

# Simulation DEM d'un matériau élastoviscoplastique

M. Gado<sup>1</sup>, J-L. Charles<sup>2</sup>, I. Iordanoff<sup>1 2</sup>, D. Coupard<sup>2</sup>

<sup>1</sup> I2M-Bordeaux, Université de Bordeaux, moubarak.gado@u-bordeaux.fr

<sup>2</sup> I2M-Bordeaux, Arts et Métiers ParisTech, {jean-luc.charles, ivan.iordanoff, dominique.coupard }@ensam.eu

**Résumé** — La méthode par éléments discrets (DEM), originellement utilisée pour étudier les matériaux granulaires, permet d'aborder des problèmes pour lesquels les modèles basés sur la mécanique des milieux continus sont peu adaptés. Ainsi, plusieurs études ont été menées pour modéliser des matériaux continus avec la DEM. Cependant, l'une des difficultés est le choix de lois d'interactions pour retrouver un comportement macroscopique satisfaisant. La méthode décrite est basée sur des forces d'interactions dérivant de potentiels et permet de simuler le comportement de matériaux élastoviscoplastiques.

**Mots clés** — méthode des éléments discrets, elastoviscoplasticité, matériau continu

## 1 Introduction

Parmi les méthodes numériques récemment développées, nombreuses sont celles qui concernent des échelles microscopiques, voire nanoscopiques. Cependant, à cette échelle, l'hypothèse de continuité de la matière n'est plus valable et il est alors nécessaire de prendre en compte dans le comportement d'un matériau, son comportement local. Les modèles de dynamique moléculaire permettent de prendre en compte la discontinuité de la matière à l'échelle nanoscopique mais le passage de cette échelle à l'échelle de la mécanique qui permet de simuler le comportement d'une pièce ou d'un procédé n'est pas possible avec les moyens de calcul actuels. Une des solutions consiste donc à bâtir un modèle mésoscopique qui prend en compte un grand nombre de discontinuité, mais à une échelle qui permette de simuler ensuite un volume compatible avec une étude mécanique. Les modèles par éléments discrets, historiquement développés pour modéliser les matériaux granulaires[1], s'inscrivent dans cette optique. Ils permettent d'aborder de nombreux problèmes tels que la multi-fissuration lors d'impact, l'usure et la tribologie pour lesquels les modèles basés sur la mécanique des milieux continus sont peu adaptés[2, 3]. Depuis quelques années, plusieurs études ont été menées afin d'utiliser la méthode des éléments discrets pour la simulation de matériaux continus[4, 5]. Cependant, ces études sont plus axées sur l'étude de matériaux fragiles[6, 7]. Des travaux antérieurs ont permis de montrer que la méthode pouvait être une alternative pour la simulation du comportement thermomécanique soumis à une sollicitation dynamique (impacteur ou outil dans le cadre du FSW ou de l'usinage)[8, 9]. Les travaux présentés ici visent à apporter une contribution pour la modélisation d'un continuum élastoviscoplastique avec la méthode des éléments discrets. L'interaction entre les éléments discrets est inspirée des lois potentiels développées dans le cadre de la dynamique moléculaire. À terme, les travaux visent la mise en place d'un modèle par éléments discrets du comportement thermomécanique d'un alliage d'aluminium lorsqu'il est soumis à des conditions de grandes déformation et/ou grandes vitesses de déformation (cas d'un procédé tel que le soudage par friction malaxage ou FSW).

## 2 Description du modèle

### 2.1 Forces exercées sur un système de particules discrètes - Loi de comportement

La méthode des éléments discrets est une méthode où, à la différence des méthodes continues, la loi de comportement est définie à l'échelle microscopique (échelle des éléments discrets). Ainsi pour définir une loi de comportement, les forces d'interactions doivent être définies à l'échelle des éléments discrets.

Trois type de forces sont considérées :

— Les forces conservatives purement répulsives  $F^C$

- Les forces conservatives purement attractives  $F^A$
- Les forces dissipatives  $F^D$

Les forces considérées sont analogues à celles utilisées dans la méthode DPD(dissipative particle dynamics) où, un autre type de force, les forces stochastiques  $F^S$ , sont considérées en plus des forces conservatives répulsives et des forces dissipatives ( $F^C$  et  $F^D$ ) [10, 11]

Les forces conservatives  $F_{ij}^{Conservative}$  dérivent d'un potentiel  $\Phi_{ij}$  de type Lennard-Jones.

$$\mathbf{F}_{ij}^{Conservative} = \frac{mn\varepsilon}{(m-n)\delta_{eq}} \left[ \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{m+1} - \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{n+1} \right] \mathbf{u}, \delta > \delta_{eq} \quad (1)$$

$$\Phi_{ij}(\delta) = \varepsilon \left[ \left( \frac{n}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-m} - \left( \frac{m}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-n} \right] \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^{Conservative} \begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^A & , \delta \geq \delta_{eq} \\ \mathbf{F}_{ij}^C & , \delta \leq \delta_{eq} \\ \mathbf{F}_{ij}^A = \mathbf{F}_{ij}^C = 0 & , \delta = \delta_{eq} \end{cases} \quad (3)$$

- avec  $\delta$  distance entre les deux particules  $i$  et  $j$   
 $\delta_{eq}$  distance d'équilibre entre deux particules  
 $\varepsilon$  amplitude maximale du potentiel  
 $m$  exposant représentant la partie répulsive de la force  
 $n$  exposant représentant la partie attractive de la force  
 $\mathbf{u}$  le vecteur unitaire suivant la direction de l'interaction, dans le sens  $j$  vers  $i$

Les forces dissipatives sont exprimées comme suit :

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma(\mathbf{u} \cdot \Delta \mathbf{V}_{ij}) \mathbf{u} & , \delta \leq \delta_{lim} \\ \mathbf{F}_{ij}^D = 0 & , \delta > \delta_{lim} \end{cases} \quad (4)$$

- avec  $\mathbf{F}_{ij}^D$  la force dissipative  
 $\delta$  distance entre les deux particules  $i$  et  $j$   
 $\gamma$  coefficient caractérisant la viscosité de l'interaction  
 $\Delta \mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j$  avec  $\mathbf{V}_i$  et  $\mathbf{V}_j$  les vitesses respectives de  $i$  et  $j$   
 $\delta_{lim}$  distance maximale d'interaction  
 $\mathbf{u}$  le vecteur unitaire suivant la direction de l'interaction, dans le sens  $j$  vers  $i$

## 2.2 Distance d'équilibre

La distance d'équilibre  $\delta_{eq}$  ne dépend que de la géométrie de deux éléments discrets en contacts. Cette distance devrait être égale à la distance lorsque ces deux éléments présentent un seul point de contact(voir figure 1). Cependant, en pratique, lors de la construction d'un domaine discret, tous les éléments discrets ne sont pas parfaitement en contact. Ils sont donc toujours très légèrement interpénétrés ou espacés. En conséquence, définir la distance d'équilibre comme  $\delta_{eq} = R_i + R_j$  implique l'existence de forces non nulles si bien que le domaine initial est instable. Pour palier à ce problème de stabilité du domaine initiale, une autre approche a été utilisée pour la définition de la distance d'équilibre : au début de la simulation, pour chaque élément discret  $j$ , une zone initiale naturelle d'interaction  $Z_j$  est définie. Pour chaque éléments discrets  $k$  contenu dans  $Z_j$ , la paire d'interaction  $\{ED_j, ED_k\}$  est sauvegardée, et la distance d'équilibre entre  $j$  et  $k$  est définie comme étant la distance initiale entre  $j$  et  $k$  juste après la construction du domaine discret ( $\delta_{eq} = O_j O_k$ ). Cela permet d'assurer un système stable au tout début d'une simulation. Au cours d'une simulation, pour toute nouvelle interaction créée entre l'élément discrets  $j$  et un nouvel élément discret  $m$  n'appartenant pas à  $Z_j$ , la distance d'équilibre est définie comme étant  $R_j + R_m$  ( $\delta_{eq} = R_j + R_m$ ).

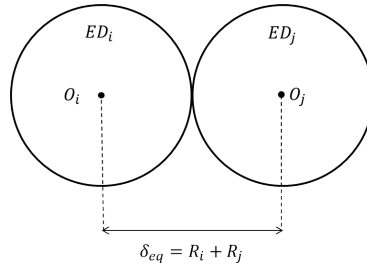


FIGURE 1 – Éléments discrets en équilibre parfait

### 2.3 Distance maximale d'interaction entre deux éléments discrets

Pour obtenir des temps de calcul réalistes, il est nécessaire d'introduire une distance maximale d'interaction entre deux éléments discrets. Si la distance entre deux éléments discrets est supérieure, ils n'interagissent pas. Cette distance, notée  $\delta_{lim}$ , sera fonction du rayon des éléments discrets en interaction :

$$\delta_{lim} = \alpha(R_i + R_j)$$

où  $\alpha$  est un paramètre supérieur ou égal à deux ( $\alpha \geq 2$ )

### 2.4 Calcul du pas de temps

Lors des calculs DEM, une étape importante est le choix du pas de temps d'intégration, car le schéma d'intégration utilisé est un schéma explicite, caractérisé par un pas de temps critique  $\Delta t_{critique}$ .

De manière générale, ce pas de temps critique  $\Delta t_{critique}$  est défini selon la relation :

$$\Delta t_{critique} \propto \sqrt{M_{ij}/K_{ij}} \quad (5)$$

avec  $K$  la raideur équivalente de l'interaction entre deux particules  $i$  et  $j$   
 $M_{ij}$  masse équivalente des particules  $i$  et  $j$

Dans le cas de la formulation proposée pour les forces conservatives, la raideur s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned} K(\delta) &= \frac{dF}{d\delta} = -\frac{d^2\Phi}{d\delta^2} \\ &= -\frac{\varepsilon mn}{(m-n)\delta^2} \left[ (m+1) \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^m - (n+1) \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^n \right] \end{aligned}$$

Ainsi, la raideur varie nettement en fonction de la distance entre les deux éléments discrets. Par exemple, dès lors que deux éléments discrets sont en répulsion, la variation de la raideur s'effectue en puissance  $m$ , et tend vers l'infini lorsque les éléments discrets se rapprochent. Comme la raideur dépend de la distance entre les éléments discrets, une valeur d'interpénétration maximale  $\delta_{ij}^{inter}$  et donc une raideur maximale est définie. Une valeur d'interpénétration maximale  $\delta_{ij}^{interMax}$  peut être définie en fonction d'un coefficient  $\alpha^{interMax}$  et des rayons  $R_i$  et  $R_j$  des éléments discrets en interaction telle que :

$$\delta_{ij}^{interMax} = \alpha^{interMax}(R_i + R_j)$$

avec  $\alpha^{inter}$  un coefficient  $\in [0,1[$   
 $\delta_{ij}^{interMax}$  interpénétration maximale entre deux éléments discrets

Par conséquent, la raideur maximale d'interaction  $K^{max}$  est :

$$K^{max} = K(\delta_{min}) \quad (6)$$

avec  $\delta_{min} = R_i + R_j - \delta_{ij}^{interMax}$  distance minimum autorisée Ainsi pour une une interaction entre

deux éléments discrets  $ED_i$  et  $ED_j$ , le pas de temps critique est :

$$\Delta t_{ij,critique} \propto \min \left( \sqrt{M_i/K_{ij}^{max}}, \sqrt{M_j/K_{ij}^{max}} \right) \quad (7)$$

Le pas de temps critique du calcul est donc le plus petit pas de temps de toutes les interactions du domaine discret.

En pratique, la valeur du coefficient  $\delta_{ij}^{interMax}$  et donc du pas de temps est fixé a priori, en supposant une limite d'interpénétration pour chaque paire d'éléments discrets. Pour les calculs ayant conduits aux résultats exposés par la suite, le pas de temps a été déterminé en supposant un coefficient  $\delta_{ij}^{interMax} = 0.3$ , autrement dit, que les éléments discrets ne pouvaient pas s'interpénétrer de plus de 30%.

## 2.5 Loi de comportement à seuil

Afin de prendre en compte un comportement différent entre 2 éléments discrets en fonction d'une force d'interaction seuil ou d'une distance seuil (par exemple une partie où les déformations sont élastiques réversible et une partie où elles sont irréversible), les forces conservatives peuvent dériver de deux types de potentiels différents. Ainsi, deux forces  $F^I$  et  $F^{II}$  peuvent être utilisées :

$$F_{ij} \begin{cases} F_{ij}^I(\delta) = F_{\epsilon_1, m_1, n_1}(\delta) & , si \ \xi = \frac{|\delta - \delta_{eq}|}{\delta_{eq}} \leq \xi_s \\ F_{ij}^{II}(\delta) = F_{\epsilon_2, m_2, n_2}(\delta - \delta_s + \delta_{eq}) + F^I(\delta_s) & , si \ \xi = \frac{|\delta - \delta_{eq}|}{\delta_{eq}} > \xi_s \end{cases} \quad (8)$$

où  $\xi_s$  représente la déformation seuil à partir de laquelle s'effectue le changement de la force d'interaction et la distance seuil  $\delta_s \begin{cases} (1 + \xi_s) \delta_{eq} & , si \ \delta \geq \delta_{eq} \\ (1 - \xi_s) \delta_{eq} & , si \ \delta < \delta_{eq} \end{cases}$

Il est à noter que pour la forme de potentiel choisi, il existe une partie linéaire, notamment lorsque la distance entre 2 particules tend vers la distance d'équilibre. De ce fait, jusqu'à certaines valeurs de  $\xi$ , la force  $F^I$  est linéairement dépendante (quasiment) de la distance. Ainsi, avec deux lois qui sont basées sur la même formulation, un comportement linéaire pour la première et non linéaire pour la seconde peut être obtenu.

Des simulations d'essais de traction uniaxiale ont été effectuées numériquement et montrent que ce type de loi permet de représenter un comportement macroscopique émergent élastique puis plastique (voir figure 3). Le comportement macroscopique obtenu avec une éprouvette cylindrique avec 500 éléments discrets, de longueur 0.05cm et de rayon 0.02cm est illustré sur la figure 3. Pour ce cas de simulation, les paramètres ont été choisis pour obtenir un module de Young qui soit du même ordre de grandeur que les matériaux métalliques. Pour les potentiels de types Lennard-Jones, à l'échelle atomique, les exposants 12 et 6 sont ceux généralement utilisés respectivement pour les paramètres  $m$  et  $n$ . Cependant, l'échelle considérée ici étant beaucoup plus grande (mésoscopique ou microscopique), les exposants représentant les forces attractives et répulsives seront supposés beaucoup plus faibles. En gardant de plus un ratio  $m/n = 2$ , les couples de paramètres  $(m, n)$  doivent être (8,4), (6,3), (4,2) ou (2,1). Le couple  $(m, n)$  choisi pour les résultats présentés ici est (8,4). Concernant la force  $F^{II}$ , le paramètre  $\epsilon_2$  est choisi en fonction de  $\epsilon_1$  et de manière à représenter un écrouissage du même ordre de grandeur que les matériaux métallique. Les paramètres  $m_2$  et  $n_2$ , sont égaux à ceux de la Force  $F^I$ . Le paramètre  $\xi_s$  est choisi de manière à ce que la force  $F^I$  puisse être considérée linéaire et en tenant compte des paramètres  $\epsilon_1, m_1$  et  $n_1$ .

Pour le cas de simulation présenté ici, les paramètres utilisés pour définir les interactions microscopiques entre les éléments discrets sont résumés dans le tableau 1.

Sur les courbes de traction macroscopique obtenu (figure 3), le comportement émergent est linéaire puis non linéaire tout comme la loi d'interaction défini à l'échelle des éléments discrets (figure 2). Le premier changement de la force  $F^I$  à la force  $F^{II}$  à l'échelle des éléments discrets intervient aux alentours d'une déformation macroscopique  $\epsilon_{xx}$  de 0.001. La non-linéarité macroscopique émergente observée est due à la non-linéarité de la force  $F^{II}$  à l'échelle des éléments discrets mais aussi à l'augmentation du nombre d'éléments discrets passant d'une interaction par la force  $F^I$  à une interaction par la force  $F^{II}$

Il convient de mentionner que pour des essais quantitatifs, une calibration des forces  $F^I$  et  $F^{II}$  doit être effectuée par la suite.

TABLE 1 – Valeurs des paramètres utilisés pour essais de traction uniaxiale sans forces dissipatives

$\epsilon_1$	$m_1$	$n_1$	$\epsilon_2$	$m_2$	$n_2$	$\xi_s$	$\gamma$	$\alpha$
80	8	4	3	8	4	0.005	0	1.5

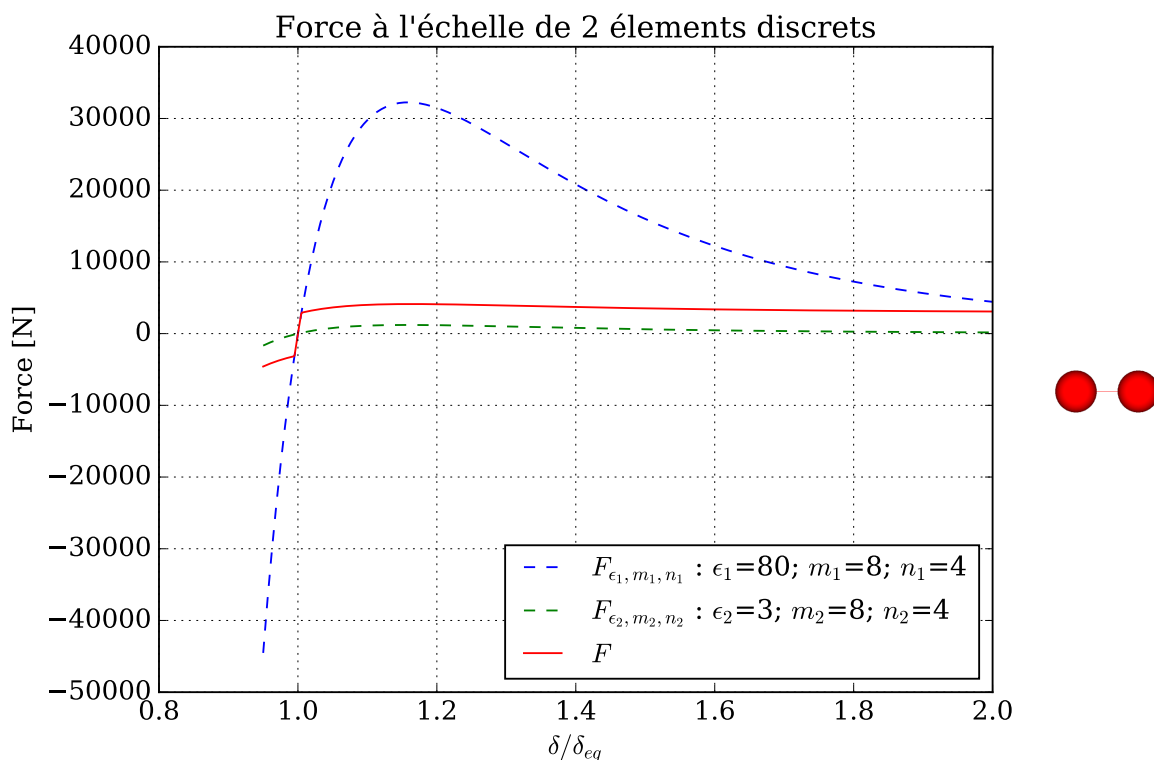


FIGURE 2 – Échelle de deux elements discrets : force à seuil

## 2.6 Effet de la viscosité

Afin de montrer l'effet des forces dissipatives et du coefficient de viscosité  $\eta$ , des forces dissipatives sont introduites lors d'essais numériques de traction uniaxiale et l'éprouvette sollicitée à différentes vitesses de déformation ( $1 \text{ s}^{-1}$  et  $10 \text{ s}^{-1}$ ). Les valeurs des paramètres utilisés sont indiquées dans le tableau 2. L'effet de la viscosité sur la courbe de traction est illustré sur la figure 4.

TABLE 2 – Valeurs des paramètres utilisés pour essais de traction uniaxiale avec forces dissipatives

$\epsilon_1$	$m_1$	$n_1$	$\epsilon_2$	$m_2$	$n_2$	$\xi_s$	$\gamma$	$\alpha$
80	8	4	3	8	4	0.005	1000	1.5

## 3 Conclusion et perspectives

Les résultats obtenus montrent que la méthode utilisée permet de représenter qualitativement avec la méthode des éléments discrets un comportement d'un matériau qui dépend de la vitesse de sollicitation

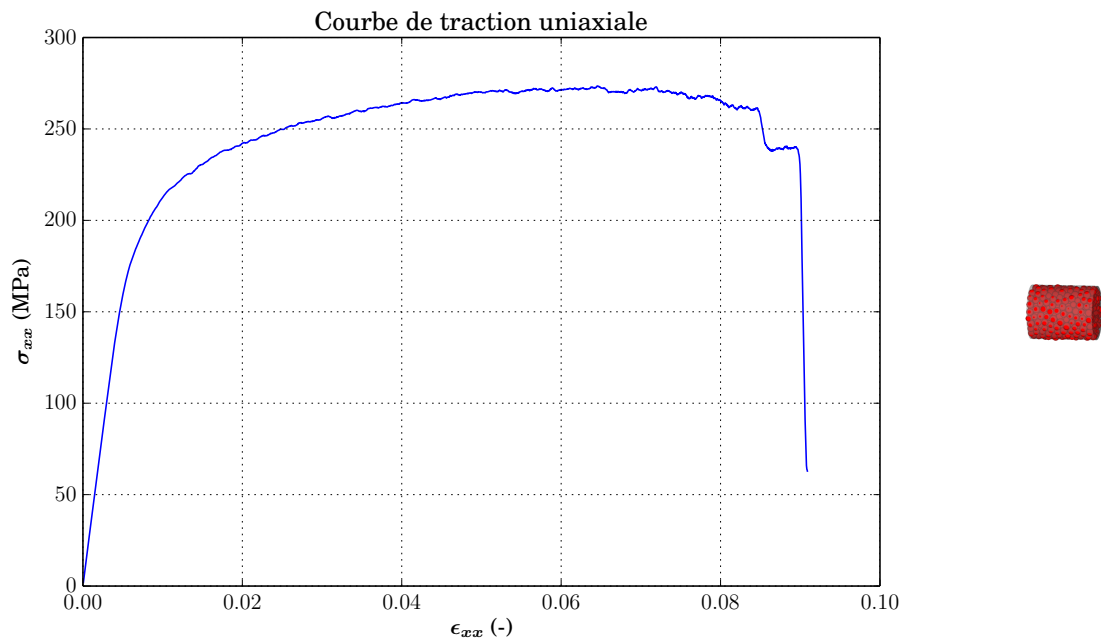


FIGURE 3 – Echelle macroscopique : Comportement macroscopique émergent

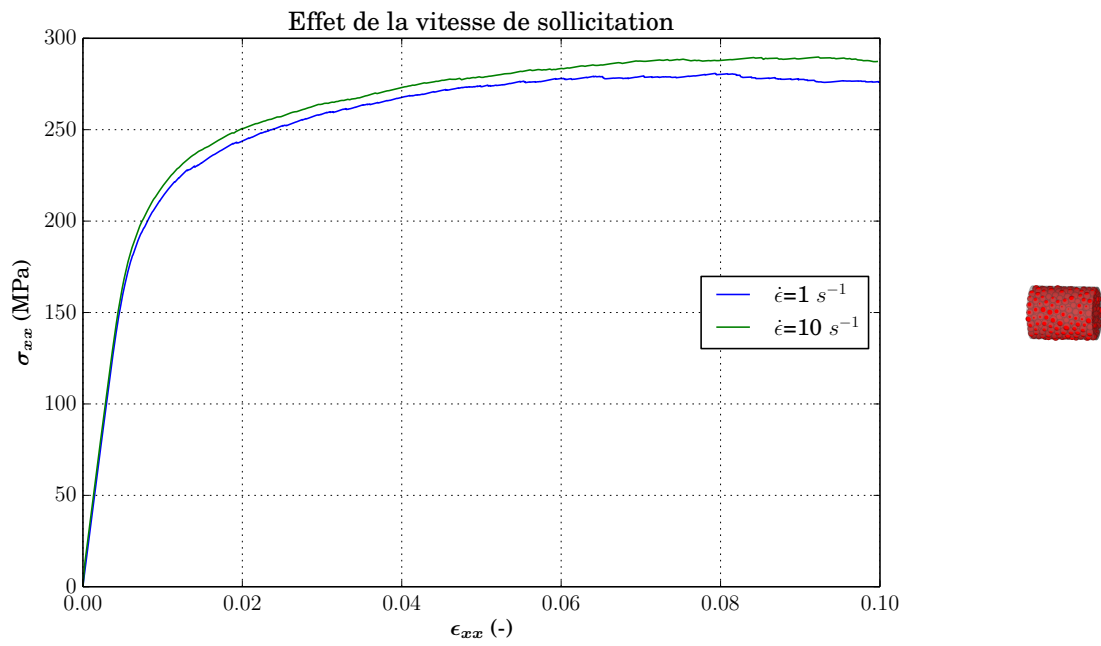


FIGURE 4 – Echelle macroscopique : Comportement macroscopique émergent

et qui change en fonction d'une contrainte seuil, comme dans le cas d'un comportement élastoviscoplas-tique. Cependant, des travaux supplémentaires sont nécessaires afin valider la méthode et de mettre en place une méthode de calibration rigoureuse.

## Références

- [1] Peter A. Cundall. A computer model for simulating progressive large-scale movements in blocky rock systems. In *Proceedings of the Symposio of the International Society of Rock Mechanics, Nancy 2*, page No. 8, 1971.
- [2] Damien André. *Modélisation par éléments discrets des phases d'ébauchage et de doucissage de la silice*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2012.
- [3] Mohamed Jebahi. *Discrete-continuum coupling method for simulation of laser\_induced damage in silica glass*. PhD thesis, 2013.
- [4] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean-luc Charles, and Jérôme Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213–216 :113 – 125, 2012.
- [5] Mohamed Jebahi, Frédéric Dau, Jean-Luc Charles, and Ivan Iordanoff. *Discrete-continuum Coupling Method to Simulate Highly Dynamic Multi-scale Problems : Simulation of Laser-induced Damage in Silica Glass*, volume 2. John Wiley & Sons, 2015.
- [6] Luc Scholtès and Frédéric-Victor Donzé. A {DEM} model for soft and hard rocks : Role of grain interlocking on strength. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61(2) :352 – 369, 2013.
- [7] Federico A. Tavarez and Michael E. Plesha. Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(4) :379–404, 2007.
- [8] Iñigo Terreros. *Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu : Vers la simulation du procédé FSW*. PhD thesis, 'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2013.
- [9] I. Terreros, I. Iordanoff, and J.L. Charles. Simulation of continuum heat conduction using {DEM} domains. *Computational Materials Science*, 69 :46 – 52, 2013.
- [10] P. J Hoogerbrugge and J. M. V. A Koelman. Simulating microscopic phenomena with dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, 19 :155–160, 1992.
- [11] Igor V. Pivkin, Bruce Caswell, and George Em Karniadakisa. Dissipative Particle Dynamics. In *Reviews in Computational Chemistry*, volume 27, pages 85–110. 2010.