

Influence de la polydispersité sur la texture des milieux granulaires

Charles Voivret, Jean-Yves Deleenne, Moulay Saïd El Youssoufi & Farhang Radjaï

LMGC UMR CNRS
Université Montpellier 2, 34095 Montpellier Cedex 5
voivret@lmgc.univ-montp2.fr

Résumé :

La texture des matériaux granulaires est fortement influencée par le degré de polydispersité des tailles de particules. Dans cet article on présente un modèle de distribution granulométrique associé à un protocole de dépôt géométrique. Ce modèle est suffisamment efficace sur le plan numérique pour permettre une étude systématique des propriétés d'arrangement du milieu (compacité, connectivité, anisotropie) en fonction de la forme et de l'étalement de la courbe granulométrique. Un résultat remarquable de cette étude est la variation non linéaire de la compacité avec l'étalement. On observe notamment un palier où la compacité n'évolue pas avec l'étalement. Une transition a lieu vers les compacités plus élevées lorsque l'étalement permet l'insertion des plus petites particules dans les pores formés par les plus grosses. Cette transition se retrouve au niveau de l'arrangement granulaire qui est relativement régulier sur le palier et désordonné ensuite.

Abstract :

The texture of granular materials is strongly influenced by the polydispersity of particles. In this paper we presents a model of particle size distribution associated with a protocol of geometrical deposition. This model is sufficiently efficient on the numerical level to allow for a systematic study of the grading arrangement properties (compactness, connectivity, anisotropy) as a function of form and the grading of the particles size. A remarkable result of this study is the nonlinear variation of compactness with polydispersity. We observes in particular a regime where compactness does not evolve with polydispersity. A transition takes place towards higher values of the compactnesses when the polydispersity out allows for the insertion of smalles particles in the pores formed by larges. This transition is also observed for the granular arrangement which is relatively ordered on the plateau and disordered afterwards.

Mots-clefs :

matériaux granulaires ; polydispersité ; texture

1 Introduction

Les matériaux granulaires présentent une dispersion de taille des particules. L'influence de la distribution granulométrique sur le comportement et sur les propriétés d'empilement (texture) des matériaux granulaires ont été étudiés pour des faibles (Goddard *et al.* (1998)) ou des fortes (Herrmann *et al.* (2003)) polydispersités. Le premier cas intéresse notamment la question de la transition de l'ordre vers le désordre dans un arrangement granulaire. Le deuxième cas concerne plus particulièrement le problème du remplissage optimal de l'espace par l'insertion de petites particules dans les pores créés par les plus grosses particules. La difficulté de mener des études expérimentales systématiques sur les paramètres granulométriques entre ces deux cas limites explique le faible nombre de résultats dans la littérature. Dans le cas des sols, la distribution granulométrique est généralement décrite par une courbe granulométrique caractérisée par des coefficients d'uniformité et de courbure (Mitchell (2005)). L'influence de ces coefficients sur le comportement mécanique des sols a été étudiée par de nombreux auteurs mais reste souvent

basée sur des considérations empiriques. Enfin, les milieux fortement polydisperses restent difficilement accessibles aux simulations numériques dynamiques par éléments discrets du fait de la nécessité d'utiliser un grand nombre d'éléments pour assurer la représentativité de l'échantillon.

Dans cet article, nous proposons un modèle permettant de réaliser des échantillons granulaires bidimensionnels composés de plusieurs millions de particules. Ce modèle est basé sur un algorithme de génération de particules circulaires à partir d'une granulométrie choisie et sur un protocole de dépôt géométrique. L'algorithme de génération permet d'obtenir diverses formes de distributions à simple ou double courbures et notamment les cas particuliers importants des distributions monodisperse, uniforme en volume et uniforme en diamètre. Dans notre étude, le protocole de dépôt s'apparente à un processus de dépôt balistique aléatoire conduisant à des empilements homogènes, denses et très proches de l'équilibre mécanique (Bratberg *et al.* (2002)). Un problème fondamental consiste à explorer les mécanismes de remplissage de l'espace en fonction des paramètres granulométrique (forme et étalement), décrit soit en termes de fractions volumiques des particules, comme en mécanique des sols, soit en termes de rapport entre les diamètres extrêmes des particules. De plus, l'étude du réseau de contact en termes d'anisotropie (Oda (1993)), de connectivité et de répartition angulaire est d'un intérêt capital pour la modélisation de la plasticité des matériaux granulaires.

2 Modèle granulométrique

Afin de générer une distribution de particules, on utilise classiquement une fonction de répartition modèle (e.g. normale, log-normale, loi de puissance. . .) des diamètres et une méthode de simulation de variable aléatoire (e.g. transformation inverse). Bien que cette approche soit très efficace, elle nécessite d'imposer le nombre de particules à générer. A priori, rien ne garantit que le nombre de particules imposé soit suffisant pour assurer la représentativité de la distribution à simuler. Afin de maîtriser la représentativité de la distribution granulométrique des échantillons, nous avons développé une nouvelle méthode de génération. Cette méthode se base sur une courbe granulométrique modèle et sur des critères de représentativité pour déterminer le nombre de particules à générer. On suppose alors que la courbe granulométrique modèle est décrite par une fonction continue monotone $h(d)$ où $d \in [d_{min}; d_{max}]$ représente la taille des particules avec $h(d_{min}) = 0$ et $h(d_{max}) = 1$. Quatre étapes sont nécessaires pour la génération d'un échantillon de granulométrie $h(d)$:

1. Pour une discrétisation choisie de l'intervalle $[d_{min}; d_{max}]$, on décumule $h(d)$ afin d'obtenir la fraction massique f_m^i que représente chaque classe i : $f_m^i = h(d_{max}^i) - h(d_{min}^i)$ où d_{min}^i et d_{max}^i représentent les bornes inférieure et supérieure de la classe. Le choix d'une discrétisation repose sur deux critères : a) la fraction massique de chaque classe f_m^i doit impliquer un nombre représentatif de particules par rapport au nombre total de particules N_p ; b) la masse d'une particule influe peu sur f_m^i . Le respect de ces critères est particulièrement important lors de la génération de grosses particules. Cela nous conduit à choisir une discrétisation indépendante de $h(d)$ dont la largeur des classes augmente suivant une progression géométrique. Le seul paramètre de contrôle influant sur la discrétisation est alors le nombre de classes N_c entre d_{min} et d_{max} .
2. Pour une masse totale unitaire, on calcule pour chaque classe la quantité de grains de diamètre moyen $n_1^i = 4m_i / \rho\pi(d_{moy}^i)^2$ correspondant à la masse $m_i = 1 \cdot f_m^i$. Afin de satisfaire le critère (a), on introduit un nouveau paramètre de contrôle : le nombre minimum de particules par classe $N_{p/c}^{min}$. Les n_1^i sont corrigés par un facteur $k_1 = N_{p/c}^{min} / \text{Min}(n_1^i)$ et l'on extrait la partie entière pour obtenir un nombre entier de particules par classe

$N_1^i = E(k_1 n_1^i)$. On s'assure ainsi que chaque classe contient au moins $N_{p/c}^{min}$ particules.

3. Le nombre total de particules à générer $N_p = \sum N^i$ peut être trop faible pour représenter, statistiquement et structurellement après dépôt, une granulométrie. On définit le nombre total minimum de particules N_p^{min} comme un paramètre de notre modèle de génération. Si $N_p < N_p^{min}$, on répète l'opération précédente pour obtenir finalement un nombre de particules à générer par classe $N^i = k_2 N_1^i$ avec $k_2 = E(N_p^{min}/N_p)$.
4. Pour chaque classe, on génère N^i particules suivant une distribution uniforme en volume normalisé sur la classe. Ainsi, les classes sont représentées par des segments de droite sur la courbe granulométrique.

Cette procédure permet de générer des distributions de particules à partir d'une courbe granulométrique. Les paramètres à fixer pour estimer qu'une granulométrie est bien représentée sont N_c , $N_{p/c}^{min}$ et N_p^{min} . Le modèle continu de courbe granulométrique étant approché par des segments de droite, un nombre de classes N_c élevé garantira une bonne approximation mais aura pour conséquence un nombre total de particules élevé à $N_{p/c}^{min}$ fixé. De même, un nombre minimum de particules par classe élevé garantira une bonne représentativité statistique de la distribution, mais augmentera le nombre total de particules à N_c fixé. Le nombre total de particules admissibles peut être adapté selon l'usage auquel est destinée l'échantillon (étude statistique, dépôt géométrique, simulation dynamique...). En conséquence, si le nombre de particules générées dépasse le nombre admissible, la distribution ne pourra pas être simulé pour un jeu de paramètres donné. Nous avons choisi d'utiliser la distribution β incomplète normalisée suivante comme modèle de courbe granulométrique :

$$\beta(a, b, d) = \frac{1}{B(a, b)} \int_{d_{min}}^d t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \quad (1)$$

où $B(a, b) = \Gamma(a)\Gamma(b)/\Gamma(a+b)$. Cette distribution a l'avantage d'être défini sur un intervalle fini. Elle est paramétrée seulement par deux réels positifs (a et b) et permet de reproduire différentes formes classiques de courbes granulométriques ; voir figure 1(a). De plus il est possible d'obtenir des cas particuliers de distributions statistiques tels que les distributions uniformes en volume ou en diamètre en fixant les valeurs des paramètres a et b . Afin d'étudier l'influence de l'étalement de la courbe granulométrique, on pose $d_{max} = 1$ et on fait diminuer d_{min} en le paramétrant par $s = (d_{max} - d_{min})/(d_{max} + d_{min})$. Ainsi les paramètres a et b contrôlent la forme de la distribution et le paramètre s contrôle son extension vers les petites particules. En faisant varier s de 0 à 1, la granulométrie évolue d'une distribution monodisperse (pour $d_{min} = 1$) à une distribution fortement polydisperse (pour $d_{min} = 0$).

En pratique, pour un échantillon réel de matériau granulaire, le paramètre s ne peut pas être utilisé comme paramètre d'étalement de la distribution car les tailles extrêmes des particules ne sont pas nécessairement significatives. En d'autres termes, une classe granulométrique associée à d_{min} n'est significative que si sa fraction volumique est accessible à la mesure. Pour cette raison, dans le cas des sols par exemple, on préfère caractériser l'étalement par le coefficient d'uniformité défini par $C_u = d_{60}/d_{10}$ où d_x désigne le diamètre pour lequel la fraction volumique des particules plus petites est égale à $x\%$. Remarquons que C_u varie de 1, pour une distribution monodisperse, à des valeurs de l'ordre de six pour un sol bien gradué. C_u augmente de façon monotone mais non linéaire avec s pour des paramètres de forme a et b fixés.

3 Méthode de préparation

Le protocole de préparation utilisé consiste à déposer les particules une à une sur un substrat ou sur les particules préalablement placées. Ce dépôt est réalisé en minimisant un potentiel

configurationnel donné. Dans cet article, nous avons utilisé le potentiel $\Psi = \sum_{i=1}^{N_p} y(i)$ où $y(i)$ est la cote de la particule i . En pratique, nous déterminons d'abord, à la surface de la couche déjà déposée, le point le plus bas pour placer une particule. La position d'équilibre correspond à une position où la particule est supportée par deux particules de telle sorte que son centre de masse se situe entre les deux points de contact. Afin de limiter les effets de bord, nous avons utilisé des conditions aux limites périodiques dans la direction perpendiculaire à celle du dépôt et une couche de grains issus de la distribution granulométrique considérée est utilisée pour servir de base à l'échantillon. Les échantillons obtenus sont homogènes avec une surface supérieure assez régulière.

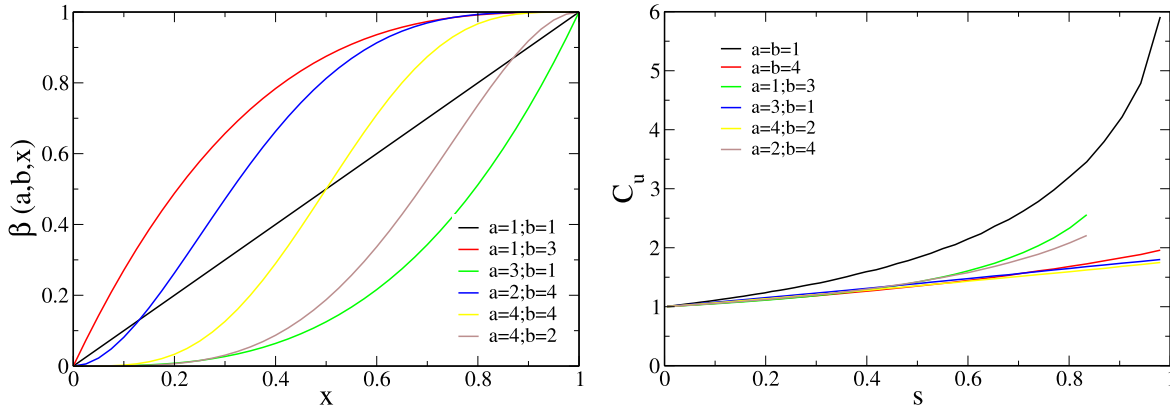


FIG. 1 – (a) Quelques formes de courbes granulométriques pour plusieurs valeurs des paramètres a et b du modèle ; (b) évolution de C_u en fonction de l'étalement s .

4 Etude paramétrique

Les paramètres de génération choisis pour cette étude sont : $N_c = 10$, $N_{p/c}^{min} = 10$ et $N_p^{min} = 3 \times 10^4$. Les granulométries nécessitant $N_p > 10^5$ sont rejetées. Dans cette partie, un ensemble de courbes granulométriques accessibles à partir de la distribution β est étudié. Quelques cas représentatifs sont présentés sur la figure 1(a) : la distribution uniforme en volume ($a = b = 1$), une distribution strictement concave qui est aussi la distribution uniforme en diamètre ($a = 3; b = 1$), une distribution strictement convexe ($a = 1; b = 3$), trois distributions à double courbure ($a = 2; b = 4$) et ($a = 4; b = 2$) dont une symétrique ($a = b = 4$). Par souci de clarté seule la distribution uniforme en volume est représentée dans certains cas. La figure 1(b) montre l'évolution de C_u en fonction de s . On remarque que pour les distributions favorisant le nombre de petites particules, C_u augmente peu (inférieurs à 2). La distribution uniforme en volume conduit aux valeurs les plus élevées de C_u . Dans tous les cas, la variation de C_u est monotone en fonction de s . Ceci permet d'utiliser indifféremment s et C_u comme paramètre d'étalement.

Le choix du protocole de dépôts influence nécessairement la configuration géométrique de l'empilement obtenu. Cet empilement peut être caractérisé en étudiant les directions θ des contacts ou la connectivité des particules P_q , définie comme la fraction des particules ayant exactement q contacts. La figure 2(a) représente la densité de probabilité P des directions de contact θ pour la distribution uniforme en volume pour six valeurs de croissantes. On observe une distribution symétrique à deux pics centrés sur des directions proches de 45° et 135° . On constate que les pics s'atténuent avec l'étalement. Cette distribution bimodale résulte du choix du potentiel et de la règle locale d'équilibre qui impliquent qu'en moyenne chaque particule supporte et est supporté par deux particules. Par conséquent, la coordinance moyenne est $Z = 4$.

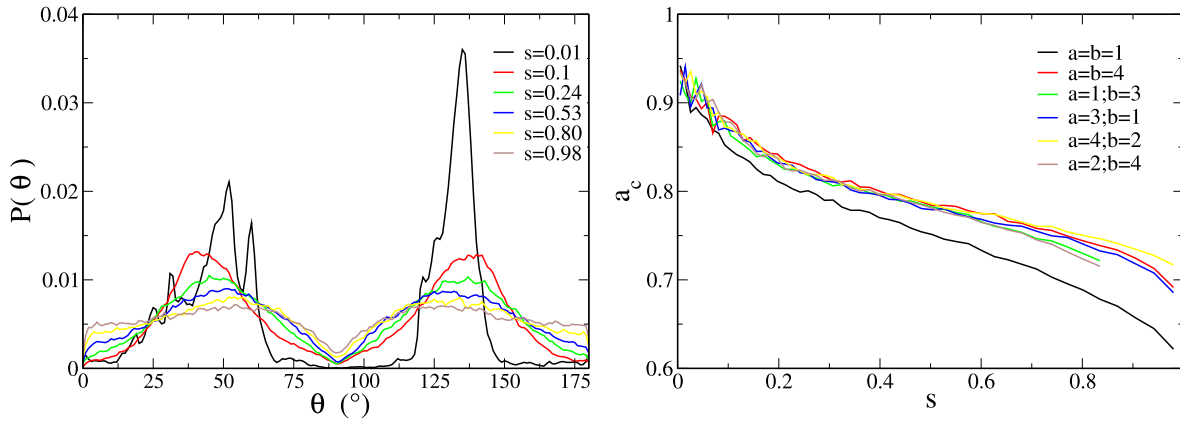


FIG. 2 – (a) Distribution des directions de contacts pour la distribution uniforme en volume à différents étalements ; (b) Variation de l'anisotropie calculée entre 0° et 90° en fonction de l'étalement s .

Il est possible d'associer un tenseur de fabrique (Oda (1993)) d'ordre 4 à la forme bimodale de $P(\theta)$. La symétrie de la distribution permet de décomposer ce tenseur en un produit de deux tenseurs ortho-axiaux d'ordre 2. En pratique, cela revient à considérer le tenseur de fabrique F calculé pour les directions entre 0° et 90° , ou entre 90° et 180° . Nous avons alors, par définition $F_{ij} = \frac{1}{N_c} \int_0^{90} n_i n_j$ où n_i et n_j désignent les composantes $n_x = \cos(\theta)$ et $n_y = \sin(\theta)$ des directions de contact. L'anisotropie a_c est alors donnée par $a_c = 2(F_1 - F_2)$ où F_1 et F_2 sont les valeurs propres du tenseur de fabrique. La figure 2(b) montre la variation de a_c en fonction de s pour différentes granulométries. On peut remarquer que l'anisotropie diminue avec l'étalement. Deux points d'inflexion proches de $s \simeq 0,2$ et $s \simeq 0,4$ pour la distribution uniforme en volume sont mis en évidence. Les valeurs élevées de a_c à faible étalement reflètent un ordre d'empilement correspondant notamment à des configurations locales peu denses essentiellement constituées de cellules carrées. La diminution non linéaire de l'anisotropie avec s correspond à la disparition progressive de l'ordre dans l'échantillon. On constate aussi sur la figure 2(b) deux transitions qui sont liées à l'effet des exclusions stériques pour une polydispersité croissante. Bien que la coordinance reste égale à 4, le réseau des contacts évolue fortement avec s .

La connectivité P_q reflète bien cette évolution (Fig 3(a)). On retrouve la signature d'un milieu ordonné pour les étalements très faibles où la quasi-totalité des particules s'empile en un réseau à quatre contacts par particule, i.e. $P_4 \simeq 1$. Lorsque l'étalement augmente, P_4 diminue au profit de P_3 et P_5 . Ce gain de particules à 3 et 5 contacts correspond à une augmentation de la compacité du système sachant que le système dans la limite monodisperse est lâche par construction. A $s = 0,2$, on observe une "bifurcation" entre P_3 et P_5 , et une diminution de P_5 en faveur de P_6 et P_2 à partir de $s = 0,4$. La fraction P_2 représente les particules supportées par deux particules, mais qui n'en supportent aucune. Cette catégorie de particules contribue directement au remplissage des pores.

La figure 3(b) montre l'évolution de la compacité ρ en fonction de l'étalement. On constate que, quelle que soit la forme de la distribution granulométrique, ρ augmente d'abord avec s , puis atteint un niveau constant pour $s \simeq 0,2$. Il est remarquable que, pour s compris entre 0,2 et 0,4, la compacité soit indépendante de ρ . La première transition observée sur cette figure, dont on a vu la signature sur la variation de l'anisotropie (Fig 2(b)), traduit le passage de l'ordre vers un désordre global. La deuxième transition correspond à un étalement tel que la taille des plus petites particules leur permet de s'insérer dans l'espace poral laissé libre par les plus grosses particules. Au niveau du plateau de compacité, chaque particule déposée apporte la même pro-

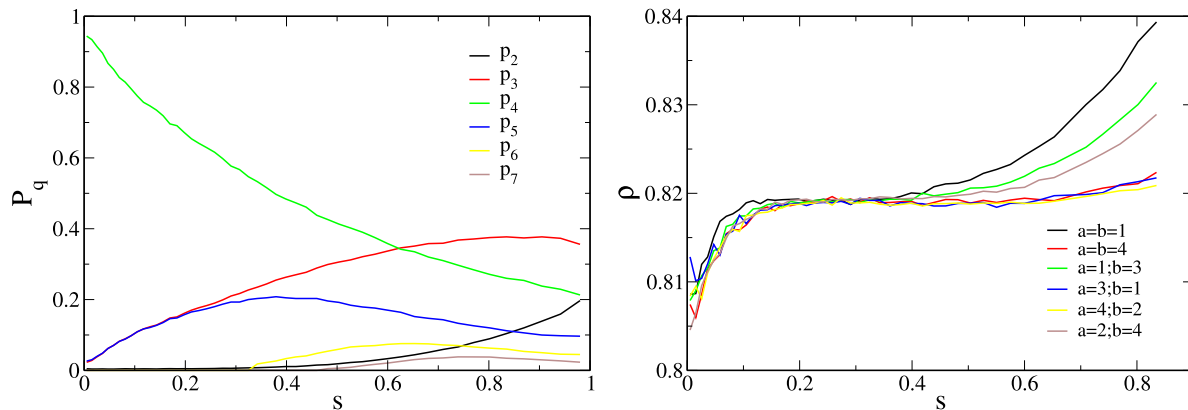


FIG. 3 – (a) Evolution de la connectivité en fonction de l'étalement s pour la distribution uniforme en volume. (b) Variation de la compacité en fonction de l'étalement s .

portion de solide et de vide. L'augmentation significative de ρ au-delà de $s = 0,4$ indique qu'il faut une quantité raisonnable de grosses particules pour créer des pores et suffisamment de petites particules pour bien remplir ces pores. Pour d'autres valeurs de paramètres de forme a et b , on observe le même type de comportement, mais les transitions ont lieu pour des étalements différents. La distribution uniforme en volume répond le mieux à ces critères car c'est la distribution pour laquelle on atteint la compacité la plus élevée quelque soit l'étalement.

5 Conclusions

Dans cette étude, nous avons associé un modèle de distribution granulométrique à une procédure géométrique de dépôt afin d'étudier l'influence de la polydispersité sur la texture de milieux granulaires. Nous avons montré comment l'étalement granulométrique pour différents paramètres de forme influence la texture en termes d'anisotropie, de connectivité, de compacité et de distribution radiale. Tous ces descripteurs de la texture reflètent deux transitions en fonction de l'étalement. La première transition correspond à la disparition de l'ordre global dans le système tandis que la deuxième traduit l'effacement de l'ordre à l'échelle locale conduisant à une compacité fortement croissante. Contrairement au paramètre d'étalement, les paramètres de forme influent peu et de manière seulement quantitative sur la texture. La distribution uniforme en volume semble conduire à des valeurs de compacité et de coefficient d'uniformité C_u les plus élevées.

Références

- Bratberg I., Radjaï F., Hansen A. 2002 Dynamic rearrangements and packing regimes in randomly deposited two-dimensional granular beds *Physical Review E* **66** 031303
- Goddard J.D, Didwania A.K. 1998 Computations of dilatancy and yield surfaces for assemblies of rigid frictional spheres *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* **51** 15-43
- Herrmann H.J., Baram R.M, Wackenhut M. 2003 Searching for the perfect packing *Physica A* **330** 77-82
- Mitchell J.K., Soga K. 2005 Fundamentals of soil behavior. pp. 83-109, John Wiley New Jersey
- Oda 1993 Inherent and induced anisotropy in plasticity theory of granular soils *Mechanics of Materials* **16** 1-2, 35-45