

# Simulations numériques du comportement de pâtes granulaires concentrées

F. LAHMAR<sup>a,b</sup>, P.-E. PEYNEAU<sup>a,c</sup>, F. CHEVOIR<sup>a</sup>, J.-N. ROUX<sup>a</sup>

a. Laboratoire Navier, 2 allée Kepler, Cité Descartes, 77420 Champs-sur-Marne

b. Saint-Gobain Recherches, 39 quai Lucien Lefranc, BP 135, 93303 Aubervilliers cedex

c. Dépt Géotechnique, Eau et Risques, IFSTTAR, Route de Bouaye, CS4, 44341 Bouguenais cedex

## Résumé :

*On étudie des suspensions non browniennes modèles très concentrées, en régime de Stokes, par simulation numérique, en ne gardant que les interactions hydrodynamiques dominantes (lubrification) entre particules voisines. Le contact solide est possible en raison de leur rugosité de surface. L'écoulement stationnaire de cisaillement est régi par des lois de comportement analogues à celles des matériaux granulaires.*

## Abstract :

*Rheological properties of highly concentrated non-Brownian model suspensions in the Stokes régime are studied by numerical simulations, in which only the dominant hydrodynamic interactions between neighbouring particles are kept. Constitutive laws similar to those ruling granular materials apply to steady shear flows.*

**Mots clefs :** suspensions très concentrées ; frottement interne ; viscosité effective

## 1 Introduction

La modélisation des écoulements granulaires denses a récemment bénéficié de progrès substantiels, avec la formulation de relations constitutives robustes et efficaces [5], sous la forme de lois de frottement et de dilatance, qui généralisent les propriétés de l'état critique des géomécanciens [10] à des écoulements stationnaires en régime inertiel. Ces lois ont été identifiées, notamment par la simulation numérique [4], en considérant (à 2 ou 3 dimensions) un cisaillement stationnaire uniforme, comme illustré sur la figure 1, dans lequel on fixe la contrainte normale  $\sigma_{22} = P$ , en imposant un taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ . Les lois constitutives [5] sont des généralisations tensorielles des relations exprimant pour un tel écoulement de Couette la compacité  $\Phi$  et le frottement effectif  $\mu^* = \sigma_{12}/\sigma_{22}$  en fonction du nombre d'inertie  $I = \dot{\gamma}\sqrt{m/Pd^{D-2}}$  en dimension  $D$ , avec des particules de diamètre moyen  $d$  et de masse  $m$ , sous la forme [4, 8] :

$$\text{Pour } I \text{ assez faible (typiquement, } I < 0.1), \mu^* = \mu_0^* + cI^\alpha \text{ et } \Phi^{-1} = \Phi_0^{-1} + eI^\nu. \quad (1)$$

L'état critique de la mécanique des sols (en cisaillement simple), obtenu dans la limite quasi-statique,  $I \rightarrow 0$ , se caractérise par le frottement interne  $\mu_0^*$  et la compacité critique  $\Phi_0$ .

Le propos de cette communication est de dégager le même type de loi constitutive pour l'écoulement d'une suspension très dense, en régime de Stokes, dans laquelle les grains solides interagissent par contact s'ils parviennent à se toucher, mais également par des « quasi-contacts », interstices de faible épaisseur transmettant les forces hydrodynamiques dominantes (cf. fig. 1). C'est l'approche adoptée dans la réf. [3], ici poursuivie par des moyens numériques, pour des systèmes modèles décrits au § 2, dont on simule l'écoulement de cisaillement simple sous contrainte normale contrôlée comme sur la figure 1. Les résultats sont rapidement présentés au § 3 pour des billes sans frottement au contact et pour un modèle de disques 2D avec contacts frottants au § 4. Le § 5 est une brève synthèse.

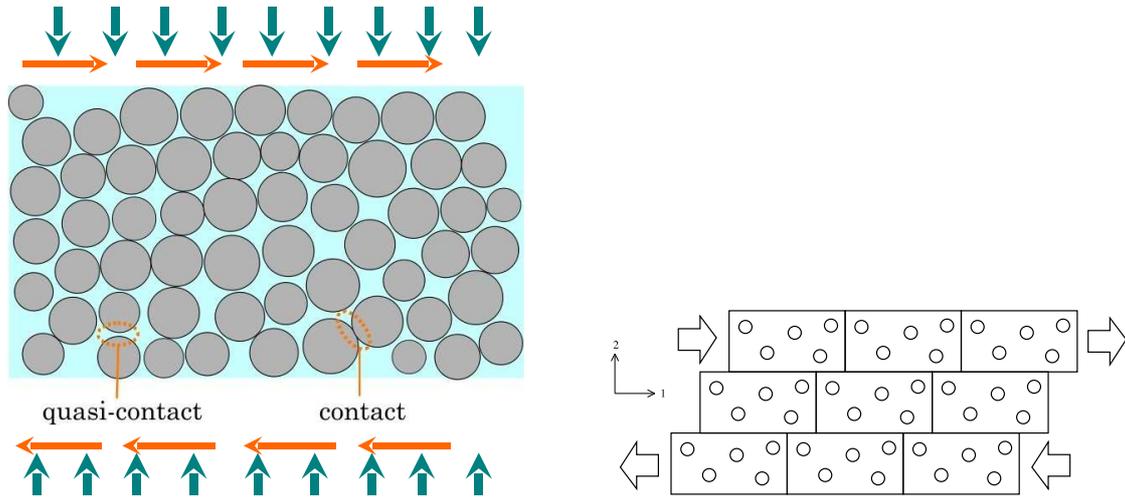


FIG. 1 – Écoulements de cisaillement stationnaires uniformes étudiés. Les conditions aux limites, périodiques avec translation de Lees-Edwards (schéma de droite), imposent un écoulement de Couette avec gradient  $\dot{\gamma} = -\partial v_1 / \partial x_2$  (flèches horizontales rouges à gauche) et telles que la hauteur de la cellule s’ajuste pour maintenir une contrainte normale  $\sigma_{22}$  constante (flèches verticales vertes).

## 2 Matériaux modèles

Nous considérons des échantillons de  $N$  billes (sphères identiques de diamètre  $d$ ) ou disques (distribution uniforme des diamètres entre  $0,7d$  et  $1,3d$ ) dans un fluide newtonien incompressible de viscosité  $\eta$ , et nous plaçons dans la limite des faibles nombres de Reynolds (régime de Stokes), en écrivant que la somme des forces (et moments) extérieurs  $\mathbf{F}^e$ , hydrodynamiques  $\mathbf{F}^H$  et de contact  $\mathbf{F}^C$  est nulle, égalité impliquant des vecteurs de dimension égale au nombre de degrés de liberté.

### 2.1 Interactions

Adoptant les hypothèses de Ball et Melrose [6, 2] (qui sont également celles de la réf. [7] dans le contexte du compactage) nous ne gardons que les interactions hydrodynamiques couplant les grains proches voisins (distance entre surfaces  $< h_{\max}$ ), de sorte que la *matrice de résistance hydrodynamique*  $\underline{\underline{\Xi}}$  définie par la relation de  $\mathbf{F}^H$  aux vitesses  $\mathbf{V}$ ,  $\mathbf{F}^H = -\underline{\underline{\Xi}} \cdot \mathbf{V}$ , a la même structure creuse que la matrice de raideur associée à un réseau de contacts. Par ailleurs l’effet de lubrification [2] attribue dans le bloc  $\underline{\underline{\Xi}}_{ij}$ , associé aux grains  $i$  et  $j$  séparés par la distance  $h_{ij}$ , au terme  $\xi_N(h_{ij})\mathbf{n}_{ij} \otimes \mathbf{n}_{ij}$  couplant force et vitesse relatives normales ( $\mathbf{n}_{ij}$  est le vecteur unitaire normal aux surfaces), la forme

$\xi_N(h_{ij}) = -\frac{3\pi\eta R_{ij}^2}{2h_{ij}}$ , qui diverge dans la limite des faibles interstices. (Ici  $R_{ij}$  se déduit des rayons

$R_i$  et  $R_j$  = par  $2R_i R_j / (R_i + R_j)$ ). Suivant [6], on ne garde que ces termes dominants dans  $\underline{\underline{\Xi}}$  pour des grains non frottants, pour les paires de voisins telles que  $h_{ij} < h_{\max}$  avec une certaine distance de coupure  $h_{\max}$ . En présence de frottement on introduit de surcroît des couplages hydrodynamiques tangentiels, non singuliers ou divergeant au pire logarithmiquement pour  $h_{ij} \rightarrow 0$  [2]. En principe, ce terme de lubrification en  $1/h$  interdit tout contact entre surfaces solides en un temps fini. Toutefois [6], dans une suspension cisailée avec ce modèle apparaissent très rapidement des interstices si minces ( $h < 10^{-6}d$ ) que le modèle s’en trouve dépourvu de sens physique. Dans la pratique, la lubrification idéale, résultat de l’hydrodynamique macroscopique entre deux surfaces parfaitement lisses, ne peut pas décrire les interstices si minces que la rugosité des surfaces entre en jeu. Des contacts entre aspérités sont alors possibles. Un modèle simple consiste à adoucir la singularité de  $\xi_N(h)$  comme indiqué sur la figure 2, en remplaçant la courbe par sa tangente pour  $h \leq h_{\min}$ , puis en laissant  $\xi_N(h)$  constant dans les cas, désormais possibles, de grains en contact ( $h \leq 0$ ). S’il y a lieu, on supprime de façon similaire la divergence logarithmique des autres termes de  $\underline{\underline{\Xi}}_{ij}$ . Et en cas de contact, on modélise les forces de contact comme dans les matériaux granulaires secs [4, 8], en introduisant l’élasticité normale [8], et

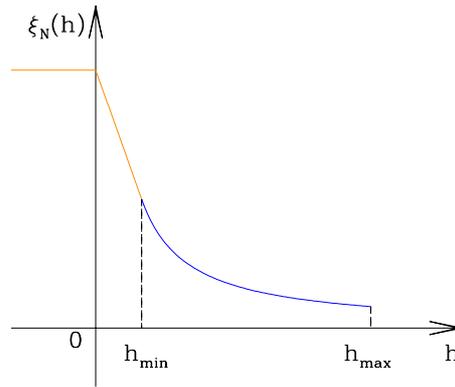


FIG. 2 – Coefficient  $\xi_N$  de la matrice de résistance hydrodynamique fonction de l'épaisseur d'interstice  $h$  : coupure à  $h_{\max}$ , régularisation de la singularité en  $1/h$  pour  $h < h_{\min}$ .

éventuellement l'élasticité tangentielle et le frottement [4]. On fait alors l'hypothèse simple d'additivité des forces de contact et hydrodynamiques.

## 2.2 Analyse dimensionnelle, forme des relations constitutives.

Étant donné la contrainte imposée  $P$  ( $= \sigma_{22}$ ), l'élasticité des contacts conduit à définir la raideur sans dimension  $\kappa$  [4, 8] telle que la déflexion élastique typique des contacts soit  $\propto \kappa^{-1}$  (sous l'effet de forces d'ordre  $Pd^{D-1}$ ). La limite  $\kappa \rightarrow \infty$  correspond aux grains rigides indéformables, et l'observation suggère qu'elle est approchée en bonne approximation pour  $\kappa \geq 10^4$ . Les sollicitations introduisant les paramètres de contrôle  $P$  et  $\dot{\gamma}$ , on définit un *nombre visqueux* – analogue du nombre inertiel

– par  $\mathcal{V} = \frac{\eta \dot{\gamma}}{P}$ .  $\mathcal{V}$  peut être vu comme le rapport du temps d'écrasement d'un interstice visqueux transmettant la force  $Pd^{D-1}$ , soit  $\eta/P$ , au temps de cisaillement  $1/\dot{\gamma}$ . La limite  $\mathcal{V} \rightarrow 0$  représente l'approche de la déformation quasi-statique, pour laquelle le système transite par des états où un réseau de contacts (ou de quasi-contacts avec des forces hydrodynamiques répulsives [7]) porte des forces équilibrant le chargement. On doit retrouver les paramètres  $\mu_0^*$  et  $\Phi_0$  de l'état critique dans cette limite. On identifiera donc des lois analogues aux relations (1), donnant  $\mu^*$  et  $\Phi$  fonctions de  $\mathcal{V}$  au lieu de  $I$ , avec des coefficients  $\alpha, c, e, \nu$  différents. Pour traduire ces résultats sous la forme plus classique d'une viscosité effective  $\eta$  fonction de  $\Phi$ , il suffit d'écrire  $\frac{\eta}{\eta_0} = \frac{\mu^* P}{\mathcal{V}}$ . À noter que dans la limite  $\kappa \rightarrow \infty$  le rapport  $\eta/\eta_0$  à  $\Phi$  donné ne peut pas dépendre de  $\dot{\gamma}$  (car le taux de cisaillement n'entre dans aucun rapport adimensionné des paramètres du problème).

## 3 Résultats 3D : billes non frottantes

Les simulations de systèmes 3D constitués de billes lubrifiées identiques de diamètre  $d$  ont été menées à bien sur des échantillons de 256 à 1372 particules, avec un paramètre de raideur  $\kappa = 10^5$ , une coupure inférieure de la loi de lubrification (liée aux aspérités de surface)  $h_{\min} = 10^{-4}d$  et une coupure supérieure  $h_{\max}/d$  de 0,1 ou 0,3. Les mesures de  $\sigma_{12}$ , dont on déduit le frottement effectif  $\mu^* = \sigma_{12}/P$ , de la compacité  $\Phi$  et d'autres caractéristiques (microstructure) sont prises sur un intervalle de déformation  $\gamma$  de quelques dizaines au moins, en s'assurant que le gradient de vitesse reste homogène (pas de localisation du cisaillement). On vérifie la stationnarité de l'écoulement et on obtient des barres d'erreurs par la « méthode des blocs de données » [1]. La figure 3 montre les résultats obtenus pour  $\mu^*$  et  $\Phi$ . On voit l'approche graduelle des conditions critiques quasi-statiques  $\mu_0^* \simeq 0,1$  et  $\Phi_0 \simeq 0,64$ , même s'il faudrait atteindre des  $\mathcal{V}$  encore plus faibles pour faire apparaître plus clairement ces limites. La figure 4 donne la viscosité effective, que l'on voit graduellement diverger à l'approche de  $\Phi_0$  (sans que l'on soit à même de dégager un comportement asymptotique clair). La comparaison des conditions  $P$  imposée et  $\Phi$  imposée montre bien que les fluctuations de contrainte dans le second cas sont considérablement plus importantes que les fluctuations de densité dans le premier, tandis que

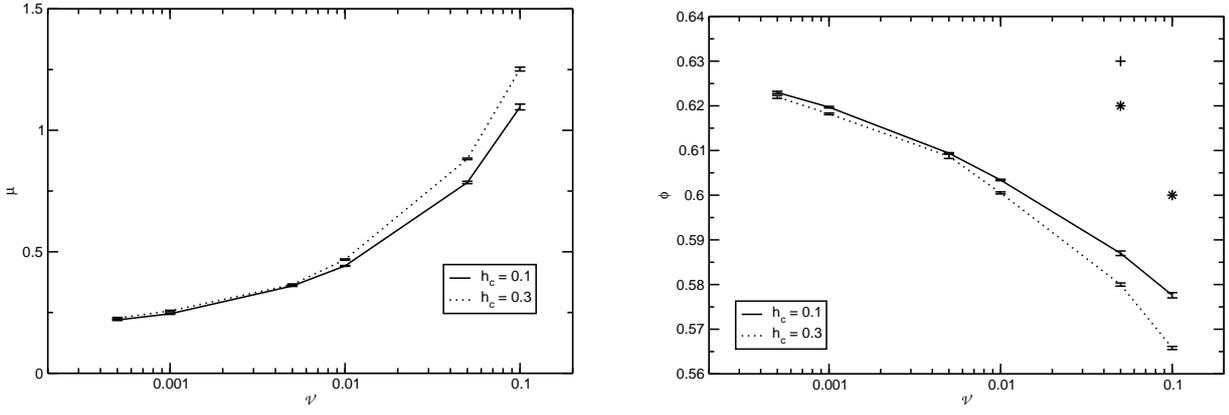


FIG. 3 – Frottement interne  $\mu^*$  (à gauche) et compacité  $\Phi$  (à droite) fonctions du nombre visqueux  $\mathcal{V}$ .

le frottement effectif se comporte de la même façon. Elle souligne l'avantage de notre procédure de simulation par rapport aux calculs classiques à volume contrôlé [9], qui sont confrontés, surtout pour les échantillons de taille modeste [6] au « blocage » apparent du système (pic de contraintes). Enfin, sur les figures 3 et 4, la coïncidence des résultats à petit  $\mathcal{V}$  pour les deux valeurs de  $h_{\max}$  choisies justifie que l'on néglige les termes non singuliers dans la matrice  $\underline{\underline{\Xi}}$ . Des difficultés d'ordre numérique (matrices

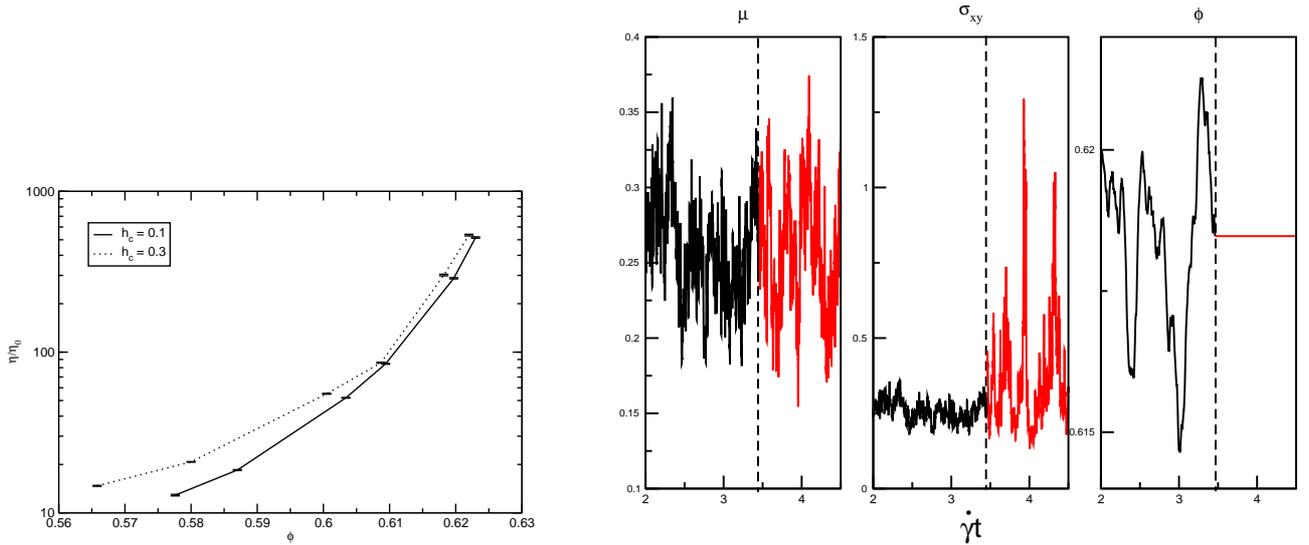


FIG. 4 – À gauche : rapport de la viscosité effective à celle du fluide interstitiel,  $\eta/\eta_0$  fonction de  $\Phi$ . À droite : 3 graphes comparent les simulations à contrainte  $\sigma_{22}$  imposée (en noir) et à volume imposé (en rouge), pour  $\mu^*$ ,  $\sigma_{12}$  et  $\Phi$ . Pour la valeur de  $\dot{\gamma}t$  correspondant à la verticale en pointillés, on fixe  $\Phi$  à sa valeur moyenne dans les calculs précédents à  $P$  imposée.

mal conditionnées, imprécision des algorithmes) limitent, dans nos calculs (pour le choix exigeant de  $h_{\min} = 10^{-4}d$ , motivé par l'approche du système lubrifié idéal), la proximité de la densité limite  $\Phi_0$ , correspondant aux petits nombres  $\mathcal{V}$ , qu'il est possible d'atteindre en un temps raisonnable (même si l'approximation retenue et la simulation à contrainte normale imposée permettent d'en approcher plus loin que la littérature récente [9]).

## 4 Résultats 2D : disques frottants

Afin de mieux mettre en évidence l'approche du même état critique pour les grains secs ( $I \rightarrow 0$ ) et pour les pâtes modèles ( $\mathcal{V} \rightarrow 0$ ), et aussi pour traiter du cas plus réaliste de grains frottants, nous

avons simulé des systèmes de 896 grains en 2D, avec la même loi de lubrification qu'en 3D, mais le coefficient de frottement  $\mu = 0,3$  aux contacts,  $\kappa = 10^4$ ,  $h_{\max}/d = 0,5$  et les valeurs  $10^{-2}$  et  $10^{-4}$  pour  $h_{\min}/d$ . Nous avons également simulé les écoulements de grain secs quasi-rigides ( $\kappa = 10^4$ ) analogues

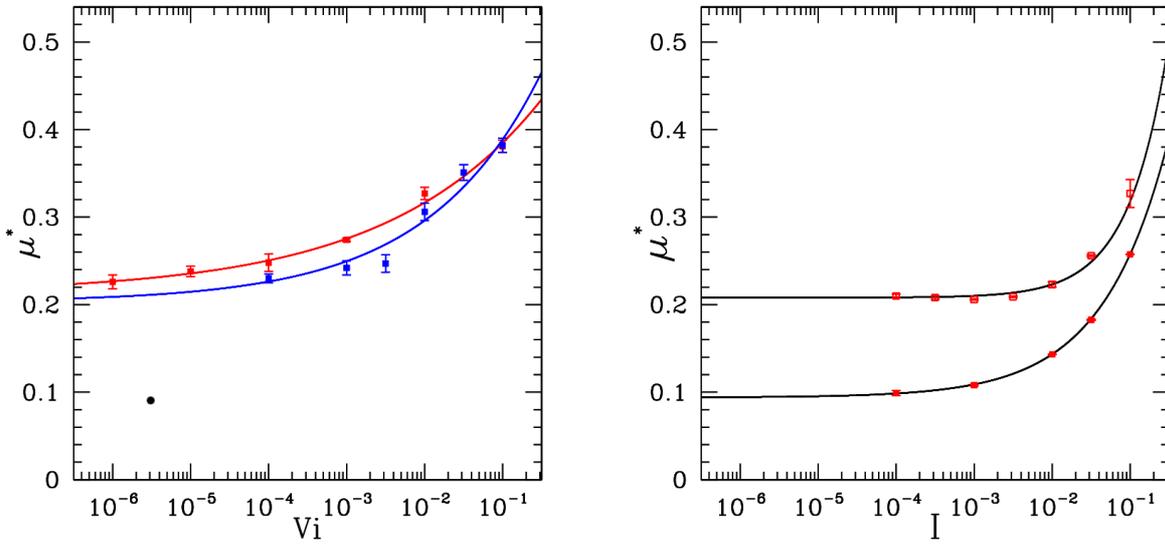


FIG. 5 – Frottement effectif  $\mu^*$  fonction de  $\mathcal{V}$  (à gauche) dans la suspension modèle, pour  $h_{\min} = 10^{-2}d$  (courbe rouge) et  $h_{\min} = 10^{-4}d$  (en bleu). À droite :  $\mu^*$  fonction de  $I$  dans le matériau granulaire sec, pour le même frottement intergranulaire  $\mu = 0,3$  (en haut) et pour  $\mu = 0$  (en bas). Les courbes continues ajustent les points par les relations (1) ou leurs versions visqueuses.

( $\mu = 0,3$ ). L'observation des figures 5 et 6 permet de conclure que l'on approche comme prévu du même état critique dans la limite quasi-statique. On remarque aussi que l'approche de l'état critique des

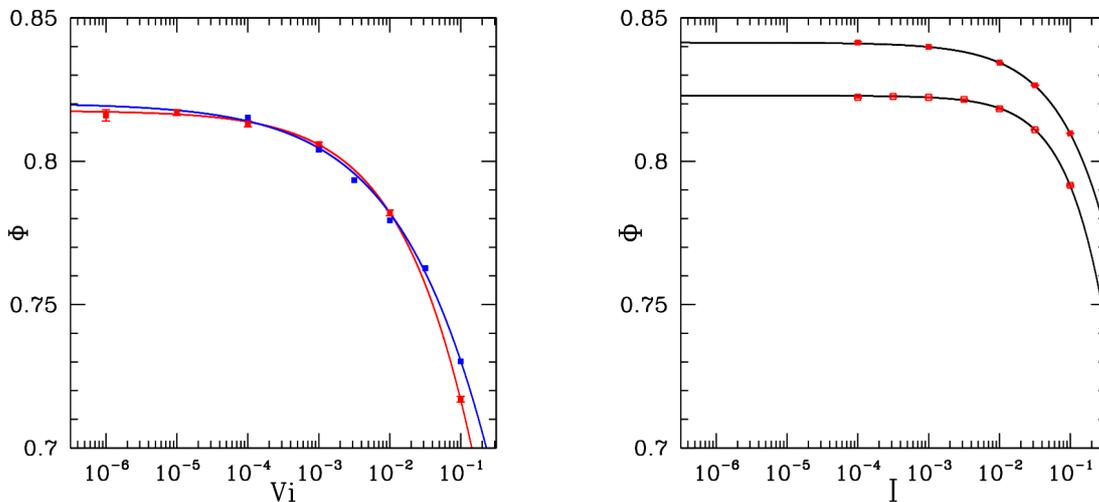


FIG. 6 – Analogue de la figure 5 pour la compacité fonction de  $\mathcal{V}$  à gauche, de  $I$  à droite.

grains (secs) non frottants est beaucoup plus lente (ce qui peut expliquer les difficultés des simulations de billes lubrifiées du § 3). Les tableaux 1 donnent les valeurs des paramètres des lois de type 1 qui ajustent au mieux les données. Il apparaît que les paramètres des lois de puissance exprimant l'écart à la limite quasi-statique diffèrent entre les grains secs et les pâtes, et dépendent également pour ces dernières du niveau de rugosité  $h_{\min}/d$ .

Pâte lubrifiée ( $\mu = 0,3$ )						
$h_{\min}/d$	$\mu_0^*$	$\alpha$	$c$	$\Phi_0$	$\nu$	$e$
$10^{-2}$	$0.213 \pm 0.007$	$0.22 \pm 0.02$	$0.285 \pm 0.005$	$0.817 \pm 0.002$	$0.49 \pm 0.01$	$0.530 \pm 0.011$
$10^{-4}$	$0.203 \pm 0.010$	$0.37 \pm 0.03$	$0.30 \pm 0.05$	$0.820 \pm 0.003$	$0.40 \pm 0.02$	$0.376 \pm 0.012$
Assemblage granulaire sec						
$\mu$	$\mu_0^*$	$\alpha$	$c$	$\Phi_0$	$\nu$	$e$
0.3	$0.208 \pm 0.002$	$0.81 \pm 0.03$	$0.79 \pm 0.10$	$0.8228 \pm 4.10^{-4}$	$0.87 \pm 0.02$	$0.356 \pm 0.02$
0	$0.094 \pm 0.002$	$0.52 \pm 0.01$	$0.54 \pm 0.01$	$0.8416 \pm 3.10^{-4}$	$0.67 \pm 0.01$	$0.213 \pm 0.004$

TAB. 1 – Meilleurs paramètres pour les éqs. 1, sous forme inertielle ou visqueuse, pour les grains secs et les pâtes étudiés.

## 5 Quelques conclusions.

Nos simulations montrent l'intérêt de l'approche « contrainte normale imposée » dans l'étude de la rhéologie des suspensions denses : on approche alors beaucoup plus aisément de la concentration de blocage. Elles mettent particulièrement en évidence l'importance de l'état critique dans l'étude des suspensions très denses. C'est à la compacité critique que diverge, comme  $(\Phi_0 - \Phi)^{-1/\nu}$  avec nos notations, la viscosité effective. Les suspensions denses s'avèrent sensibles aux contacts intergranulaires. La question « quelle est la viscosité effective d'une suspension de billes solides identiques à la compacité  $\Phi$ , régime de Stokes ? » est dénuée de sens physique : la rhéologie de ce système dépend des contact solides, de la rugosité et du frottement des surfaces.

D'autres résultats non exposés ici concernent la microstructure – ce sont les forces de contact entre grains solides qui dominent dans la transmission des efforts à faible nombre visqueux  $\mathcal{V}$  – ou encore l'effet de forces répulsives de courte portée ou les différences de contraintes normales.

Il conviendrait de prendre en compte, dans un modèle plus complet, la partie à longue portée des interactions hydrodynamiques et les écoulements de filtration, afin de décrire les effets couplés du taux de déformation et de gradients de concentration.

## Références

- [1] M. Allen and D. Tildesley. *Computer simulations of liquids*. Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [2] R. C. Ball and J. R. Melrose. A simulation technique for many spheres in quasi-static motion under frame-invariant pair drag and Brownian forces. *Physica A*, 247 :444–472, 1997.
- [3] C. Cassar, M. Nicolas, and O. Pouliquen. Submarine granular flows down inclined plane. *Phys. Fluids*, 17, 2005.
- [4] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, and F. Chevoir. Rheophysics of dense granular materials : discrete simulation of plane shear flows. *Phys. Rev. E*, 72 :021309, 2005.
- [5] P. Jop, Y. Forterre, and O. Pouliquen. A constitutive law for dense granular flow. *Nature*, 441 :727–730, 2006.
- [6] J. R. Melrose and R. C. Ball. The pathological behaviour of sheared hard spheres with hydrodynamic interactions. *Europhys. Lett.*, 32 :535–540, 1995.
- [7] S. Ouaguenouni and J.-N. Roux. Compaction of well-coordinated lubricated granular pilings. *Europhys. Lett.*, 32 :449–453, 1995.
- [8] P.-E. Peyneau and J.-N. Roux. Frictionless bead packs have macroscopic friction, but no dilatancy. *Phys. Rev. E*, 78 :011307, 2008.
- [9] A. Sierou and J. F. Brady. Rheology and microstructure in concentrated noncolloidal suspensions. *J. Rheol.*, 46 :1031–1056, 2002.
- [10] David Muir Wood. *Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics*. Cambridge University Press, 1990.