

Géométrie et propriétés élastiques des matériaux granulaires

Jean-Noël Roux^{1,*}, Sacha Emam¹, Muhammad Sharifipour² & Christophe Dano²

¹ Laboratoire des Matériaux et des Structures du Génie Civil, Institut Navier, Cité Descartes
2 allée Kepler, 77420 Champs-sur-Marne

² Institut de Génie Civil et Mécanique (GeM), École Centrale de Nantes, 1 rue de la Noë,
BP 92101, 44321 Nantes Cedex 3

* jean-noel.roux@lcpc.fr

Résumé :

Nous étudions par simulation numérique (de type « éléments discrets ») les propriétés géométriques et élastiques d'assemblages de grains sphériques obtenus par différents protocoles de préparation : compression isotrope de « gaz granulaires », vibration de configurations denses, dépôt sous gravité. Nous montrons que le nombre de coordination des contacts portant les forces, inaccessible à l'expérience, peut varier indépendamment de la compacité et constitue le paramètre déterminant pour les propriétés élastiques qui, elles, sont mesurables en laboratoire. La comparaison de valeurs numériques et expérimentales pour les modules élastiques des billes de verre, encore partielle, donne un bon accord.

Abstract :

Geometric and elastic properties of packings of spherical grains are studied by discrete element numerical simulations, using different assembling methods: isotropic compression of "granular gases", vibration of dense configurations, deposition under gravity. The force-carrying network coordination number, which cannot be measured experimentally, is shown to be the essential parameter determining the elastic properties, which are accessible in the laboratory. Some partial comparisons of numerical and experimental values of elastic moduli of glass bead packings yield a good agreement.

Mots-clefs : matériaux granulaires ; élasticité

1 Introduction

La simulation numérique discrète est devenue une technique d'emploi courant dans l'étude des propriétés mécaniques des matériaux granulaires (García Rojo *et al.* 2005; Roux & Chevoir 2005), en particulier pour explorer les origines microscopiques, à l'échelle des grains et des contacts, de leur comportement mécanique macroscopique. Une difficulté fondamentale dans l'étude des matériaux granulaires en régime solide est la méconnaissance des états initiaux, qui dépendent de la méthode utilisée pour fabriquer les échantillons. Les simulations numériques dont nous rapportons ici brièvement les résultats portent sur les propriétés élastiques de matériaux constitués de grains sphériques, dont on étudie les relations à la microstructure résultant du processus d'assemblage initial. Les paramètres du modèle étant décrits au §2, nous présentons au §3 les états résultant de différentes méthodes d'assemblage, dont les modules élastiques sous confinement isotrope croissant sont évalués (§4) et comparés aux données expérimentales (§5), avant une brève conclusion (§6).

2 Matériau modèle

On considère des assemblages de billes identiques de diamètre a , auxquelles on attribue les propriétés élastiques du verre : module d'Young $E = 70$ GPa, coefficient de Poisson $\nu = 0,3$.

2.1 Lois de contact

Les forces de contact intergranulaires sont d'origine élastique, frictionnelle et visqueuse. La loi de Hertz (Johnson 1985) relie la force normale élastique F_N à la déflexion normale élastique h du contact :

$$F_N = \frac{E\sqrt{a}}{3(1-\nu^2)}h^{3/2} \quad \text{ou} \quad K_N = \frac{dF_N}{dh} = \frac{E\sqrt{a}}{2(1-\nu^2)}h^{1/2} = \frac{(3a)^{1/3}}{2(1-\nu^2)^{2/3}}E^{2/3}F_N^{1/3} \quad (1)$$

tandis qu'une version simplifiée de celles de Mindlin et Deresiewicz (Johnson 1985) attribue aux contacts une raideur tangentielle incrémentale fonction de h ou de F_N :

$$d\mathbf{F}_T = K_T d\mathbf{u}_T, \quad \text{avec} \quad K_T = \frac{2-2\nu}{2-\nu}K_N \quad (2)$$

Cette relation entre incréments de force tangentielle \mathbf{F}_T et de déplacement relatif tangentiel \mathbf{u}_T doit être modifiée, le cas échéant, pour prendre en compte la condition de Coulomb avec le coefficient de frottement μ , pris égal à 0,3 dans nos calculs, en projetant \mathbf{F}_T sur le cercle de rayon μF_N dans le plan tangent. De plus, on doit réduire le module de \mathbf{F}_T en proportion de la réduction de la raideur tangentielle lorsque F_N diminue, comme suggéré par Elata & Berryman (1996), pour éviter toute incohérence énergétique. Enfin, la force tangentielle doit suivre la matière dans son mouvement. On suppose que son intensité se conserve dans le roulement et le pivotement, et que sa direction subit la rotation du vecteur normal dans le roulement, et tourne autour de celui-ci avec le taux moyen de pivotement des deux grains en contact. Ceci assure l'objectivité (Kuhn & Chang 2006).

Une contribution supplémentaire visqueuse à la force de contact introduit 2 paramètres sans dimension α_N, α_T , définis comme les rapports (pris constants) des coefficients d'amortissements normal et tangentiel à leurs valeurs critiques dans le contact élastique linéaire doté des mêmes raideurs K_N et K_T . On a pu vérifier que α_N et α_T n'ont aucun effet sur le comportement en régime quasi-statique (Roux & Chevoir 2005), mais ils influent en revanche sur le résultat de certains processus d'assemblage (Emam *et al.* 2005).

2.2 Démarche des calculs et paramètres de contrôle

Les modèles mécaniques de contact faisant intervenir un nombre important de paramètres il est utile de recourir à l'analyse dimensionnelle. Les paramètres sans dimension les plus influents sur le comportement mécanique macroscopique, lorsque l'on soumet le matériau à un taux de cisaillement $\dot{\epsilon}$ en contrôlant une certaine pression de confinement P s'avèrent être le nombre d'inertie I (da Cruz *et al.* 2005), caractéristique de l'importance des effets dynamiques, et le niveau de raideur κ , qui quantifie l'importance des déflexions normales h aux contacts relativement au diamètre des grains ($h/a \propto \kappa^{-1}$). Ces nombres s'écrivent :

$$\boxed{I = \dot{\epsilon} a \sqrt{\frac{\rho_m}{P}}} \quad (\rho_m \text{ est la masse volumique des grains}), \quad \text{et} \quad \boxed{\kappa = \left(\frac{E}{(1-\nu^2)P} \right)^{2/3}}$$

La méthode des éléments distincts, ou dynamique moléculaire (Roux & Chevoir 2005), consiste simplement à intégrer les équations de la dynamique d'une collection de corps solides indéformables (les déformations des grains sont confinées aux régions de contact). Il s'agit d'un calcul dynamique, la limite quasi-statique devant être approchée pour $I \rightarrow 0$.

3 Méthodes d'assemblage

Nous avons fabriqué des échantillons numériques comprenant typiquement 4000 à 10000 billes identiques, par différents procédés détaillés ailleurs (Emam *et al.* 2005; Agnolin & Roux 2006) et dont nous ne rappelons ici que les grandes lignes et les résultats essentiels. Nous assemblons les grains dans une configuration d'équilibre sous une pression isotrope P_0 , et nous mesurons la *compacité* Φ , la proportion x_0 de grains *flottants*, ne portant pas de force, le *nombre de coordination* ζ^* du réseau des forces – nombre moyen de contacts par grain non flottant. Dans le cas d'un assemblage en présence de gravité la texture obtenue est anisotrope mais possède la symétrie de révolution autour de la direction verticale. Cette anisotropie, dite inhérente, est caractérisée par les écarts aux valeurs isotropes $1/(2k)$ des moyennes $\mu_{2k} = \langle \cos^{2k} \theta \rangle$ sur l'ensemble des contacts, qui déterminent le développement en polynômes de Legendre de la distribution des orientations en fonction de $\cos \theta$, où θ est l'angle du vecteur normal au contact avec la verticale. Le tableau 1 donne les caractéristiques des différents états initiaux préparés sous contraintes isotropes.

Un premier procédé est la *compression directe isotrope*, dans lequel un gaz granulaire, en l'absence de gravité, est comprimé jusqu'à l'équilibre mécanique dans une cellule de taille variable. Il est classiquement utilisée dans les simulations (Thornton 2000) pour obtenir des états denses si on réduit le coefficient de frottement μ à zéro (lubrification parfaite, état noté A) ou bien à une valeur faible (lubrification imparfaite, B). L'état A est classiquement appelé état désordonné de compacité maximale ($\Phi \simeq 0.639$). Dans la limite rigide $\kappa \rightarrow +\infty$ ζ^* vaut 6 (Roux 2000), et les configurations obtenues réalisent des maxima locaux de la compacité sous contrainte de non-interpénétrabilité. L'état B en est une perturbation, avec une réduction sensible de la densité ($\phi \simeq 0,625$) et une moindre coordinence. L'usage de la valeur finale $\mu = 0,3$ pendant la compression, si on cherche à diminuer la vitesse de compactage réduite I (nous avons imposé $I \leq 10^{-3}$), produit des états sensiblement plus lâches notés D. Enfin, il est intéressant d'étudier l'effet d'une *vibration* des grains, idéalement supposée ouvrir tous les contact à partir d'un état dense, et suivie d'une compression finale avec la valeur définitive $\mu = 0,3$ jusqu'à équilibre sous P_0 . Ce procédé noté C, obtenu par légère dilatation, vibration et recomptage des états denses A, présente cette particularité remarquable que la compacité est presque maximale (proche de celle de A) mais le nombre de coordination aussi faible que dans les états les plus lâches¹ (D). Densité et coordinence ne sont donc pas liées en général. Entre les états B et C, Φ et ζ^* varient en sens inverse. Les échantillons de billes en laboratoire dont la compacité est proche de la valeur maximale des états désordonnés ont-ils un nombre de coordination proche de 6 (comme A) ou proche de 4,5 (comme C) ? Malgré les performances des techniques de tomographie, le nombre de coordination dans un assemblage de grains sphériques semble encore inaccessible aux mesures : ainsi les résultats de Aste *et al.* (2004) sont entachés d'une imprécision de l'ordre de 0,05 a sur les distances entre sphères voisines, et c'est pour des distances plus courtes que les échantillons numériques A et C se distinguent. Ces états A à D, idéalement isotropes, ne prétendant pas modéliser quantitativement des procédés d'assemblage expérimentaux, nous avons simulé le procédé de *pluviation contrôlée*, utilisé en laboratoire (Benahmed *et al.* 2004). Il consiste à déposer les grains sous gravité, de telle sorte que la hauteur de chute H au-dessus de la surface libre du massif en cours de fabrication ainsi que le débit massique par unité d'aire Q soient maintenus constants. Cette méthode prépare les billes dans des états plutôt

¹Les densités les plus faibles sont en fait obtenues en introduisant une cohésion capillaire (Richefeu *et al.* 2006) entre les grains – procédé analogue au « damage humide » en laboratoire (Benahmed *et al.* 2004). L'effet des forces cohésives est alors, si a est supérieur à 1/10 mm, rapidement domniee par le confinement lorsque P augmente dans la gamme des kPa, et on peut supprimer ces forces à haute pression, pour ensuite décompresser. On se retrouve alors avec des états plus lâches que D, mais sans diminuer la coordinence, que nous n'étudions pas plus avant ici.

Procédé	Φ	ζ^*	x_0 (%)	$\mu_2 - \frac{1}{3}$	$\mu_4 - \frac{1}{5}$	P_0 (kPa)
lubrification (A)	0.637 ± 0.003	6.074 ± 0.0015	1.3 ± 0.2	0	0	10
lub. imparfaite (B)	0.6271 ± 0.0002	5.80 ± 0.007	1.65 ± 0.02	0	0	10
vibration (C)	0.635 ± 0.002	4.56 ± 0.03	13.3 ± 0.5	0	0	10
compression (D)	0.5923 ± 0.0006	4.55 ± 0.01	11.1 ± 0.4	0	0	1
pluviation (P1)	0.606 ± 0.002	4.87 ± 0.01	5.6 ± 1.1	0.024	0.048	20
pluviation (P2)	0.638 ± 0.001	5.10 ± 0.02	4.6 ± 0.9	0.018	0.012	20

TAB. 1 – Caractéristiques des états assemblés par différents procédés sous chargement isotrope, à la pression de confinement P_0 la plus basse (correspondant à κ entre 24000 et 180000).

denses, qui dépendent sensiblement des coefficients α_N et α_T (Emam *et al.* 2005), en sus des paramètres de contrôle naturels que sont la hauteur de pluviation réduite H/a et le débit réduit $Q^* = \frac{Q}{\rho_m \sqrt{ag}}$. On étudie ici deux états numériques P1 et P2 obtenus de la sorte, pour lesquels on a appliqué juste après l'assemblage une pression isotrope dominant la gravité, que l'on a alors supprimée (c'est pourquoi on trouve des grains flottants). On observe alors une corrélation positive entre Φ et ζ tandis que l'anisotropie tend à décroître lorsque Φ augmente. Φ croît avec H^* , et diminue si on augmente Q^* (Emam *et al.* 2005).

4 Modules élastiques : résultats numériques

Une fois assemblés les échantillons numériques sont soumis à une compression isotrope, P augmentant jusqu'à des valeurs élevées dans le cas des systèmes A à D (nous supposons la loi de contact inchangée), la valeur de I est limitée à 10^{-3} . Des configurations précisément équilibrées sont préparées à différents niveaux de pression P . Pour évaluer leurs modules élastiques, nous construisons alors la matrice de raideur² associée au réseau des contacts et nous résolvons le système linéaire correspondant à l'application d'incrément de contraintes macroscopiques. Les résultats des systèmes A à D, pour lesquels il suffit de mesurer le module de compression isotrope B et le module de cisaillement G , sont présentés sur la figure 1. Il en ressort immédiatement, puisque les résultats séparent les états A et B d'une part, et C et D d'autre part, que c'est la coordinence, beaucoup plus que la densité, qui détermine les modules (voir le tableau 1). on observe de plus une augmentation des modules avec P un peu plus rapide que la loi $P^{1/3}$ qui se déduit simplement de (1), en raison de l'augmentation de la coordinence, mais aussi dans le cas des modules de cisaillement des états C et D, du faible degré d'hyperstaticité des structures de contact de ces systèmes à basse pression (Agnolin & Roux 2006; Wyart 2006).

L'anisotropie inhérente des états fabriqués par pluviation donne, sous contraintes isotropes, un tenseur de constantes élastiques avec la symétrie isotrope transverse, dont nous avons évalué numériquement tous les éléments. Les modules longitudinaux dans la direction verticale sont supérieurs (C_{11}) (typiquement de 10%). Le module de cisaillement est également plus élevé dans un plan vertical (les rapports C_{55}/C_{44} et C_{11}/C_{22} ont des valeurs similaires). En outre, comme pour G dans les systèmes isotropes peu coordonnés C et D (Fig. 1), on observe une valeur plus faible de C_{55} et C_{44} à basse pression et une augmentation plus rapide avec P .

²En toute rigueur cette matrice dépend de la direction des incréments de contrainte et il n'existe pas de *vrai* domaine élastique, en raison de la loi de contact. Toutefois on peut vérifier (Agnolin & Roux 2006) que sous contrainte isotrope la simple utilisation des raideurs K_N et K_T données par (1) et (2) dans tous les contacts, ce qui donne un comportement élastique, fournit une très bonne approximation des relations incrémentales entre contraintes et déformations dans toutes les directions.

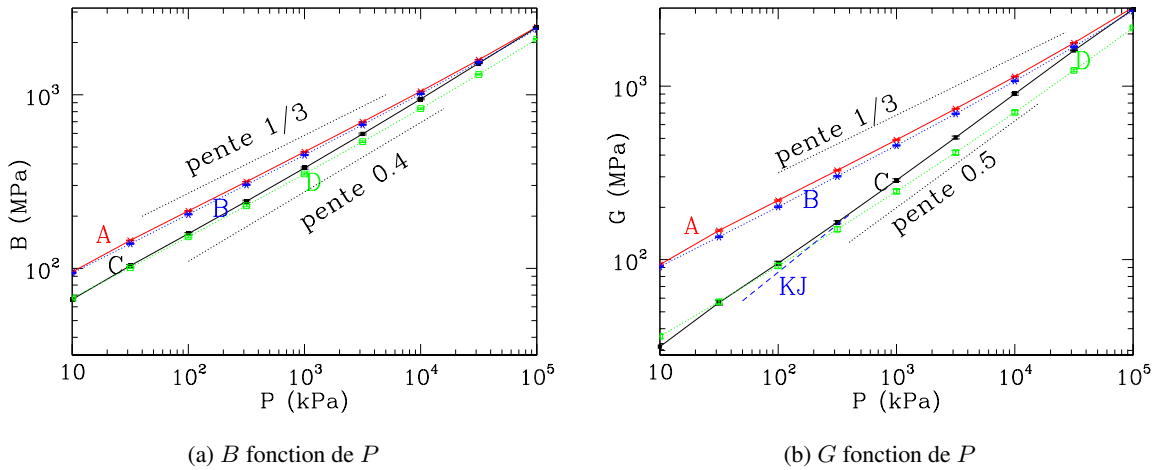


FIG. 1 – Modules élastiques des états isotropes A, B, C et D à pression de confinement P croissante.

5 Modules élastiques : confrontations expérimentales

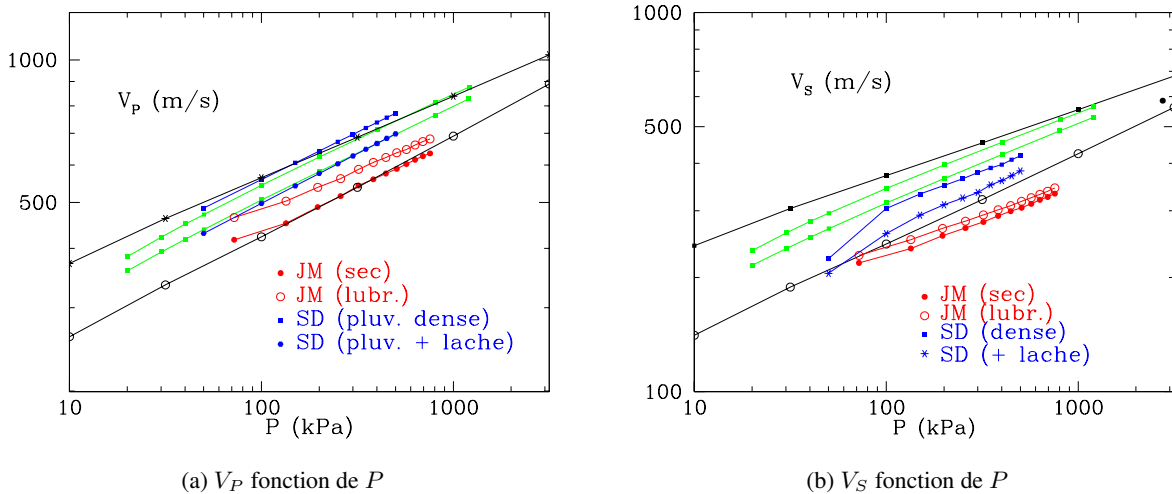


FIG. 2 – Vitesses des ondes se propageant verticalement dans les échantillons numériques et expérimentaux. Les résultats numériques pour les états P1 et P2 sont en vert, ils sont encadrés par les résultats extrêmes (en noir) des échantillons isotropes les mieux (A) et les moins bien (C) coordonnés. SD = résultats obtenus au LGeM, JM = résultats de X. Jia et P. Mills à l'université de Marne-la-Vallée, avec échantillons de billes sèches ou lubrifiées.

Nous disposons de résultats expérimentaux pour la vitesse des ondes se propageant dans la direction verticale sur des échantillons fabriqués par pluviation (Sharifipour 2006), à deux densités différentes proches de celles des états P1 et P2. Les vitesses des ondes P (longitudinales) et S (transversales) sont respectivement $V_P = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho_m \Phi(1-x_0)}}$ ($C_{11} = B + 4G/3$ dans le cas isotrope) et $V_S = \sqrt{\frac{C_{55}}{\rho_m \Phi(1-x_0)}}$. La comparaison aux calculs numériques donne un bon accord pour V_P , tandis que la simulation semble surestimer le module de cisaillement, dont la valeur expérimentale reste toutefois encadrée par les valeurs numériques extrêmes des états isotropes.

Les résultats de Jia & Mills (2001), repris par Agnolin *et al.* (2005), étant obtenus sous confinement œdométrique plutôt qu’isotrope, une comparaison directe est un peu plus délicate. Il est toutefois remarquable que ces auteurs ont obtenu des matériaux moins denses mais de modules plus élevés, par rapport aux systèmes densifiés par vibration, en lubrifiant lors de l’assemblage, ce qui est conforme aux observations sur les états numériques B et C. On peut donc attribuer ces observations à un moindre nombre de coordination des systèmes compactés par vibration (ou « tapotements »), même si leur densité peut approcher de la valeur maximale.

Enfin, des données de Kuwano & Jardine (2002) pour les modules de cisaillement des états anisotropes transverses (plutôt lâches) de billes de verre sous confinement isotrope sont portées sur la fig. 1(b) (se sont les pointillés bleus marqués KJ), et sont proches (C_{44} et C_{55} diffèrent peu) des résultats numériques pour les systèmes de faible coordinence.

6 Conclusion

Les états sous confinement isotropes issus de différentes méthodes d’assemblages numériques se caractérisent par un nombre de coordination ζ^* (hors flottants) entre 4,5 et 6 à basse pression et éventuellement une anisotropie de texture (assez modérée) due au rôle de la gravité. Le résultat essentiel est que les modules élastiques donnent accès à ζ^* . Ils sont aussi (modestement) influencés par l’anisotropie. Ils se comparent bien aux résultats expérimentaux, surtout pour les modules longitudinaux dans la direction verticale. L’explication des différences restantes, les configurations numériques étant affectées par le modèle de dissipation visqueuse dont la pertinence physique n’est pas totalement assurée, devra s’appuyer sur des mesures plus complètes donnant accès à l’ensemble des modules élastiques.

Références

- Agnolin, I. & Roux, J.-N. 2006. Isotropic granular packings : internal state and elastic properties. Soumis à Phys. Rev. E.
- Agnolin, I., Roux, J.-N., Maassad, P., Jia, X., & Mills, P. 2005. Sound wave velocities in dry and lubricated granular packings : numerical simulations and experiments. In García Rojo, Herrmann, & McNamara (2005) : 313–317.
- Aste, T., Saadatfar, M., Sakellariou, A., & Senden, T. J. 2004. Investigating the geometrical structure of disordered sphere packings. *Physica A* 339 : 16–23.
- Benahmed, N., Canou, J., & Dupla, J.-C. 2004. Structure initiale et propriétés de liquéfaction statique d’un sable. *Comptes-Rendus Académie des Sciences, Mécanique* 332 : 887–894.
- da Cruz, F., Emam, S., Prochnow, M., Roux, J.-N., & Chevoir, F. 2005. Rheophysics of dense granular materials : discrete simulation of plane shear flows. *Physical Review E* 72 : 021309.
- Elata, D. & Berryman, J. G. 1996. Contact force-displacement laws and the mechanical behavior of random packs of identical spheres. *Mechanics of Materials* 24 : 229–240.
- Emam, S., Roux, J.-N., Canou, J., Corfdir, A., & Dupla, J.-C. 2005. Granular packings assembled by rain deposition : an experimental and numerical study. In García Rojo, Herrmann, & McNamara (2005) : 49–52.
- García Rojo, R., Herrmann, H. J., & McNamara, S. (eds) 2005. *Powders and Grains 2005* : Leiden. Balkema.
- Jia, X. & Mills, P. 2001. Sound propagation in dense granular materials. In Y. Kishino (ed.), *Powders and Grains 2001* : 105–112. Swets & Zeitlinger (Lisse)
- Johnson, K. L. 1985. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press.
- Kuhn, M. R. & Chang, C. S. 2006. Stability, Bifurcation and Softening in Discrete Systems : A Conceptual Approach for Granular Materials. *International Journal of Solids and Structures* 43 : 6026–6051.
- Kuwano, R. & Jardine, R. J. 2002. On the applicability of cross-anisotropic elasticity to granular materials at very small strains. *Géotechnique* 52 : 727–749.
- Richefeu, V., El Youssoufi, M. S., & Radjai, F. 2006. Shear strength properties of wet granular materials. *Phys. Rev. E* 73 : 051304.
- Roux, J.-N. 2000. Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Physical Review E* 61 : 6802–6836.
- Roux, J.-N. & Chevoir, F. 2005. Simulation numérique discrète et comportement mécanique des matériaux granulaires. *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées* 254 : 109–138.
- Sharifipour, M. 2006. *Caractérisation des sols par propagation d’ondes, analyse critique de la technique des bender-extend elements*. Thèse de doctorat, École Centrale de Nantes : Nantes, France.
- Thornton, C. 2000. Numerical simulations of deviatoric shear deformation of granular media. *Géotechnique* 50 : 43–53.
- Wyart, M. 2006. On the rigidity of amorphous solids. *Annales de Physique Fr.* 30 : 1–96.