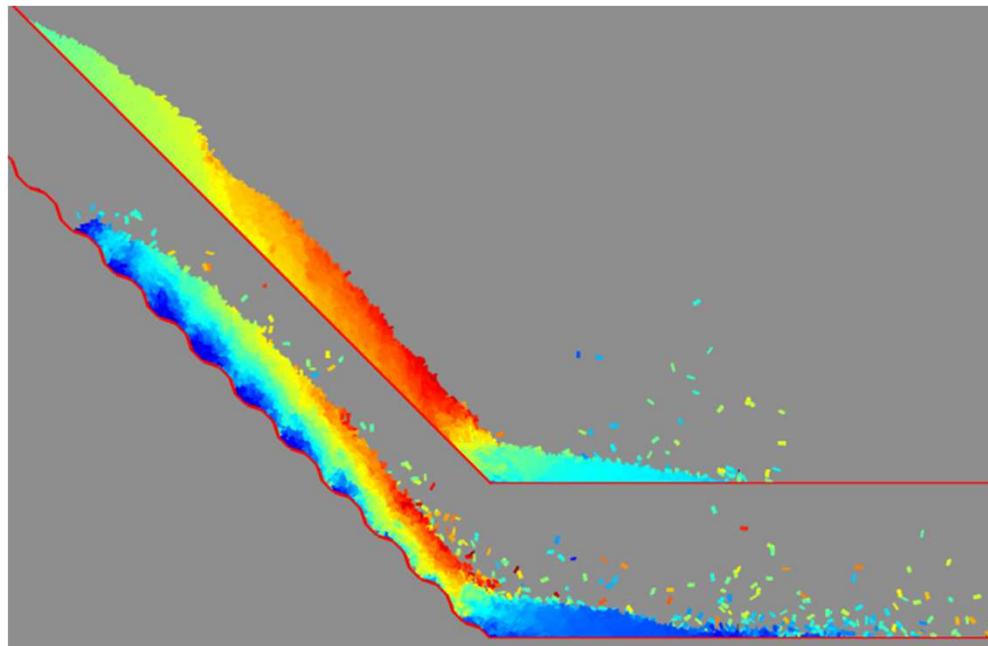
## Exemple détaillé

-> Validation du modèle par comparaison avec les résultats expérimentaux.



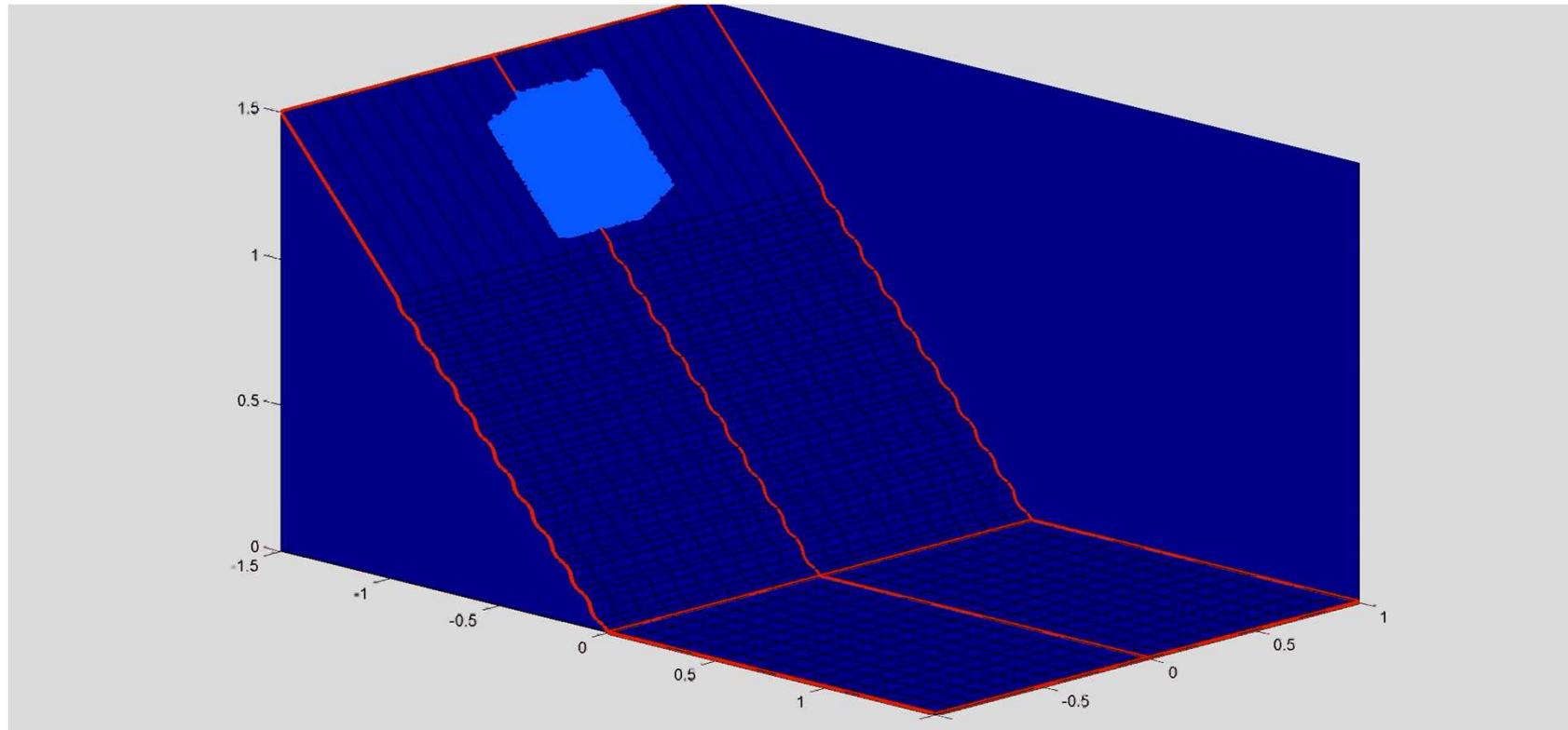
## Exemple détaillé

-> Etude paramétrique sur pentes lisses et rugueuses.



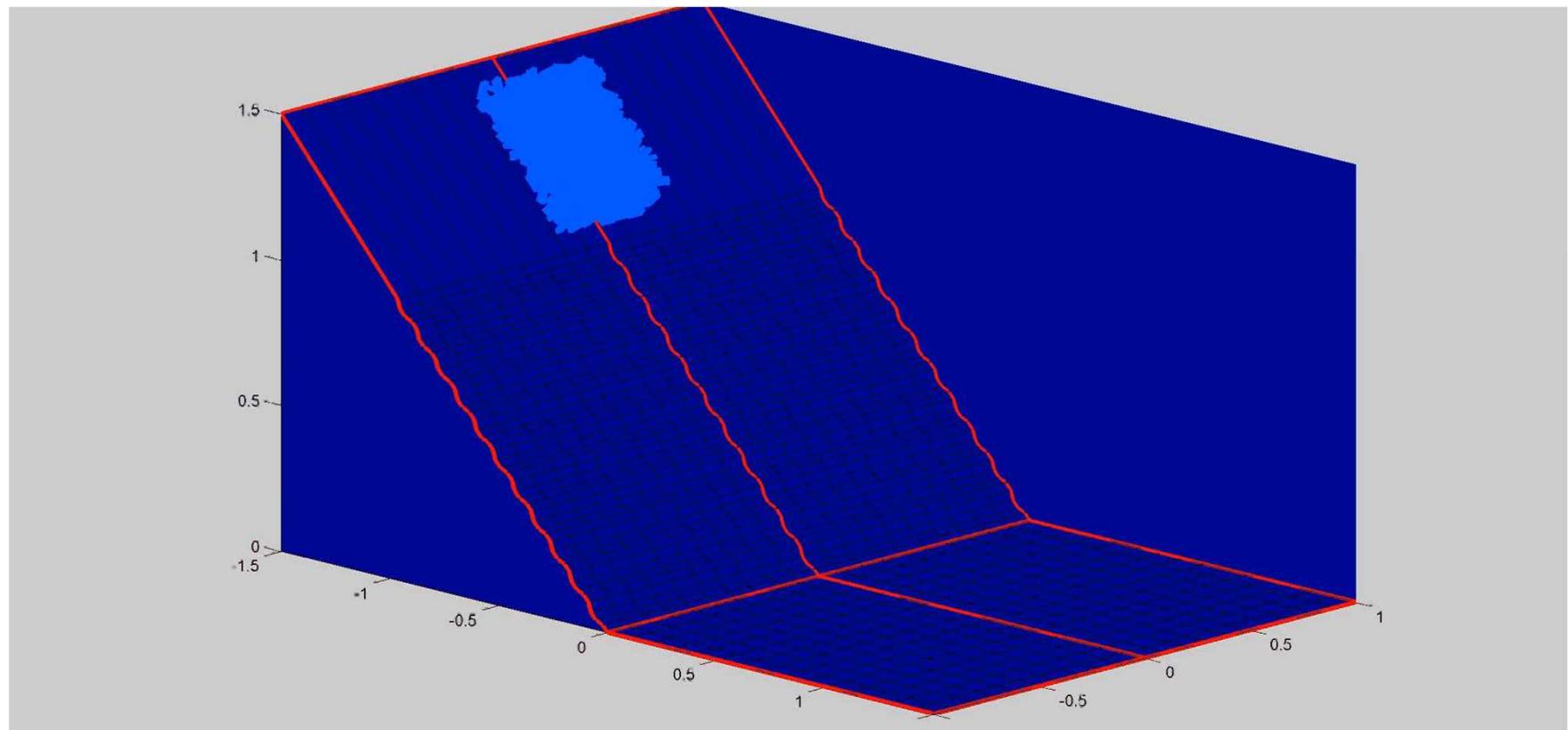
## Exemple détaillé

-> Mise en évidence de comportements caractéristiques : écoulements cisaillés.



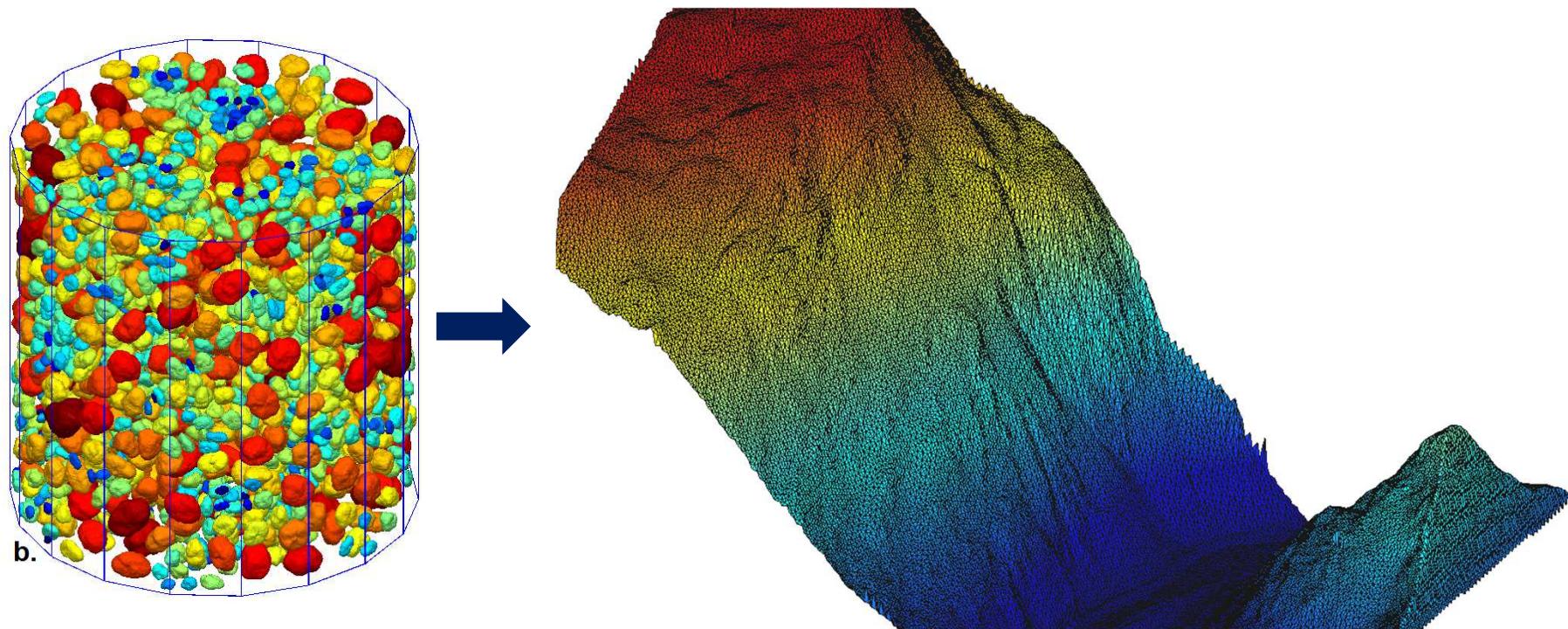
## Exemple détaillé

-> Mise en évidence de comportements caractéristiques : écoulements collisionnels.



## Exemple détaillé

-> Prochaines étapes : blocs réalistes sur pentes réalistes.





**Merci de votre attention**

**Guilhem MOLLON**

**P2I7 2017-2018**