

Proposition de sujet de doctorat

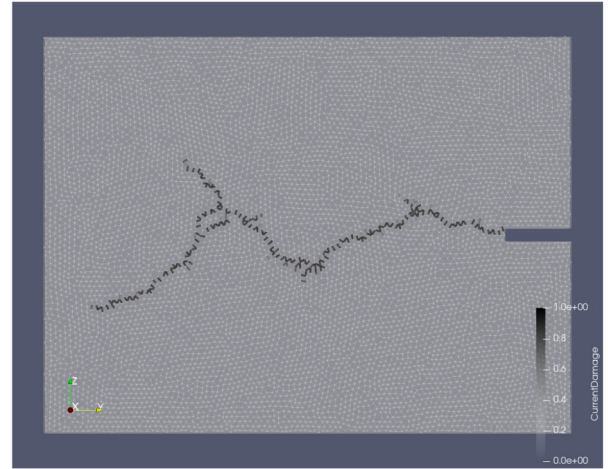
Simulation de la rupture de matériaux quasi-fragiles dans un contexte de détente post-compaction

application à la phase de décompression lors de la fabrication du comprimé pharmaceutique

Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux (I2M)

Contexte scientifique : la plupart des matériaux à base d'agrégats ou de poudre (béton, céramique, composites à renforts particules, etc.) présentent un comportement à rupture dit quasi-fragile. La modélisation de la propagation de fissure dans ce cadre est encore un verrou important et peut nécessiter de revisiter non seulement les modèles cohésifs concernés mais aussi les méthodes numériques utilisées pour les résoudre. Les simulations mettent en jeu des propagations complexes d'une ou plusieurs fissures pouvant entrer en interaction entre elles. L'exercice devient encore plus complexe lorsque des phénomènes irréversibles autres que le micro-endommagement interviennent, comme les effets de contact frottant entre les lèvres de la (ou des) fissure(s) couplés au relâchement de contraintes internes initialement induites lors du procédé de fabrication.

Parmi les matériaux pour lesquels ce type d'études présente un intérêt particulier se trouve le comprimé pharmaceutique. Celui-ci est mis en forme, à partir d'un mélange de poudres, lors d'une opération de compression en matrice. Bien que ce procédé soit utilisé depuis plus d'un siècle, la description précise des phénomènes ayant lieu en cours de compression reste encore à construire. Ceci est notamment vrai pour la phase de décompression, au cours de laquelle la contrainte appliquée est relâchée. Souvent considérée comme élastique, elle recouvre en fait des processus complexes avec notamment la rupture de certains des liens créés au cours de la phase de compression. Ces ruptures peuvent même provoquer l'apparition de fissures macroscopiques comme le décalottage ou le laminage, qui sont rédhibitoires au niveau de la production [1].



Depuis plusieurs années, trois équipes de recherche basées à l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux réunissent leurs compétences autour de la galénique et de la mécanique de la rupture. Elles ont pu montrer l'importance d'étudier le comportement à rupture des matériaux pharmaceutiques au sens de la mécanique de la rupture non linéaire [1]. Des essais de type Disk-Compact-Tension ont récemment pu mettre en évidence le caractère quasi-fragile du comprimé et surtout quantifier les énergies de rupture et les longueurs caractéristiques du micro-endommagement en re-construisant les courbes de résistance associées [2].

En parallèle, une nouvelle approche de simulation basée sur la méthode des éléments discrets/lattices a été développée afin d'inclure dans le calcul des lois cohésives tri-modales [3]. Il a été démontré sa bonne capacité à représenter des propagations complexes de fissures dans différentes configurations [4]. Ce modèle est disponible dans un code de calcul dont une partie du développement est aussi réalisé au sein de l'I2M. Les mécanismes de refermeture de fissure et l'effet unilatéral sont décrits de manière satisfaisante. Les derniers travaux autour de ce modèle concernent la prise en compte des phénomènes de frottement post-rupture et le relâchement des contraintes internes.

Ce sujet de thèse propose donc tout naturellement de poursuivre l'effort de compréhension et de prédiction par la simulation des endommagements lors de la fabrication du comprimé pharmaceutique. Il s'agit d'un travail de mécanique computationnelle où le protocole numérique doit composer un premier modèle donnant une idée des différentes contraintes internes dues à la phase de compression de la poudre. Ce premier modèle pourra être réalisé soit par une approche continue ou discrète. Les informations sur les tensions initiales seront ensuite transmises à la simulation intégrant le modèle d'endommagement discret afin de tester sa capacité de prédiction des endommagements observés expérimentalement.

[1] B. Croquelois, *Comportement à rupture des matériaux hétérogènes fragiles : application au comprimé pharmaceutique*, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, lien

[2] J. Girardot, J. Kopp, B. Croquelois, P. Tchoreloff, S. Morel, and V. Mazel, *Disk-shaped compact tension test for fracture analysis on pharmaceutical tablets*, Powder Technology, p. 118 016, Oct. 2022. DOI: 10.1016/j.powtec.2022.118016.

[3] M. Sage, *Modélisation discrète de la rupture quasi-fragile : proposition d'un modèle d'endommagement pour les poutres de lattice*, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, lien

[4] M. Sage, J. Girardot, J.-B. Kopp, and S. Morel, "A damaging beam-lattice model for quasi-brittle fracture," International Journal of Solids and Structures, vol. 239-240, p. 111 404, Mar. 2022. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2021.111404.

Aspects pratiques : basé à bordeaux sur le site de I2M, sous une bourse ministérielle de l'école doctorale Science Physique et de l'Ingénieur, cette thèse bénéficiera d'un environnement dédié aux travaux de calcul (accès aux outils numérique du laboratoire, aux serveurs de calcul de la région Nouvelle Aquitaine) ainsi qu'à la participation à plusieurs colloques et conférences nationales et internationales. Il sera aussi envisageable selon le souhait du candidat de réaliser une mission d'enseignement à l'Université de Bordeaux au cours de la thèse.

Profil du candidat : Nous recherchons des candidats titulaires d'un master ou un diplôme d'ingénieur en physique, en mécanique des solides ou en ingénierie des matériaux, avec une très bonne connaissance des outils numériques et de la simulation numérique. Une expérience en modélisation non linéaire et/ou en mécanique des fractures sera appréciée.

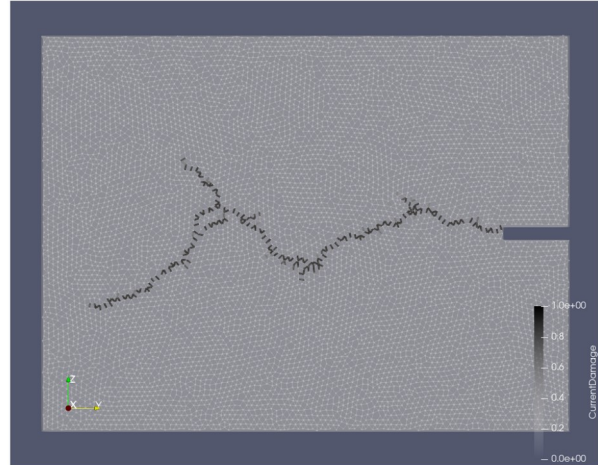
Candidature : Les candidats doivent envoyer une lettre de motivation et un curriculum vitae ainsi qu'une ou plusieurs lettres de références (ou les contacts des personnes le cas échéant) aux adresses suivantes :

vincent.mazel@u-bordeaux.fr ; stephane.morel@u-bordeaux.fr ; jeremie.girardot@ensam.eu

Fracture Simulation of quasi-brittle materials in a context of post-compaction relaxation
application to the decompression phase during the manufacture of pharmaceutical tablets

Institute of Mechanics and Mechanical Engineering of Bordeaux (I2M)

Scientific context : Most materials based on aggregates or powder (concrete, ceramic, particle-reinforced composites, etc.) exhibit a so-called quasi-brittle fracture behavior. Modeling crack propagation in this framework is still an important challenge and may require revisiting not only the cohesive models concerned but also the numerical methods used to solve them. The simulations involve complex propagations of one or more cracks that can interact with each other. The exercise becomes even more complex when irreversible phenomena other than micro-damage intervene, such as the effects of rubbing contact between the lips of the crack(s) coupled with the release of internal stresses initially induced by the process of manufacturing.



Among the materials for which this type of study is of particular interest is the pharmaceutical tablet. This is shaped from a mixture of powders during a die compression operation. Although this process has been used for more than a century, the precise description of the phenomena taking place during compression still remains to be constructed. This is particularly true for the decompression phase, during which the applied stress is released. Often considered elastic, it in fact covers complex processes including the breaking of some of the links created during the compression phase. These ruptures can even cause the appearance of macroscopic cracks such as capping or lamination, which are prohibitive in terms of production [1].

For several years, three research teams based at the Institute of Mechanics and Mechanical Engineering in Bordeaux have been combining their expertise in pharmaceuticals and fracture mechanics. They have demonstrated the importance of studying the fracture behavior of pharmaceutical materials in the sense of nonlinear fracture mechanics [1]. Disk-Compact-Tension tests have recently demonstrated the quasi-brittle nature of tablets and, above all, quantified the fracture energies and cohesive lengths of micro-damage by re-constructing the associated 'resistance' curves [2].

In parallel, a new simulation approach based on the discrete element/lattice method has been developed to include tri-modal cohesive laws [3], and its ability to represent complex crack propagation in different configurations has been demonstrated [4]. This model is available in a calculation code whose development is also carried out at I2M. Crack reclosure mechanisms and the unilateral effect are described satisfactorily. The latest work on this model involves taking into account post-fracture friction phenomena and the relaxation of internal stresses.

The subject of this PhD is therefore a natural continuation of the effort to understand and predict damage during the manufacturing of pharmaceutical tablets. This is a computational mechanics project, where the numerical protocol is to compose an initial model giving an idea of the various internal stresses due to the compression phase of the powder. This first model can be built using either a continuous or discrete approach. The information on the initial stresses will then be passed on to the simulation integrating the discrete damage model, in order to test its ability to predict the damage observed experimentally.

[1] B. Croquelois, *Comportement à rupture des matériaux hétérogènes fragiles : application au comprimé pharmaceutique*, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, lien

[2] J. Girardot, J. Kopp, B. Croquelois, P. Tchoreloff, S. Morel, and V. Mazel, *Disk-shaped compact tension test for fracture analysis on pharmaceutical tablets*, Powder Technology, p. 118 016, Oct. 2022. DOI: 10.1016/j.powtec.2022.118016.

[3] M. Sage, *Modélisation discrète de la rupture quasi-fragile : proposition d'un modèle d'endommagement pour les poutres de lattice*, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, lien

[4] M. Sage, J. Girardot, J.-B. Kopp, and S. Morel, "A damaging beam-lattice model for quasi-brittle fracture," International Journal of Solids and Structures, vol. 239-240, p. 111 404, Mar. 2022. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2021.111404.

Practical aspects : Based in Bordeaux on the I2M site, under a ministerial grant from the Sciences Physique et de l'Ingénieur doctoral school, this PhD will benefit from an environment dedicated to computational work (access to the laboratory's numerical tools, access to the Nvlle Aquitaine region's computational servers) as well as participation in several national and international colloquia and conferences. Depending on the candidate's wishes, a teaching assignment at the Université de Bordeaux may also be considered during the thesis.

Profil : We are looking for candidates with a Master's degree or an engineering diploma in physics, solid mechanics or materials engineering, with a very good knowledge of numerical tools and numerical simulation. Experience in nonlinear modeling and/or fracture mechanics would be appreciated.

Application : Applicants should send a cover letter and curriculum vitae, as well as one or more letters of reference (or contact details) to the following addresses :

vincent.mazel@u-bordeaux.fr ; stephane.morel@u-bordeaux.fr ; jeremie.girardot@ensam.eu