



HAL
open science

Modélisations numériques discrètes de matériaux granulaires à partir d'une description Level Set des particules

Jérôme Duriez, Cédric Galusinski, Frederic Golay, Stéphane Bonelli

► **To cite this version:**

Jérôme Duriez, Cédric Galusinski, Frederic Golay, Stéphane Bonelli. Modélisations numériques discrètes de matériaux granulaires à partir d'une description Level Set des particules. 25e Congrès Français de Mécanique (CFM 2022), Aug 2022, Nantes, France. hal-03797466

HAL Id: hal-03797466

<https://hal.inrae.fr/hal-03797466>

Submitted on 4 Oct 2022

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

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

Modélisations numériques discrètes de matériaux granulaires à partir d'une description Level Set des particules

J. DURIEZ^a, C. GALUSINSKI^b, F. GOLAY^c, S. BONELLI^d

a. INRAE, Aix Marseille Univ, RECOVER, Aix-en-Provence, France, jerome.duriez@inrae.fr

b. IMATH, Université de Toulon, CS 60584 83041 Toulon Cedex 9, France,
cedric.galusinski@univ-tln.fr

c. IMATH, Université de Toulon, CS 60584 83041 Toulon Cedex 9, France, frederic.golay@univ-tln.fr

d. INRAE, Aix Marseille Univ, RECOVER, Aix-en-Provence, France, stephane.bonelli@inrae.fr

Résumé :

Afin de modéliser le comportement mécanique des matériaux granulaires à partir d'une Méthode aux Éléments Discrets (DEM), une description réaliste de la forme des particules est proposée en considérant, pour chacune d'entre elles, la fonction distance à la surface, suivant une approche "Level Set" (LS-DEM). Une méthode de Fast Marching permet d'obtenir sur une grille discrète une telle description pour toute surface. Implémentée au sein du code YADE, la polyvalence de la LS-DEM est illustrée sur des superellipsoïdes ou des agrégats rocheux caractérisés par scanner 3D. Nous illustrons également les importants coûts en mémoire informatique inhérents à la LS-DEM, ainsi que les coûts en temps de calcul qui sont un ou deux ordres de grandeurs plus élevés que lors d'une utilisation classique de particules sphériques. Une exécution parallèle OpenMP, ainsi que des possibles optimisations algorithmiques, permettent toutefois de réduire ces derniers à des valeurs acceptables.

Abstract :

In order to numerically simulate the mechanical behavior of granular materials using a Discrete Element Method (DEM), a realistic description of particle shape is proposed by considering, for each particle, the distance function to the surface, following a "Level Set" approach (LS-DEM). A Fast Marching Method enables one to obtain on a discrete grid such a description for any kind of surface. Implemented within the YADE code, the versatility of LS-DEM is illustrated on superellipsoids or rock aggregates characterized by 3D scanner. We also illustrate the significant computer memory costs inherent to LS-DEM, as well as the computational time costs which are one or two orders of magnitude higher than when using classical spherical particles. Adopting a parallel OpenMP execution as well as possible algorithmic optimizations allow however to maintain these costs to tractable quantities.

Mots clés : Level Set, Méthode aux Éléments Discrets (DEM), Forme

1 Introduction

Du fait de la nature discrète des matériaux granulaires, la Méthode aux Éléments Distincts (ou Discrets, DEM) constitue un choix naturel afin de modéliser numériquement leur comportement mécanique. Par essence, la DEM décrit en effet directement l'existence d'une collection de grains en interaction mécanique de contact et les phénomènes locaux (mouvements relatifs ou rotations des grains, perte ou création de contact) gouvernant le comportement mécanique émergeant à l'échelle de l'assemblage. L'obtention de prédictions satisfaisantes en DEM nécessite toutefois une prise en compte fidèle de la microstructure des matériaux réels. La forme des particules est en particulier un ingrédient important de cette microstructure comme le montre l'exemple du ballast ferroviaire, dont les particules doivent être anguleuses plutôt qu'arrondies. L'approximation de formes non-sphériques par des agrégats rigides de sphères, par exemple [1], est relativement aisée à mettre en œuvre mais induit par construction des arrondis locaux non-réalistes affectant potentiellement les résultats. L'utilisation de polyèdres représente une deuxième stratégie pouvant être efficace [2] malgré une habituelle restriction aux cas convexes. Dans le but d'atteindre la plus grande généralité possible, on présente à la suite de [3] une nouvelle description de la forme des particules basée sur la fonction distance à la surface et sa "Level Set" (LS) à 0. Les principes d'une telle description sont tout d'abord rappelés, puis divers exemples illustrent la précision, les coûts de calcul et la versatilité de la méthode, telle qu'implémentée au sein du code YADE [4, 5, 6].

2 Description LS-DEM d'une particule

La surface de toute particule peut être vue comme l'ensemble des points \vec{x} de l'espace annulant une fonction distance $\phi(\vec{x})$ qui renvoie la plus courte distance de \vec{x} à la particule. La fonction ϕ vérifie nécessairement l'équation différentielle suivante :

$$\|\vec{\nabla}\phi\| = 1 \quad (1)$$

En 1D par exemple, la distance à un point x_0 s'exprime par $\phi(x) = x - x_0$ et on retrouve bien $d\phi/dx = 1$. Considérant une approximation aux différences finies de $\|\vec{\nabla}\phi\|$ associée à une discrétisation de l'espace par une grille régulière, l'équation différentielle (1) induit la possibilité d'exprimer la valeur de ϕ en un point de grille, par exemple ϕ_i au point d'indice i en 1D, à partir des valeurs adjacentes, ϕ_{i-1} ou ϕ_{i+1} en 1D. Sur la base d'une condition aux limites pour ϕ sur un ensemble de points de grille, un champ discret pour ϕ peut alors être obtenu sur toute la grille grâce à une méthode de Fast Marching (FMM) [6, 7]. La valeur de ϕ peut ensuite être obtenue en tout point de l'espace par interpolation à partir des valeurs sur la grille. Par convention, ϕ est positive à l'extérieur de la particule et négative à l'intérieur. La grille G associée au champ discret de ϕ constitue le premier ingrédient d'une description de la forme en LS-DEM et permet de calculer les propriétés inertielles des éléments discrets, par exemple le volume V :

$$V = \int_G H(-\phi(\vec{x})) dV \quad (2)$$

où H est la fonction de Heaviside et l'intégrale de volume est approximée à partir des voxels de grille.

Afin de détecter le contact entre deux éléments discrets, un second ingrédient de la méthode intervient sous la forme d'un ensemble de points discrétisant la surface extérieure, appelés nœuds, et obtenus par "ray tracing" [5, 6]. Au sein du cycle de calcul DEM, un contact entre deux particules A et B peut alors être identifié en considérant les nœuds de A et le champ de distance à B. La Figure 1 illustre les

deux ingrédients de la description LS. Lors d’une simulation DEM, tous deux ne sont à calculer qu’une seule fois en tout début de simulation dans une configuration de référence. Lors d’une itération quelconque, la considération de transformations de corps rigides permet de relier configuration de référence et configuration actuelle, sans nécessité de mise à jour des nœuds ou du champ de distance.

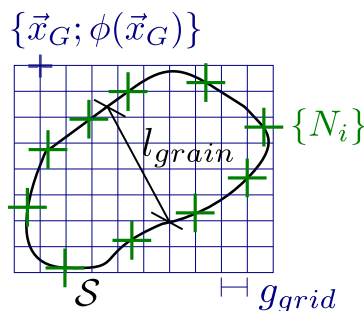


FIGURE 1 – Définition d’un élément discret LS-DEM : une grille régulière $\{\vec{x}_G\}$ et son champ de distance associé ϕ , en combinaison avec un ensemble de nœuds de surface $\{N_i\}$ (vue 2D par simplicité) [6]

3 Exemples illustrant la précision, les coûts de calcul et la versatilité de la LS-DEM

3.1 Cas idéal de particules sphériques

La précision de la LS-DEM dépend nécessairement de la résolution de la grille (qui gouverne la précision de la FMM et celle de l’interpolation) ainsi que du nombre et des positions des nœuds de surface. Cette précision a été analysée dans [5] en considérant des particules sphériques idéales, en comparant l’application de la LS-DEM à une telle forme avec l’utilisation d’une DEM classique. Pour le cas de la LS-DEM, le champ ϕ peut alors être défini analytiquement, plutôt que par FMM. Une compression “triaxiale” est alors appliquée à un échantillon initialement dense de 8000 particules : les axes (x, y, z) étant imposés comme principaux, un chargement axisymétrique est défini par une contrainte radiale constante $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = cste$ et un raccourcissement axial croissant $d\epsilon_{zz} = d\epsilon_1 > 0$ (avec les conventions de signe de la mécanique des sols).

La Figure 2 illustre alors l’influence sur la réponse, en termes de contrainte déviatorique $q = \sigma_{zz} - \sigma_{xx}$ et de déformation volumétrique $\epsilon_v = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$, de la résolution de la grille quantifiée par D/g_{grid} et du nombre de nœuds, N_{nod} . La précision de la LS-DEM, en comparaison avec la référence DEM, étant quantifiée par le rapport des maxima de q , une précision satisfaisante ($> 95\%$) est donc ici obtenue en utilisant de l’ordre de quelques milliers de nœuds de surface et quelques dizaines de mailles de grille par diamètre de particule. L’empreinte mémoire d’une simulation LS-DEM est alors augmentée de plusieurs ordres de grandeur, par exemple, de même que les temps de calcul (Figure 3). Les temps de calcul LS-DEM, dûs à la considération d’un grand nombre de nœuds de surface peuvent toutefois être diminués par environ vingt avec une exécution parallèle, OpenMP, sur une cinquantaine de coeurs CPU, alors que ce ne serait pas le cas en DEM [5]. Concernant les coûts en mémoire, ceux-ci sont majoritairement dûs à la résolution de la grille (Figure 3(a)) et au nombre de valeurs de distance à stocker mais pourraient être fortement réduits avec l’utilisation de grilles octree plutôt que régulières [8].

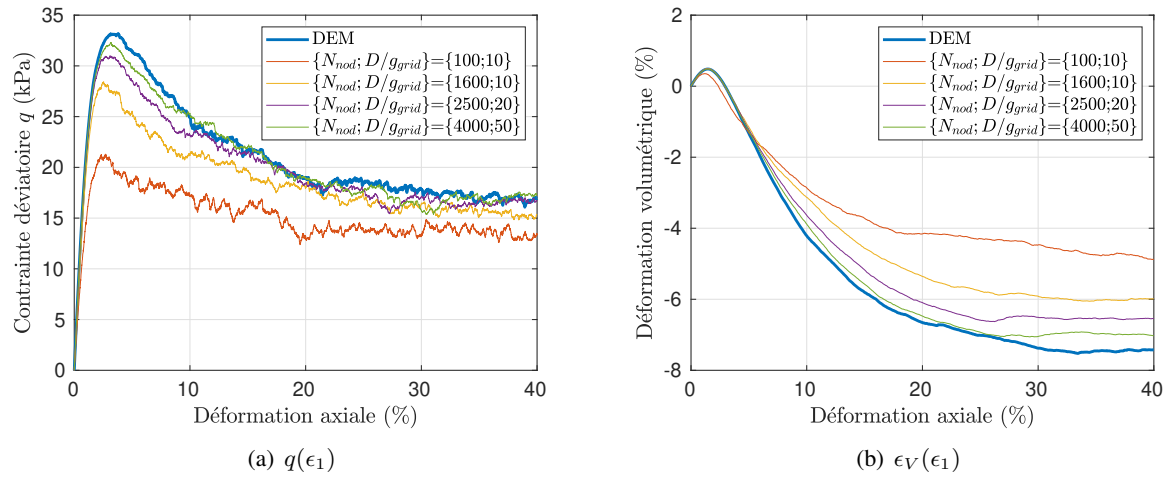


FIGURE 2 – Influence de la discrétisation LS-DEM sur la réponse macroscopique à une compression triaxiale d'un assemblage de particules sphériques, en comparaison avec une référence DEM

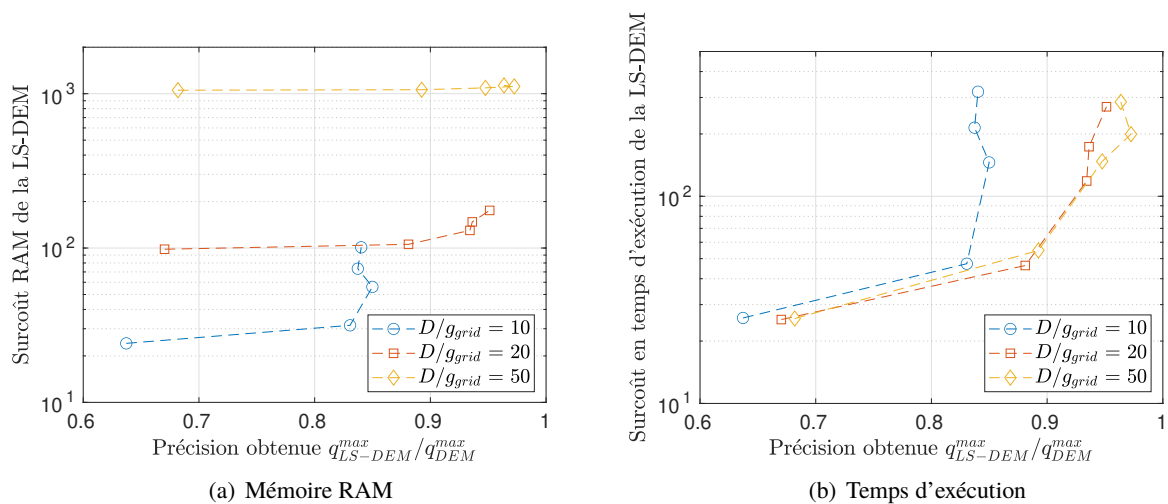


FIGURE 3 – Coûts de calcul en LS-DEM en fonction de la précision obtenue, relatifs aux coûts DEM. Chaque point correspond à une simulation LS-DEM utilisant un nombre de nœuds de surface N_{nod} variable, parmi $\{100;400;1600;2500;4000\}$, pour une certaine résolution de grille D/g_{grid} , induisant une précision et des coûts de calcul différents

3.2 Superellipsoïdes et comparaison avec l'utilisation de polyèdres

Comme illustré dans [6], l'approche LS-DEM s'applique également directement à la considération de superellipsoïdes, dont l'équation analytique généralise celle des ellipses, avec en particuliers 3 rayons (r_x, r_y, r_z) . La Figure 4 représente cinq choix possibles de superellipsoïdes. Ces dernières pourraient également être décrites via l'utilisation de polyèdres convexes [9], après une définition appropriée des sommets de chaque polyèdre (Figure 5). La Figure 6 illustre alors qu'une grille LS-DEM contenant au moins 10 ou 20 mailles dans chaque dimension d'une superellipsoïde, i.e. avec une résolution de grille $r_g = 2 \min(r_x, r_y, r_z)/g_{grid}$ supérieure à 10 ou 20, permet alors de décrire fidèlement les volumes V de telles particules, en comparaison avec leurs valeurs théoriques V^{th} , tandis que quelques centaines de sommets de polyèdres seraient nécessaires pour atteindre la même précision.

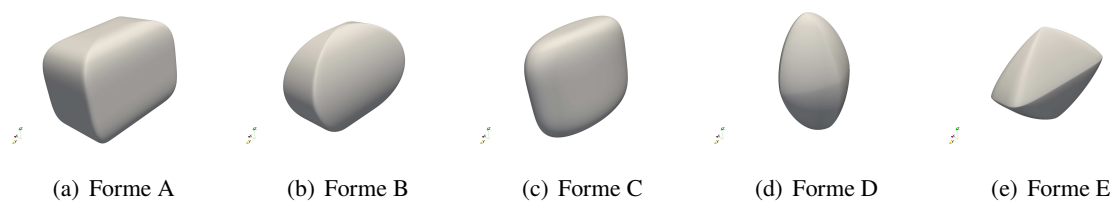


FIGURE 4 – Exemples de superellipsoïdes

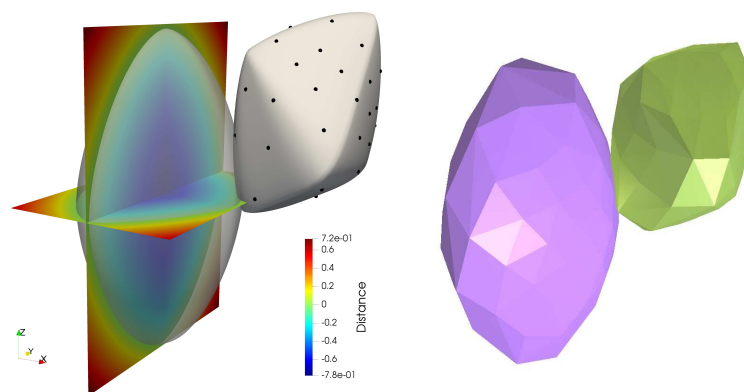


FIGURE 5 – Utilisations de la LS-DEM (à gauche, avec 51 nœuds de surface) ou d'une approche par polyèdres (à droite, avec 107 sommets par particule) pour décrire des superellipsoïdes [6]

Concernant la détection du contact, dont la complexité pour les polyèdres est justement fonction du nombre de sommets, la Figure 7 illustre l'importance des temps de calcul qui seraient obtenus en utilisant un tel nombre de sommets dans YADE et, en comparaison, l'efficacité de l'approche LS-DEM pour détecter le contact par une simple interrogation de la valeur de ϕ sur les nœuds de surface.

3.3 Agrégats rocheux naturels

La Figure 8 illustre finalement la possibilité de décrire en LS-DEM un agrégat possiblement non-convexe, après mesure de forme par scan 3D. Pour de telles particules, chaque nœud de surface d'une particule A en contact avec une autre particule B sera le siège d'une interaction mécanique et d'une force de contact, à l'opposé de la considération unique du nœud montrant la plus grande pénétration, telle qu'adoptée dans [5, 6] pour des cas convexes.

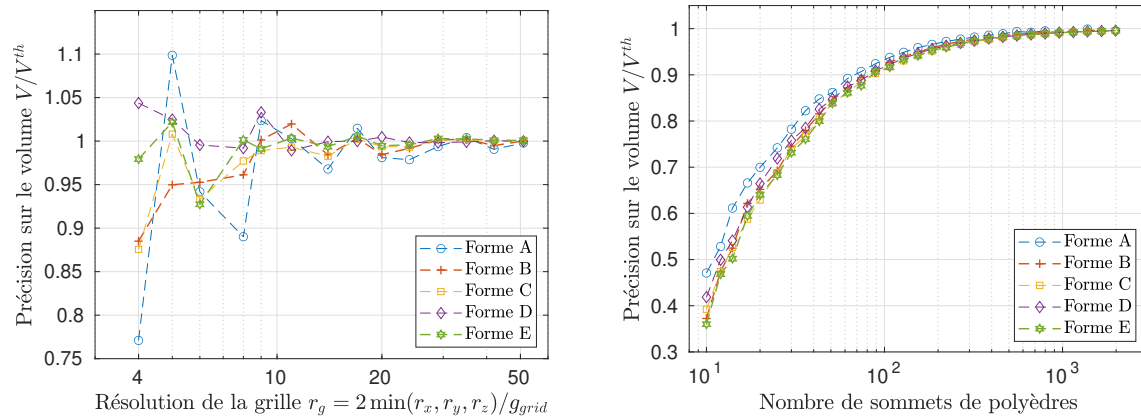


FIGURE 6 – Précision d’une approche LS-DEM (gauche) ou polyèdres (droite) pour la description du volume des superellipsoïdes de la Figure 4

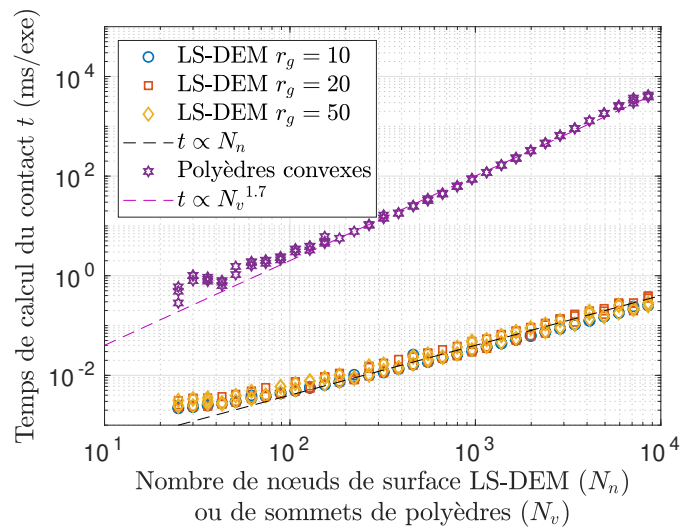


FIGURE 7 – Temps de calcul d’un contact entre deux superellipsoïdes (Figure 5) en LS-DEM ou avec l’utilisation de polyèdres, au sein d’une itération DEM

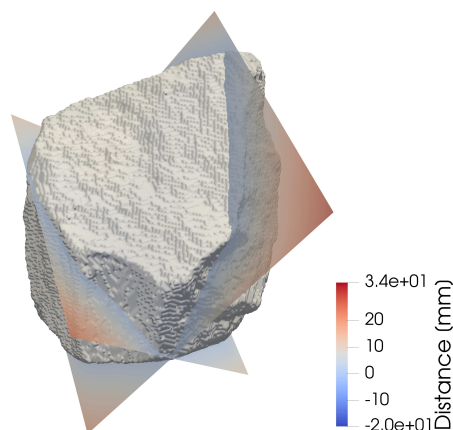


FIGURE 8 – Représentation LS-DEM (champ de distance) d’un agrégat rocheux mesuré par scan 3D

4 Conclusion

Une description générale des formes quelconques de particules d'un matériau granulaire est présentée à partir d'une fonction distance ϕ , exprimée de manière discrète sur une grille. En combinaison avec des nœuds discrétisant la surface extérieure, cette méthode est insérée dans le code DEM YADE, sous la forme d'une classe `LevelSet`. Bien qu'induisant des coûts en mémoire et en temps de calcul logiquement bien plus importants que la considération classique de sphères, elle semble constituer un choix judicieux pour décrire l'influence de caractères complexes de forme telles que la non-convexité, en comparaison à l'utilisation de polyèdres ou de clumps de sphères.

Références

- [1] T. Mede, G. Chambon, P. Hagenmuller, and F. Nicot, "A medial axis based method for irregular grain shape representation in DEM simulations," *Granular Matter*, vol. 20, no. 1, p. 16, 2018.
- [2] T. Mohamed, J. Duriez, G. Veylon, and L. Peyras, "DEM models using direct and indirect shape descriptions for Toyoura sand along monotonous loading paths," *Computers and Geotechnics*, vol. 142, p. 104551, 2022.
- [3] R. Kawamoto, E. Andò, G. Viggiani, and J. E. Andrade, "Level set discrete element method for three-dimensional computations with triaxial case study," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 91, pp. 1–13, 2016.
- [4] V. Smilauer *et al.*, *Yade Documentation 3rd ed.* The Yade Project, 2021. <http://yade-dem.org/doc/>.
- [5] J. Duriez and S. Bonelli, "Precision and computational costs of Level Set-Discrete Element Method (LS-DEM) with respect to DEM," *Computers and Geotechnics*, vol. 134, p. 104033, 2021.
- [6] J. Duriez and C. Galusinski, "A Level Set-Discrete Element Method in YADE for numerical, micro-scale, geomechanics with refined grain shapes," *Computers and Geosciences*, vol. 157, p. 104936, 2021.
- [7] J. Sethian, *Level set methods and fast marching methods*. Cambridge University Press, 1999.
- [8] J. Duriez and C. Galusinski, "Level set representation on octree for granular material with arbitrary grain shape," in *Proceedings Topical Problems of Fluid Mechanics 2020* (D. Šimurda and T. Bodnár, eds.), (Prague), pp. 64–71, 2020.
- [9] J. Eliáš, "Simulation of railway ballast using crushable polyhedral particles," *Powder Technology*, vol. 264, pp. 458 – 465, 2014.