Texture et comportement des matériaux granulaire fortements polydisperses

C. VOIVRET, J.-Y. DELENNE, M.S. EL YOUSSOUFI, F. RADJAÏ

LMGC - UMR 5508, Université Montpellier 2 CC048 Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5

Résumé :

Cet article est consacré à la modélisation et à l'étude numérique des matériaux granulaires fortement polydisperses. Dans cet article on s'intéressera à l'influence, en termes d'étalement et de courbure, de la distribution de tailles sur la texture granulaire et sur le comportement mécanique au cours d'un cisaillement quasi-statique. La génération de distributions de tailles est réalisée par une méthode assurant la représentativité statistique et volumique de chaque classe de tailles de particules. Une méthode de construction géométrique est employée pour construire de grands échantillons denses dont la texture fait l'objet d'une étude systématique en fonction de la distribution de taille. Ces échantillons sont ensuite soumis à un cisaillement simple périodique par la méthode en éléments discrets de Dynamique des Contacts. On montre alors que : 1) La distribution uniforme par fraction volumique des particules fournit les niveaux de compacité les plus élevés ; 2) La résistance au cisaillement dans l'état stationnaire est indépendante de la polydispersité ; 3) Une analyse détaillée de la texture et du réseau de forces montre que cette propriété résulte d'une compensation mutuelle entre les anisotropies de contact et de longueurs de vecteurs branches, ainsi que de l'établissement des chaînes de forces fortes sur les plus grosses particules ; 4) En présence d'adhésion entre les particules, la cohésion de Coulomb augmente avec l'étalement granulométrique.

Abstract :

This work is devoted to the numerical modeling of highly polydisperse granular materials in view of investigating the texture and mechanical behavior in quasi-static shearing. The polydispersity is modeled in terms of size span and curvature of the particle size distributions. A method is proposed to generate representative size distributions both in number and volume of size classes, and the accessible polydispersity parameters are determined for tractable number of particles. A geometrical method is used to construct large samples and to study the resulting texture in a systematic manner as a function of size distribution. These samples are then subjected to simple shear with periodic boundary conditions by means of the contact dynamics method. We show that : 1) The highest level of solid fraction corresponds to uniform distribution by particle volume fractions; 2) The shear strength in the steady state is independent of polydispersity; 3) A detailed analysis of the texture and force transmission indicates that this property results from the mutual compensation between the anisotropies of contact orientations and branch-vector lengths, and also from the fact that the strong force chains are mainly captured by the largest particles; 4) In the presence of adhesion between particles, the Coulomb cohesion increases with size span.

Mots clefs : matériaux granulaires, polydispersité, Dynamique des Contacts, cisaillement,

1 Introduction

La distribution des tailles de particules, ou polydispersité, est une des caractéristiques fondamentales des matériaux granulaires [1]. Malgré son impact évident sur le comportement mécanique, notamment à travers son effet sur la texture granulaire [2, 3, 4], l'influence de la polydispersité n'a jamais fait l'objet d'études systématiques. En pratique, ce manque peut s'expliquer par les difficultés à isoler les effets de la polydispersité parmi d'autres effets tels que la forme des particules ou encore les effets de surfaces. Cette limitation peut être dépassée dans le cadre d'une modélisation numérique. Cependant, dans le cas polydisperse, ce type d'approche est pertinente si la représentativité statistique de chaque classe de tailles est assurée.

Dans cet article, on propose une approche en éléments discrets afin d'étudier l'effet de la polydispersité sur le comportement mécanique et sur la microstructure dans une configuration 2D avec des particules circulaires. Cette approche se décompose en deux étapes : 1) une approche géométrique permettant de construire des échantillons denses et statistiquement représentatifs et 2) une approche dynamique où les échantillons construits sont soumis à un cisaillement par la méthode de Dynamique des Contacts (DC).



FIG. 1 – (a) Compacité ρ en fonction de l'étalement *s* pour quelques valeurs des paramètres de forme *a* et *b*. (b) Valeurs de frottement interne $\sin \varphi^*$ mesurées et prédites par l'équation 4 en fonction de l'étalement *s*. Les barres d'erreurs indiquent l'écart type des fluctuations de contrainte dans l'état stationnaire.

2 Approche géométrique

La modélisation numérique de distribution granulométriques fortement polydisperses requiert, d'une part, un modèle de distribution de tailles générique et, d'autre part, une méthode pour générer un ensemble statistiquement représentatif de diamètres à partir de ce modèle avec un minimum de particules. Ce dernier point est particulièrement important dans une approche en éléments discrets où le nombre de particules traitables est limité. Nous avons donc proposé une méthode, basée sur des critères de représentativité explicites, capable d'estimer le nombre de particules nécessaire pour représenter au mieux une distribution de taille continue par un ensemble discret de tailles de particules [4].

La distribution des tailles est représentée par la distribution des volumes cumulés (équivalent à la courbe granulométrique cumulée) définit comme le volume cumulé h(d) en fonction du diamètre des particules d. Le modèle générique de distribution, basé sur la forme cumulée de la distribution β , donne accès à de nombreuse formes de distributions avec seulement deux paramètres a et b. L'étalement de la distribution est représenté par $s = (d_{max} - d_{min})/(d_{max} + d_{min})$ où d_{min} et d_{max} sont, respectivement, le plus petit et le plus grand diamètre. Une distribution monodisperse correspond à s = 0 et la limite $s \simeq 1$ correspond à une distribution "infiniment" polydisperse.

Pour assembler les particules générées en échantillons denses, on utilise une méthode de dépôt basé sur des règles d'empilements géométriques [5]. Chaque particule est placée, au contact avec deux des particules précédemment déposées, à la position la plus basse possible. Cette méthode, optimisée pour les distributions polydisperses, est implémentée dans un code de calcul intégrant une condition de périodicité dans la direction horizontale. L'efficacité numérique de cette approche à permis de réaliser une étude systématique de l'influence de la polydispersité sur le remplissage d'espace et sur les propriétés de texture de grands échantillons. Les échantillons ainsi construits ne sont pas mécaniquement stables mais en sont suffisamment proches pour qu'une relaxation dynamique n'entraîne que de faibles réarrangements de la microstructure. Nous avons aussi vérifier que cette de méthode ne génère pas de ségrégation de taille, même pour les plus grandes valeurs d'étalement.

La figure 1(a) montre l'évolution de la compacité ρ en fonction de l'étalement s pour quelques valeurs des paramètres de formes a et b. La diminution initiale à faible valeurs d'étalement (s < 0, 1) correspond à la transition ordre-désordre classiquement observée en 2D pour des distribution quasi-monodisperses ($d_{min} \simeq d_{max}$). A plus grandes valeurs de s (0, 1 < s < 0, 4), la compacité augmente faiblement avec l'étalement jusqu'à s < 0, 4. Au-delà, l'étalement est suffisant pour autoriser l'insertion des plus petites particules entre les plus grosses particules constituant un réseau désordonné à "maille" carré. Ainsi le remplissage croissant des pores par des particules de plus en plus petites se traduit par une augmentation rapide de la compacité en fonction de l'étalement.

On peut alors mettre en évidence deux conditions nécessaires pour remplir efficacement l'espace : 1) une distribution étendue des tailles de particules correspondant à des valeurs élevées de s (s > 0, 4 dans nos simulations), 2) un nombre important de petites particules, controllé dans notre modèle par les paramètres de formes a et b. D'après la figure 1(a), ces conditions sont satisfaites de manière optimale pour la distribution uniforme par fraction volumique (a = b = 1). Cette propriété de remplissage d'espace reste valide pour des échantillons stabilisés par des simulations dynamiques.

3 Approche dynamique

Les simulations numériques de cette étude ont été réalisées en utilisant la méthode de Dynamique de Contacts [6, 7]. Cette méthode est basée sur un schéma de résolution implicite et inconditionnellement stable. Dans le cas de systèmes polydisperses, ce type de résolution est choix judicieux, notamment d'un point de vue du



FIG. 2 – Vue d'un échantillon fortement polydisperse avec un étalement s = 0.96. Les particules flottantes, exclues du réseau de force sont figurées en blanc. La largeur des lignes représentant les forces de contacts est proportionnelle à la force normale.

temps de calcul. En effet, un schéma explicite nécessite un découpage temporel nettement plus fin, ajusté sur les plus petites particules, pour en assurer la stabilité numérique.

Les échantillons sollicités comportent 10^4 particules issues d'une distribution uniforme par fraction volumique (a = b = 1) dont l'étalement varie entre s = 0, 2 et s = 0, 96. Les échantillons, construits par la méthode géométrique, sont soumis à une pression verticale constante entraînant une relaxation jusqu'à l'obtention d'un état d'équilibre statique. Afin d'obtenir des échantillons quasi-isotropes dans l'état relaxé, le coefficient de frottement μ et la gravité sont pris égal à zéro. Les échantillons relaxés sont ensuite soumis à un cisaillement quasi-statique. Durant le cisaillement, le coefficient de frottement est égal à $\mu = 0, 4$ tandis que la gravité reste désactivée.

Le tenseur de contrainte calculé dans un volume V est donné par $\sigma = \langle f^c \ell^c \rangle / V$ pour c ($c \in V$) et à partir de la force de contact f^c et du vecteur branche ℓ^c joignant les centre des particules en contacts. La contrainte moyenne est donnée par $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ où σ_1 et σ_2 sont les contraintes principales. On définit aussi une contrainte déviatorique $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$. Au cours du cisaillement, la contrainte de cisaillement q augmente brusquement jusqu'à une valeur élevée avant de décroître vers une valeurs quasi-constante dans l'état stationnaire. De plus, tous les échantillons se dilatent au cours du cisaillement et tendent vers une compacité constante dans l'état stationnaire mais dépendante de l'étalement s. La contrainte de cisaillement stationnaire q^*/p caractérise la résistance au cisaillement du matériau. D'après de modèle de Mohr-Coulomb, la résistance au cisaillement résulte de deux contributions : 1) l'angle de frottement interne φ^* et 2) la cohésion de Coulomb c. En 2D, ces deux paramètres sont reliés à q^* par [1] :

$$q^* = p\sin\varphi^* + c\cos\varphi^*. \tag{1}$$

Dans nos échantillons, la cohésion de Coulomb est nulle puisqu'il n'y a aucune cohésion entre les particules [8]. Dans ces conditions, on constate sur la figure 1(b) que φ^* est pratiquement indépendant de l'étalement granulométrique. Ce résultat, plutôt contre intuitif, montre que l'état de compacité, qui est ici une fonction croissante de l'étalement s, n'a que très peu d'influence sur la résistance au cisaillement.

La figure 2 montre une vue du réseau de forces pour un étalement s = 0,96. On observe clairement que les chaînes de forces fortes sont préférentiellement portés par les plus grosses particules de l'échantillons. Simultanément, un grand nombre de petites particules sont exclues du réseau de forces. En d'autres termes, les grosses particules capture les chaînes de forces les plus fortes au détriment des plus petites. Ce phénomène s'amplifiant avec l'étalement, les échantillons deviennent de plus en plus inhomogène du point du vue de la transmission des forces. Ce comportement peut être illustré par la fonction de densité de probabilité (probability density function : pdf) des forces normales qui est montrée figure 3 pour différentes valeurs de s [9]. On observe que les pdf s'élargissent avec s et suivent une loi de puissance décroissante ($\propto f^{-\alpha}$) dans l'intervalle des forces faibles (inférieures à la force moyenne) dont l'exposant augmente avec s. Cette inhomogénité croissante



FIG. 3 – Fonctions de densité de probabilité (pdf) des forces normales $f = f_n/\langle f_n \rangle$ normalisée par la force moyenne $\langle f_n \rangle$ pour différentes valeurs d'étalement s.

des forces normales avec l'étalement contraste avec l'homogénéité croissante des échantillons en termes de remplissage d'espace.

Le réseau de force est lié au composantes de la contraintes par l'expression du tenseur de contraintes, donnée ici sous sa forme intégrale :

$$\sigma_{\alpha\beta} = n_c \int \int \int f_{\alpha}(\vec{n}) \ell_{\beta}(\vec{n}) P_{f\ell n}(\vec{f},\ell,\vec{n}) \, d\vec{f} \, d\ell \, d\vec{n} \tag{2}$$

où $P_{f\ell n}(\vec{f}, \ell, \vec{n})$ est la mesure jointe des forces \vec{f} et des vecteurs branches $\vec{\ell} = \ell \vec{n}$. A l'ordre de description le plus bas, on néglige les corrélations et on sépare la fonction de probabilité jointe en un produit de trois fonctions indépendantes $P_{f\ell n}(\vec{f}, \ell, \vec{n}) = P_f(\vec{f})P_\ell(\ell)P_n(\vec{n})$. En intégrant sur \vec{f} et ℓ on obtient :

$$\sigma_{\alpha\beta} = n_c \int_{\Omega} \langle f_{\alpha} \rangle(\vec{n}) \langle \ell_{\beta} \rangle(\vec{n}) P_n(\vec{n}) d\vec{n}$$
(3)

où Ω est le domaine angulaire d'intégration, et $\langle \ell \rangle(\vec{n})$ et $\langle f \rangle(\vec{n})$ sont les moyennes des normes des vecteurs branches et des forces en fonction de l'orientation du contact donnée par \vec{n} . En 2D, \vec{n} peut être paramétré par la direction θ du vecteur branche telle que $\vec{n} \equiv (\cos \theta, \sin \theta)$. Dans ces conditions, un modèle de transmission de contrainte se réduit au choix des fonctions $\langle \ell \rangle(\theta), \langle f \rangle(\theta)$ et $P_n(\theta)$. La force de contact \vec{f} peut être représentée par ses composantes normale et tangentielle $f_n(\theta)$ et $f_t(\theta)$.

Les quatre fonctions ci-dessus décrivent l'état général du système. Sous cisaillement, l'échantillon s'autoorganise en un état où les fonctions d'état peuvent être approchées par leur développement de fourrier à l'ordre 2 :

$$\begin{cases} P_n(\theta) = \frac{1}{\pi} \{ 1 + a_c \cos(2(\theta - \theta_c)) \} \\ \langle \ell \rangle(\theta) = \langle \ell \rangle \{ 1 + a_\ell \cos(2(\theta - \theta_\ell)) \} \\ \langle f_n \rangle(\theta) = \langle f_n \rangle \{ 1 + a_n \cos(2(\theta - \theta_n)) \} \\ \langle f_t \rangle(\theta) = \langle f_t \rangle \{ 1 + a_t \cos(2(\theta - \theta_t)) \} \end{cases}$$

où a_c , a_ℓ , a_n and a_t sont les paramètres d'anisotropie et les angles θ_c , θ_ℓ , θ_n et θ_t représentent les directions privilégiées correspondantes (voir figure 4). En général, toutes les directions privilégiées peuvent être différentes mais au cours d'un cisaillement elle tendent à suivre la direction de contrainte principale($\theta_\sigma = \theta_c = \theta_\ell = \theta_n = \theta_t$). En introduisant les developpement de Fourrier dans l'expression intégrale du tenseur de contrainte (Eq. 3) et en négligeant les produit croisés des paramètres d'anisotropie, on obtient :

$$\sin \varphi^* = \frac{q^*}{p} = \frac{1}{2}(a_c + a_\ell + a_n + a_t)$$
(4)

Le valeurs de sin φ^* prédites par cette équation et mesurées sont données figures 1(b) en fonction de s. On voit que l'équation 4 fournit une bonne approximation de l'angle de frottement quelle que soit la valeur de s. La figure 4 montre l'évolution des anisotropies en fonction de s. On constate que les anisotropies liées aux forces de contact a_n et a_t sont indépendantes de s. Cela est cohérent avec le fait que des chaînes de forces fortes qui fournissent la plus grande contribution aux anisotropies de forces, sont portées par les plus grosses particules des échantillons, quel que soit s. La décroissance de a_c traduit le fait que les plus grosses particules



FIG. 4 – Evolution des paramètres d'anisotropie en fonction de l'étalement dans l'état stationnaire. Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type des fluctuations dans l'état stationnaire. Les diagrammes polaires des distributions angulaires (symboles noir) correspondant à chaque anisotropie sont donnés pour s = 0,96 avec leur approximations (ligne rouge) de Fourrier (Eq. 3)



FIG. 5 – Evolution de la cohésion de Coulomb c normalisée par la pression moyenne p dans l'état stationnaire en fonction de l'étalement s. Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type des fluctuations dans l'état stationnaire. L'encart montre l'évolution des anisotropies dans l'état stationnaire en fonction de s.

sont entourées par un nombre croissant de petites particules qui tendent à uniformiser les directions de contacts avec s. Simultanément, l'anisotropie des longueurs intercentre a_{ℓ} augmente avec s à cause de la mobilisation croissante des grosses particules, par les chaînes de forces fortes, dans la direction de sollicitation. Un fait remarquable est que a_c et a_{ℓ} évoluent avec s tels que $a_c + a_{\ell}$ soit indépendant de s. Or, d'après l'équation 4, cette compensation entre a_c et a_{ℓ} et l'indépendance de a_n et a_t par rapport à s, implique que φ^* est indépendant de l'étalement. Par conséquent, l'indépendance de l'angle de frottement par rapport à l'étalement granulométrique apparaît comme une conséquence de la nature multi-échelle du réseau de forces. Schématiquement, les chaines de forces "cascadent" depuis les grandes échelles (grosses particules) vers les petites echelles (petites particules), et l'augmentation de l'étalement se traduit par le remplacement des grosses particules soutenant le réseau de forces fortes par une population croissante de petites particules.

Ce comportement particulier reste valide en présence d'adhésion entre les particules. A partir des échantillons relaxés, on réalise les mêmes essais de cisaillement en ajoutant une force d'adhésion constante $-f_0$ entre les particules en contact. La force d'adhésion étant réversible, l'état stationnaire est parfaitement défini ainsi que la résistance au cisaillement q^*/p le caractérisant. On montre alors que q^*/p augmente avec s tandis que φ^* garde la même valeur que dans le cas non cohésif. D'après l'équation 1, cela implique que la cohésion de Coulomb c augmente avec l'étalement comme le montre la figure 5. En menant la même analyse que précedement sur les anisotropies, on montre que la contribution majeure à la cohésion provient des anisotropies de forces a_c et a_t qui augmentent avec s en présence d'adhésion locale. En d'autre mots, l'effet de l'adhésion est amplifiée par la polydispersité.

4 Conclusion

Un résultat inattendu montré dans cette étude des matériaux granulaires fortement polydisperses est l'indépendance de l'angle de frottement interne par rapport à l'étalement granulométrique. L'origine de cette indépendance découle des interactions entre les chaînes de forces et les multiples échelles de longueurs induites par les particules de différentes tailles. Par ailleurs, nos résultats montrent qu'en présence d'interactions de cohésion, la cohésion de Coulomb augmente avec l'étalement. La phénoménologie du réseau de forces étant similaire en 2D et en 3D, on peut supposer que ces résultats restent valides en 3D.

Références

- [1] Mitchell J. K. and Soga K. Fundamentals of Soil Behavior, third edition. Wiley, 2005.
- [2] Aste T. and Weaire. D. The Pursuit of Perfect Packing. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 2000.
- [3] Herrmann H. J., Mahmoodi Baram R., and Wackenhut M. Searching for the perfect packing. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications, 330(1-2), 77–82, December 2003.
- [4] Voivret C., Radjai F., Delenne J.-Y., and El Youssoufi M. S. Space-filling properties of polydisperse granular media. Phys. Rev. E, 76(2), 021301–12, August 2007.
- [5] Visscher W. M. and Bolstreli M. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions. Nature, 239(5374), 504–507, October 1972.
- [6] Moreau J. Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials. European Journal of Mechanics A/Solids, supp.(4), 93–114, 1994.
- [7] Radjai F. Contact dynamics method. European Journal of Environmental and Civil Engineering, 12, 871–900, 2008.
- [8] Taboada A., Estrada N., and Radjai F. Additive decomposition of shear strength in cohesive granular media from grain-scale interactions. Phys. Rev. Lett., 97(9), 098302–4, September 2006.
- [9] Radjai F., Wolf D. E., Jean M., and Moreau J.-J. Bimodal character of stress transmission in granular packings. Phys. Rev. Lett., 80(1), 61–64, 1998.