

Analyse des autocontraintes dans un matériau granulaire humide

Vincent Richefeu, Farhang Radjaï & Moulay Saïd El Youssoufi

LMGC, UMR CNRS 5508, Cc. 048, Université Montpellier 2,
Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5, France
richefeu@lmgc.univ-montp2.fr

Résumé :

Nous présentons une analyse de la transmission des contraintes dans un matériau granulaire humide. L'étude repose sur des simulations numériques tridimensionnelles par éléments discrets. On montre que l'action de traction des ponts capillaires induit un réseau de particules autocontraintes qui s'organise sous forme de deux « phases » percolantes de pressions positives et négatives définies au niveau des particules. Des descripteurs statistiques de la microstructure et du réseau des forces sont utilisés pour caractériser la répartition des pressions. Le comportement biphasique des autocontraintes semble persister lorsque l'assemblage humide est soumis à une pression de confinement non nulle. Le nombre de liens en tension diminue et la phase négative se scinde en agrégats et en sites isolés.

Abstract :

We analyze the stress transmission in wet granular media by means of three-dimensional discrete element simulations. We show that the tensile action of capillary bonds induces a self-stressed particle network organized in two percolating "phases" of positive and negative particle pressures. Various statistical descriptors of the microstructure and bond force network are used to characterize this partition. The two-phase behavior of self-stresses persist in the wet packing when a confining stress is applied. The number of tensile bonds falls off and the negative phase breaks into aggregates and isolated sites.

Mots-clefs :

Cohésion capillaire; méthode des éléments discrets; milieux granulaires; autocontraintes.

1 Introduction

L'origine des propriétés de résistance et d'écoulement des matériaux granulaires secs, à l'échelle des particules, a fait l'objet de recherches intenses depuis une trentaine d'années. La plupart de nos connaissances actuelles sur le sujet excluent néanmoins les liens cohésifs entre les particules. Bien qu'on s'attende à de fortes similarités dues à la microstructure granulaire commune, la présence de cohésion mène à de nouveaux mécanismes qui tendent à transformer la nature du problème. Un exemple bien connu est le sable mouillé où une infime quantité d'eau affecte significativement le comportement global. Par ailleurs, les phénomènes liés à la cohésion sont d'un intérêt particulier pour les procédés de traitement (compaction, granulation...) des poudres fines. Il semble donc qu'une étude systématique de la microstructure dans les milieux granulaires cohésifs devrait ouvrir de nouvelles perspectives pour une meilleure modélisation de ces matériaux.

Dans cet article, on analyse le réseau de forces dans un assemblage granulaire humide de particules sphériques. On s'intéresse à une question fondamentale : comment les grains cohésifs se structurent pour avoir une tenue mécanique en absence de confinement ? L'assemblage peut

atteindre un état d'équilibre en présence des forces d'attraction et de répulsion élastique entre les particules sans ou avec une structure autocontrainte. Bien que les particules soient équilibrées dans les deux cas, la force d'attraction à chaque contact est exactement compensée par une force élastique répulsive dans le premier cas. Dans le second cas par contre, les contacts ne sont pas tous dans leur état équilibré à cause de contraintes géométriques d'exclusion entre les particules. Un réseau de forces en tensions et en compressions est alors formé au sein de l'assemblage. Ces forces auto-équilibrées peuvent être induites par diverses histoires de chargement comme la consolidation (Radjaï *et al.*, 2001) ou le gonflement différentiel des particules (El Youssoufi *et al.*, 2005). Dans les milieux granulaires humides dans l'état pendulaire, les autocontraintes apparaissent naturellement par l'action des ponts capillaires entre les particules suffisamment proches. On s'intéresse dans cet article à la structure de ces autocontraintes induites par les ponts capillaires.

2 Méthode numérique

On utilise la méthode de « dynamique moléculaire » tridimensionnelle avec un schéma d'intégration velocity Verlet (Allen & Tildesley, 1987). Les simulations sont réalisées par le code de calcul `tapio-K` et post-traitées à l'aide du logiciel `mgpost`¹ développé au LMGC. Les lois de force comprennent la répulsion normale, la cohésion capillaire, le frottement de Coulomb, et un amortissement normal entre les particules. La force normale se décompose en trois termes :

$$f_n = f_n^e + f_n^d + f_n^c \quad (1)$$

Le premier terme est la force de répulsion de contact qui dépend linéairement du recouvrement normal δ_n (une distance négative) entre les particules : $f_n^e = -k_n \delta_n$, où k_n est la raideur normale. Nous avons $f_n^e = 0$ lorsque les particules ne sont pas en contact, *i.e.* $\delta_n > 0$. Le second terme représente une force visqueuse d'amortissement qui dépend de la vitesse relative normale $\dot{\delta}_n$: $f_n^d = \alpha_n \sqrt{m} k_n \dot{\delta}_n$, où $m = m_i m_j / (m_i + m_j)$ est la masse réduite des particules i et j , α_n est le taux d'amortissement variant dans l'intervalle $[0, 1[$ et qui rend compte du taux de dissipation normale.

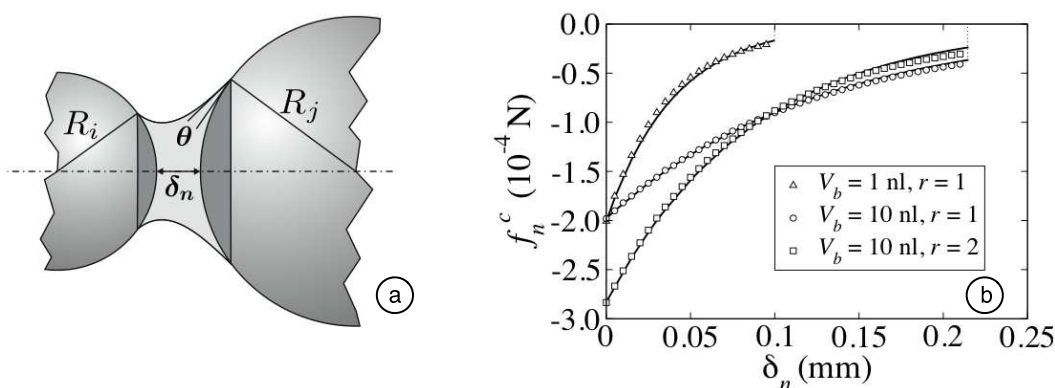


FIG. 1 – Paramètres géométriques d'un pont capillaire (a), et la force de cohésion en fonction de la distance normale pour différents volumes V_b de liquide et rapports de taille r des particules (b). Les traits pleins correspondent à l'équation (2).

Le dernier terme dans l'équation (1) est la force capillaire qui dépend des paramètres du pont liquide, à savoir la distance normale δ_n , le volume de liquide V_b , la tension superficielle du

¹www.lmgc.univ-montp2.fr/~richefeu

liquide γ_s , et l'angle de contact θ au niveau de la ligne triple (Fig. 1a). La force capillaire peut être obtenue en intégrant l'équation de Laplace-Young. Néanmoins, pour nos simulations, une expression explicite de f_n^c fonction des paramètres du pont liquide est nécessaire. On propose la forme simple suivante (Fig. 1b) :

$$f_n^c = \begin{cases} -\kappa R & \text{pour } \delta_n < 0 \\ -\kappa R e^{-\delta_n/\lambda} & \text{pour } 0 \leq \delta_n \leq \delta_n^{max} \\ 0 & \text{pour } \delta_n > \delta_n^{max} \end{cases}, \quad (2)$$

où $R = \sqrt{R_i R_j}$ est la moyenne géométrique des rayons, et λ est une échelle de longueur qui gouverne la décroissance exponentielle de la force capillaire en fonction de la distance normale (Richefeu *et al.*, 2007). Le préfacteur κ est donné par $\kappa = 2\pi\gamma_s \cos \theta$ (Bocquet *et al.*, 2002); et δ_n^{max} est la distance de rupture donnée par $\delta_n^{max} = (1 + \theta/2)V_b^{1/3}$ (Lian *et al.*, 1993). La Figure 1b montre que l'expression (2) (représentées en lignes continues) ajuste bien les valeurs issues de l'intégration de l'équation de Laplace-Young (représentées par symboles). Le pont capillaire est stable tant que $\delta_n < \delta_n^{max}$. Dans les simulations, le pont est enlevé dès que la distance de rupture est atteinte, et le liquide est redistribué aux liens appartenant aux particules proportionnellement à leurs tailles (Richefeu *et al.*, 2006). Dans cette étude, les particules sont supposées parfaitement mouillables, *i.e.* $\theta = 0$, ce qui est une bonne approximation pour de l'eau pure et des billes de verre. Pour la valeur de la force de frottement f_t , on utilise une loi de Coulomb régularisée en vitesse : $f_t = \min\{\gamma_t \|\dot{\delta}_t\|, \mu(f_n - f_n^c)\}$, où γ_t est une viscosité tangentielle, μ est le coefficient de frottement, et $\dot{\delta}_t$ est le vecteur vitesse de glissement.

Les simulations ont été réalisées avec un assemblage composé de sphères de diamètres $d = 1, 5$ et $d = 2$ mm, en quantités égales. Le système a été soumis à une pression isotrope via six parois rigides et en absence de gravité de façon à obtenir un état aussi homogène que possible. Pour la même raison, le frottement avec les parois a été choisi nul bien que leurs effets ne puissent être complètement supprimés. Le volume total d'eau n'a pas d'influence sur la valeur maximale $f_0 = \kappa R_{max}$ de la force capillaire au contact (R_{max} est le plus grand rayon des particules). Notons également que les ponts liquides sont distribués de façon homogène sur tous les espaces inter-particulaires inférieurs à la distance de rupture correspondante (Richefeu *et al.*, 2006). Avec une teneur massique de 0,007, le nombre de coordination est de l'ordre de 6.

3 Répartition spatiale des pressions de particules

Pour la description de la transmission des contraintes dans notre système, nous allons caractériser ici les inhomogénéités à l'échelle des particules. On peut montrer que le tenseur des contraintes pour une particule i est défini par (Richefeu *et al.*, 2007) :

$$(\sigma_i)_{\alpha\beta} = 6 \frac{\nu}{\pi d_i^3} \sum_{j \neq i} f_{\alpha}^{ij} \otimes r_{\alpha}^{ij}, \quad (3)$$

où ν est la compacité de l'assemblage, r^{ij} est la position du point d'action de la force f^{ij} due à l'action d'une particule j sur la particule i , et α et β désignent les composantes.

Nous considérons ici, les pressions des particules $p_i = (1/3) \text{tr} \sigma_i$. Chaque particule peut prendre une pression positive ou négative selon la nature des forces exercées par ses voisins. La Figure 2a montre la distribution des densités de probabilité des pressions de particules normalisées par une pression de référence $p_0 = f_0 / \langle d \rangle^2$. La distribution présente un pic sur la pression nulle et elle est symétrique de part et d'autre de cette pression. Chaque partie est bien approchée

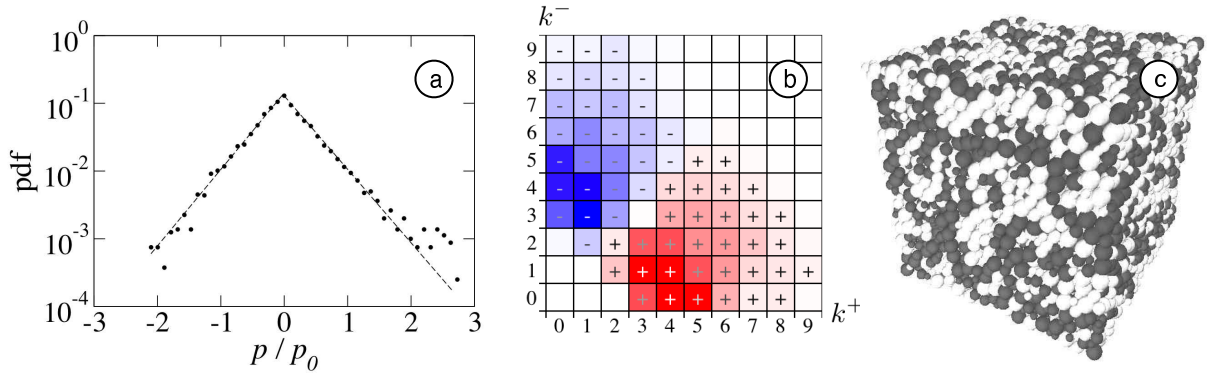


FIG. 2 – Distribution des pressions particulières : (a) Densité de probabilité (pdf) des pressions ; (b) Carte des pressions dans l'espace (k^+, k^-) ; (c) Pressions positives (noires) et négatives (blanches).

par une fonction exponentielle. Évidemment, cette forme reflète statistiquement celle des forces interparticulaires (Richefeu *et al.*, 2007). Dans les milieux granulaires secs, puisque les forces normales sont toutes du même signe (forces compressives) et que la pression des particules résulte de la sommation des forces agissant sur elles, on s'attend à ce que la probabilité s'estompe à mesure que la pression tend vers zéro. À l'inverse, la Figure 2a montre que la forme exponentielle de la distribution des pressions s'étend jusqu'aux pressions nulles. Ceci peut être dû au fait que toutes les forces normales ne sont pas du même signe.

La pression nulle correspond à un état où une particule est équilibrée sous l'action combinée de forces de traction et de compression. Puisque de tels états d'équilibre ne sont pas marginaux ici, il est possible qu'ils rendent compte d'une organisation particulière des contraintes au sein de la collection de particules humides. On va donc s'intéresser ici à la question de savoir comment les pressions de particules sont localement corrélées à leur connectivité. Pour une particule i , la connectivité est spécifiée par le nombre k_i^+ de liens en compression et le nombre k_i^- de liens en traction. Considérons maintenant l'ensemble $\mathcal{S}(k^+, k^-)$ des particules i tel que $k_i^+ = k^+$ et $k_i^- = k^-$. La pression partielle portée par cet ensemble est la somme des pressions de particules appartenant à l'ensemble divisée par le nombre total de particules :

$$p(k^+, k^-) = \frac{1}{N} \sum_{i \in \mathcal{S}(k^+, k^-)} p_i. \quad (4)$$

Il s'agit bien entendu de quantités additives de sorte que leur somme corresponde à la contrainte moyenne p_m . La fonction $p(k^+, k^-)$ nous renseigne sur la façon dont les pressions de particules sont distribuées vis-à-vis du réseau de liens. En d'autres termes, cette fonction décrit la relation entre la pression portée par une particule et ses premiers voisins. La Figure 2b montre la carte des pressions partielles dans l'espace de paramètre (k^+, k^-) . On observe une structure bipolaire des pressions partielles qui est antisymétrique par rapport à la ligne $k^+ = k^-$ aux fluctuations statistiques près. Les pressions sont positives pour $k^+ > k^-$ et négatives pour $k^- > k^+$. La ligne $k^+ = k^-$ définit donc la zone de transition entre les deux parties avec $p(k^+, k^- = k^+) \simeq 0$. Cette ligne correspond à la population la plus importante et aux plus grandes connectivités (Richefeu *et al.*, 2007). Les extrema de pression sont situés sur $(k^+ = 4, k^- = 0)$ pour les pressions positives et sur $(k^+ = 0, k^- = 4)$ pour les pressions négatives.

Cette structure bipolaire de la carte de pressions suggère que les particules de pression positive et négative définissent deux phases séparées dans tout le système. Alors, la population de particules de la ligne $k^+ = k^-$ correspond aux particules à l'interface entre les deux phases.

Cette interprétation est confortée par la Figure 2c montrant l'assemblage granulaire où les phases sont représentées en noir et blanc. Les particules de pression aussi bien positive que négative percolent dans tout le système. Les deux phases sont intimement entremêlées avec une large interface entre elles. Les particules de l'interface appartiennent à la ligne $k^+ = k^-$ qui correspond à 12,5% des particules. La morphologie des deux phases est approximativement filamenteuse avec une épaisseur variable.

4 Influence d'une pression de confinement

En absence de contrainte de confinement, les liens capillaires sont à l'origine des autocontraintes ou des forces auto-équilibrées qui ont été analysées dans les sections précédentes. Ainsi, la symétrie observée entre les forces en tension et en compression (Fig. 2b) est une conséquence de l'équilibre statique à contrainte de confinement nulle. La question demeure de savoir si la répartition des pressions de particules, comme décrite ci-dessus, reste la même lorsqu'un assemblage granulaire humide est soumis à une contrainte (compressive) de confinement. En pratique, néanmoins, on ne peut pas isoler les forces auto-équilibrées des forces induites par la contrainte externe car la pression extérieure conduit l'assemblage à un nouvel état d'équilibre en modifiant sa microstructure. Ainsi, les autocontraintes pour $p_m = 0$ (avant tout réarrangement) ne correspondent pas à celles de l'état réarrangé pour $p_m \neq 0$. Nous allons donc considérer les forces pour $p_m \neq 0$ sans distinction entre les forces induites et auto-équilibrées.

L'assemblage granulaire humide initialement stabilisé avec une contrainte externe nulle a ensuite été soumis à une contrainte isotrope $p_m = 100$ Pa jusqu'à un équilibre statique. Ce niveau de confinement est élevé par rapport à la pression de référence p_0 ($p_m/p_0 \simeq 0,5$), mais suffisamment faible pour ne pas masquer complètement la manifestation de la cohésion capillaire. Le même assemblage a également été soumis à une compression isotrope $p_m = 100$ Pa mais sans cohésion (assemblage sec).

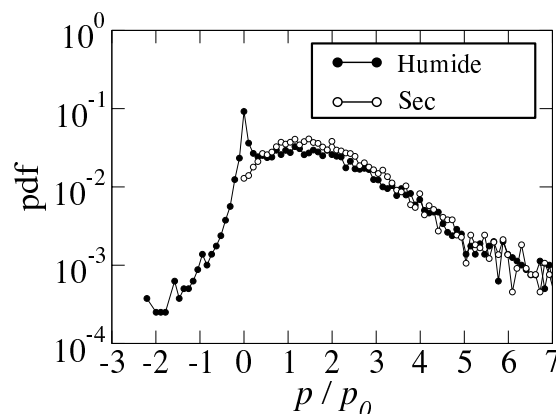


FIG. 3 – Densité de probabilité (pdf) des pressions particulières pour des assemblages granulaires humide et sec soumis à une compression isotrope $p_m = 100$ Pa.

La Figure 3 montre la distribution des pressions de particules pour les échantillons sec et humide. La densité des pressions positives les plus élevées diminue exponentiellement dans les deux cas. Dans le cas sec, un maximum local est observé à $p \simeq 1,5p_0$ comme une signature de la contrainte de confinement. Dans le cas humide, on observe un plateau pour cette gamme de pressions. Pour les pressions négatives, la distribution n'est plus exponentielle ce qui signifie que l'organisation des forces en traction ne remplit plus les conditions nécessaires pour une distribution exponentielle des forces fortes dans un milieu granulaire (Coppersmith *et al.*, 1996).

En particulier, le réseau de forces ne percole plus à travers l'assemblage comme dans le cas non confiné.

On voit que plusieurs caractéristiques de la transmission des contraintes dans l'assemblage non confiné persistent en présence d'une contrainte de confinement. En particulier, dans les deux cas, une large classe de particules de faibles pressions (proches de zéro quel que soit le signe) est présente. Cette classe a été interprétée dans le cas non confiné comme appartenant à l'interface entre les deux phases percolantes. De toute évidence, cette interface n'est pas bien définie pour $p_m = 100$ Pa où la phase négative apparaît soit sous la forme de particules isolées ou d'agrégats très petits. Néanmoins, nos résultats indiquent clairement que les liens en traction et les pressions négatives jouent le même rôle en ce qui concerne les propriétés d'équilibre des particules où qu'elles soient.

5 Conclusions

Les propriétés statistiques du réseau des forces auto-équilibrées dans un matériau granulaire humide ont été analysées au moyen de simulations 3D par éléments discrets. Quelques descripteurs de la microstructure et du réseau de forces ont permis de mettre en évidence la signature d'une organisation ingénieuse des pressions de particules en deux amas à pressions négative et positive, percolant chacun à travers l'assemblage. Cette répartition ne doit pas être vue comme une distinction formelle entre les pressions négatives et positives, mais plutôt liée à la façon dont les deux populations partagent l'espace et se raccordent au réseau de liens. Cette « séparation des phases » est caractérisée par deux propriétés intéressantes. Premièrement, les pressions les plus élevées en valeur absolue se situent au cœur de chacune des deux phases. Deuxièmement, l'interface entre les deux phases correspond au lieu où les niveaux de pression sont les plus faibles.

Références

- Allen, M. P., Tildesley, D. J. 1987, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Oxford.
- Bocquet, L., Charlaix, E., Restagno, F. 2002, Physics of humid granular media, *C. R. Physique* **3**, 207-215
- Coppersmith, S. N, Liu, C., Majumdar, S., Narayan, O., Witten, T. A. 1996, Model for force fluctuations in bead packs, *Phys. Rev. E* **53**, 4673-4685
- El Youssoufi, M. S, Delenne, J.-Y., Radjaï, F. 2005, Self-stresses and crack formation by particle swelling in cohesive granular media, *Phys. Rev. E* **71**, 051307
- Lian, G, Thornton, C., Adams, M. J. 1993, A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies, *J. Colloid Int. Sci.* **161**, 138-147
- Radjaï, F., Preehawuttipong, I., Peyroux, R. 2001, Cohesive granular texture, *In Continuous and discontinuous modelling of cohesive-frictional materials* (ed. P. A. Vermeer, S. Diebels, W. Ehlers, H. J. Hermann, S. Luding, et E. Ramm) p. 149, Springer, Berlin.
- Richefeu, V., El Youssoufi, M. S., Radjaï, F. 2006, Shear strength properties of wet granular materials, *Phys. Rev. E* **73**, 051304
- Richefeu, V., Radjaï, F., El Youssoufi, M. S 2007, Stress transmission in wet granular materials, *Eur. Phys. J. E* (à paraître).