



**HAL**  
open science

# Etude numérique des propriétés mécaniques et des processus de déformation et d'endommagement des matériaux granulaires

Nicolas Gland

► **To cite this version:**

Nicolas Gland. Etude numérique des propriétés mécaniques et des processus de déformation et d'endommagement des matériaux granulaires. Mécanique [physics.med-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2003. Français. NNT : . tel-00006671

**HAL Id: tel-00006671**

**<https://theses.hal.science/tel-00006671>**

Submitted on 9 Aug 2004

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Etude numérique des propriétés mécaniques et des processus de déformation et d'endommagement des matériaux granulaires

## THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 17 décembre 2003

pour l'obtention du

**Doctorat de l'Université Paris XI Orsay**  
(spécialité Sciences de la Terre)

par

Nicolas GLAND

### Composition du jury

*Président :* Michel MENVIELLE, Professeur, Université d'Orsay - Paris XI  
*Rapporteurs :* Eric CLEMENT, Professeur, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI  
Christian DAVID, Professeur, Université de Cergy-Pontoise  
*Examineur :* Bertrand MAILLOT, Maître de Conférence, Université de Cergy-Pontoise  
*Directeur de thèse :* Yves GUEGUEN, Professeur, Ecole Normale Supérieure, Paris  
*Co-Directeur de thèse :* Dmitri PISSARENKO, Project Manager, Schlumberger Moscow Research



# Etude numérique des propriétés mécaniques et des processus de déformation et d'endommagement des matériaux granulaires

## THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 17 décembre 2003

pour l'obtention du

**Doctorat de l'Université Paris XI Orsay**  
(spécialité Sciences de la Terre)

par

Nicolas GLAND

### Composition du jury

*Président :* Michel MENVIELLE, Professeur, Université d'Orsay - Paris XI  
*Rapporteurs :* Eric CLEMENT, Professeur, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI  
Christian DAVID, Professeur, Université de Cergy-Pontoise  
*Examineur :* Bertrand MAILLOT, Maître de Conférence, Université de Cergy-Pontoise  
*Directeur de thèse :* Yves GUEGUEN, Professeur, Ecole Normale Supérieure, Paris  
*Co-Directeur de thèse :* Dmitri PISSARENKO, Project Manager, Schlumberger Moscow Research

## Remerciements

Au terme de ma thèse, je voudrais remercier les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à sa réalisation.

Après ces trois années passées au Laboratoire de Géologie, je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à mon Directeur de thèse Yves Gueguen, pour m'avoir encadré et fait bénéficier de ses conseils dans la réalisation de ce travail de recherche.

Je tiens également à remercier Dmitri Pissarenko pour nos collaborations passées depuis le Magistère et au cours du DEA. Je regrette sincèrement que cette collaboration ait été écourtée au début de cette thèse, Dmitri ayant quitté ses fonctions de Maître de Conférence à l'ENS pour rejoindre Schlumberger. Je lui suis reconnaissant enfin pour l'organisation des séminaires à SCRIP et à SCR et pour ses conseils tout au long de cette thèse.

Au cours de plusieurs séjours passés au Benjamin Levich Institute du City College of New York, j'ai pu mesurer à quel point il était enrichissant et nécessaire de développer des collaborations extérieures actives avec des chercheurs de spécialités différentes. Je voudrais remercier le Professeur Hernan A. Makse avec qui j'avais eu l'occasion de travailler par le passé lors de mon stage de Magistère chez Schlumberger, de m'avoir à nouveau fait confiance et de m'avoir accueilli au sein de son groupe pour cette collaboration. J'ai beaucoup appris auprès de lui sur les milieux granulaires. Sans les idées motivantes et les facilités qu'il m'a accordées dans l'utilisation des moyens informatiques du Levich Institute, mes travaux de thèse n'auraient sans aucun doute pas aussi bien avancés. Je suis très ravi de rejoindre son groupe pour un post-doctorat à l'issue de cette thèse.

Il me faut remercier les personnes de Schlumberger qui m'ont accordé leur confiance et ont permis le co-financement de cette thèse. Je pense tout particulièrement à David L. Johnson ainsi que Larry M. Schwartz du centre Doll-Research de Ridgefield. J'ai également beaucoup appris auprès d'eux par le passé et je voudrais les remercier pour m'avoir accueilli à Doll-Research pour assister à la présentation de l'avancement de mes travaux lors de mes visites chaque année.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Raul Madariaga, Directeur du Laboratoire, qui fût mon principal interlocuteur en ce qui concerne le fonctionnement du cluster de calcul ; je le remercie d'avoir répondu à mes "appels au secours" et remis en état de marche le cluster à chaque fois que cela était nécessaire ; je souhaite un meilleur fonctionnement au nouveau cluster du Laboratoire et qu'il soit une source moindre de frustrations pour les futurs utilisateurs.

Je suis très reconnaissant aux deux rapporteurs de mon manuscrit d'avoir accepté ce rôle.

Je suis très content que Christian David ait bien voulu rapporter ma thèse. C'est à l'occasion d'un séminaire que j'ai donné au Laboratoire de Géologie à Cergy que je l'ai rencontré et que je lui ai présenté une partie de mon travail de thèse.

Je suis également très reconnaissant à Eric Clément d'avoir accepté de rapporter mon travail de thèse. A la suite d'une rencontre au Collège de France, j'ai eu l'occasion de rencontrer les chercheurs travaillant au LMDH ; j'ai beaucoup apprécié leur accueil et leur ouverture à la discussion sur mes travaux de thèse ; je remercie Philippe Claudin et Evelyne Kolb pour les discussions et pour m'avoir présenté à leur tour leurs travaux de recherche.

Une thèse est un travail personnel qui bénéficie de l'apport de nombreuses personnes. Je voudrais témoigner ma reconnaissance à toutes ces personnes qui ont contribué aux résultats présents dans ce mémoire.

- Une des personnes avec qui j'ai eu le plus d'enthousiasme à discuter physique et modélisation numérique des milieux granulaires est Igor Baryshev, mon collègue de bureau au Levich Institute. Lui et moi partageons un goût prononcé pour la dynamique moléculaire ; qu'il s'agisse d'algorithme de type "Event Driven" ou "Discrete Element", les similitudes ne sont en fin de compte pas

bien loin. Je tiens également à adresser mes salutations aux deux Sud-Américains de l'institut, German Draezer et Fabricio Portiguar, deux autres aficionados de la dynamique moléculaire ; je n'oublierai pas enfin, Ping-Wang et Chao-Ming-Song travaillant avec Hernan Makse, et qui seront probablement mes collègues très bientôt.

- J'ai conservé des bons amis et anciens collaborateurs à Schlumberger-Doll-Research à Ridgefield ; je tiens avant tout à saluer Jean Saint-Germain qui m'a initié à l'utilisation de la presse de confinement. Je voudrais remercier également Abigail Matteson qui m'avait fait confiance pour mener des expériences de saturation partielle dans le cadre d'un stage. Je saluerai enfin Olivier Sindt et Jean-Baptiste Clavaud pour les discussions et les conseils qu'ils m'ont apportés lors de ces différents travaux.

- Au Laboratoire, de l'ENS, je voudrais remercier les personnes avec lesquelles j'ai interagit dans mon travail ; mes collègues d'équipe tout d'abord, en commençant par les plus anciens, Yves Meheust, Alexandre Schubnel, Laurent Molez, et les moins anciens, Jérôme Fortin et Boris Orlovsky. Je tiens à saluer Guillaume Chambon, mon interlocuteur privilégié sur les milieux granulaires au Laboratoire ; nous avons régulièrement échangé nos impressions sur nos travaux respectifs et j'ai toujours trouvé beaucoup d'intérêt dans ces discussions. Je voudrais aussi saluer mes collègues d'équipe de l'autre extrémité du couloir, Jean Paul Callot, Xavier Guichet, et Guillaume Cairanne.

Je salue Sylvain Bourlange, mon premier coéquipier sur le *Terrain* il y a plusieurs années maintenant, à Barles, et avec qui j'ai apprécié partager les moments de pause durant ces trois années au Laboratoire.

- Au Laboratoire de Géologie de l'Université de Cergy-Pontoise, où j'ai débuté mon apprentissage dans les Géosciences, je salue mes anciens professeurs du DEUG-ST/97, Charles Aubourg, Dominique Frizon de la Motte, Jean-Claude Guezou, Ronan Hebert, et Philippe Robion.

Je salue également mon collègue Laurent Louis, avec qui j'aurais souhaité collaborer plus activement au cours de ma thèse sur la microstructure des roches granulaires. Je lui souhaite beaucoup de réussite pour son Post-doctorat à Stony Brook en compagnie de Teng-Fong Wong.

Je tiens enfin à remercier Bertrand Maillot, qui a accepté d'examiner ma thèse, et avec qui j'ai toujours trouvé beaucoup d'intérêt à discuter ; Je lui suis gré de m'avoir mis en contact avec Christian David, en organisant le séminaire que j'ai donné au Laboratoire de Géologie à Cergy-Pontoise ; je le remercie vivement pour cette attention.

- A l'Institut de Physique du Globe de Paris, je voudrais remercier Emmanuel Dormy, qui a eu la gentillesse d'interférer en ma faveur pour que je puisse accéder aux moyens informatiques de l'IPGP, ce qui m'a permis de continuer l'avancement de mes travaux lors de ma dernière année de thèse. je suis également reconnaissant à Jean-Pierre Vilotte, qui a donné son accord.

- Il me faut absolument remercier Lina Dumont à l'Ecole Normale Supérieure, et Mary Wright au Levich Institute, pour m'avoir toujours aidé dans les démarches administratives lors de l'organisation des missions réalisées au cours de cette thèse.

- Au cours de ces trois années, je n'ai pas toujours gardé les pieds sur Terre ...

J'ai eu la tête dans les nuages plus d'une fois ! je tiens à remercier Yves Decugniet pour cette année d'instruction à l'ACPN et pour sa confiance jusqu'à mon "laché" récent.

J'ai également bien souvent mis les pieds dans l'eau, et même plus ! ; je remercie l'équipe du SubAquaClub de Paris pour leur enseignement vers l'autonomie et pour m'avoir fait découvrir les profondeurs glaciales des Gléna.

- J'adresse mes remerciements à mes plus proches amis qui m'ont supporté tout au long de cette thèse et bien avant. A Aurélia et à la *former* 68000 *Jocassienne-connection* Jimmy, Djamel, et Erwan.

- Quelques mélodies de *soundchips* et de *modules* ont souvent accompagnées mes longues soirées de travail ; je salue les excellentes initiatives des servers de *broadcast* de Nectarine, SomaFM et Digitally Imported.

- Enfin je terminerai en exprimant ma reconnaissance la plus sincère à mes parents, à mes grands-parents, ainsi qu'à ma famille pour le soutien inconditionnel qu'ils m'ont accordé durant ces longues années d'études.



*Je dédie cette thèse  
à mes parents.*



*FAUST* (seul).  
Comment ne perd-il pas à jamais l'espérance  
Celui qui se consume en stériles travaux  
Qui creuse avidement vers un trésor immense  
Et trouve avec bonheur un nid de vermisseaux !  
(...)  
Goethe, *Faust I* , 1808.





# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>7</b>
1 Introduction et Motivations . . . . .	7
2 Présentation du mémoire . . . . .	9
3 Remarques . . . . .	10

---

---

<b>Partie I Introduction à la Matière Granulaire et à sa Modélisation par les Éléments Discrets</b>	<b>11</b>
---	-----------

---

---

<b>Chapitre 1</b>
-------------------

<b>La matière granulaire : présentation et contexte d'étude</b>	<b>13</b>
---	-----------

1.1 Introduction . . . . .	13
1.2 Les observations expérimentales . . . . .	14
1.2.1 L'essai de chargement triaxial . . . . .	14
1.2.2 Le test de déchargement . . . . .	16
1.3 Les modèles élastoplastiques macroscopiques . . . . .	17
1.3.1 L'approche de milieu continu . . . . .	17
1.3.2 Les lois de comportement . . . . .	18
1.3.3 Le critère de rupture de Mohr-Coulomb . . . . .	19
1.3.4 La déformation plastique . . . . .	20
1.3.5 Un modèle élasto-plastique trop simple . . . . .	21
1.4 Le milieu granulaire à l'échelle microscopique . . . . .	22
1.4.1 Mécanique du contact inter-granulaire . . . . .	23
1.5 De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique . . . . .	27

1.5.1	Elasticité Non-Linéaire . . . . .	27
1.5.2	Notion de texture granulaire . . . . .	28
1.5.3	Désordre de contacts et hétérogénéité du réseau de forces . . . . .	29
1.6	Conclusions . . . . .	29

**Chapitre 2**

**La Méthode des Eléments Discrets 31**

2.1	Introduction . . . . .	31
2.2	Particules en mouvements et en interactions . . . . .	33
2.3	Schéma de résolution numérique . . . . .	34
2.4	Conditions limites aux frontières . . . . .	35
2.4.1	Détection des Interactions de Paires . . . . .	37
2.4.2	Lois d'Interaction au Contact . . . . .	42
2.5	Intégration du Mouvement . . . . .	48
2.5.1	Schémas numériques d'intégration . . . . .	49
2.5.2	Temps de contact et échantillonnage critique . . . . .	53
2.5.3	Modélisation d'une collision binaire . . . . .	53
2.5.4	Echantillonnage critique . . . . .	54
2.5.5	Dissipation d'énergie . . . . .	54
2.6	Calcul du tenseur des contraintes . . . . .	55
2.7	Structure des données - Implémentation Série . . . . .	57
2.8	Implémentation parallèle . . . . .	58
2.8.1	Conclusions et Perspectives . . . . .	60

---

**Partie II Propriétés Géométriques et Mécaniques d'Assemblages Granulaires Denses 61**

---

**Chapitre 3**

**Effets des paramètres de mélange sur les propriétés des assemblages granulaires bidisperses 63**

3.1	Introduction . . . . .	63
-----	------------------------	----

3.2	Simulations numériques . . . . .	64
3.2.1	Méthode des Eléments Discrets . . . . .	64
3.2.2	Compaction et densification . . . . .	65
3.3	Les mélanges bidisperses . . . . .	66
3.3.1	La déviation de rayon . . . . .	67
3.3.2	La concentration . . . . .	67
3.4	Propriétés Géométriques . . . . .	67
3.4.1	Coordinance et fraction solide . . . . .	67
3.4.2	Fabrique du réseau des contacts . . . . .	73
3.4.3	Paramètres de structure et d'ordre . . . . .	74
3.5	La réponse mécanique des mélanges bidisperses . . . . .	82
3.5.1	Modules élastiques effectifs . . . . .	83
3.5.2	Transmission des forces . . . . .	84
3.6	Influence de la concentration . . . . .	92
3.7	Fortes hétérogénéités de taille . . . . .	95
3.8	Rapport de tailles critique . . . . .	95
3.8.1	Réseau de transmission des forces de contact . . . . .	96
3.8.2	Coordinance moyenne et porosité . . . . .	96
3.8.3	Modules élastiques effectifs . . . . .	99
3.8.4	Distributions des forces et des longueurs de chaînes . . . . .	99
3.9	Conclusion . . . . .	101

## Chapitre 4

### Elasticité non-linéaire et propriétés acoustiques des agrégats granulaires103

4.1	Introduction et objectifs . . . . .	103
4.2	Les prérequis . . . . .	108
4.2.1	Mécanique du contact . . . . .	108
4.2.2	Théorie de Milieu Effectif de l'élasticité granulaire . . . . .	109
4.2.3	Désaccords entre la théorie et les expériences . . . . .	112
4.2.4	Modèle visco-élastique linéaire constitutif . . . . .	114
4.2.5	Dynamique Moléculaire . . . . .	114
4.3	Expériences acoustiques . . . . .	116
4.3.1	Montage expérimental . . . . .	116
4.4	Simulations numériques . . . . .	119
4.4.1	L'état de référence - protocole numérique . . . . .	119
4.4.2	Coordinance . . . . .	120
4.4.3	Fraction volumique . . . . .	121

4.4.4	Limite de sphères dures . . . . .	121
4.4.5	Autre protocole de préparation . . . . .	122
4.4.6	Distribution des Forces . . . . .	122
4.4.7	Paramètre d'ordre . . . . .	124
4.4.8	Calcul des modules élastiques . . . . .	124
4.4.9	Comparaisons : Théorie de Milieu Effectif, expériences, et simulations	126
4.4.10	Rôle des forces transversales et des rotations . . . . .	130
4.4.11	Rôle de la relaxation et du désordre . . . . .	132
4.4.12	Modules purement élastiques . . . . .	133
4.5	Conclusions et perspectives . . . . .	135

**Chapitre 5**

**Fonction Réponse de matériaux granulaires sous contrainte 137**

5.1	Introduction à la statique des matériaux granulaires . . . . .	137
5.1.1	L'approche élastoplastique de la mécanique des sols . . . . .	137
5.1.2	Des expériences à l'échelle macroscopique . . . . .	138
5.1.3	L'échelle microscopique et les chaînes de forces . . . . .	140
5.1.4	Les modèles granulaires . . . . .	141
5.1.5	Confrontations des nouveaux modèles à l'approche élastoplastique . .	144
5.1.6	Le test de la fonction réponse . . . . .	144
5.2	Etude numérique de la fonction réponse . . . . .	146
5.2.1	Présentation des simulations . . . . .	146
5.2.2	Propagation de la perturbation . . . . .	150
5.2.3	Vers la relaxation complète . . . . .	155
5.2.4	Comparaison avec l'élasticité . . . . .	158
5.2.5	Comparaison de la réponse statique et de la réponse dynamique . . .	165
5.2.6	Dépendance de la largeur des profils avec la profondeur . . . . .	166
5.2.7	Dépendance en pression de la fonction réponse . . . . .	172
5.2.8	Fonction réponse à friction nulle . . . . .	173
5.3	Conclusions . . . . .	174

**Annexes**

**Annexe A**

**Théorie Elastique de Milieu Effectif : Arrangements de Sphères Bidimensionnels et Tridimensionnels**

A.1	Modules élastiques effectifs d'un assemblage de sphères . . . . .	177
-----	---	-----

---

A.1.1	Vers l'état de référence $\{R\}$ . . . . .	177
A.1.2	Déformation incrémentale, Modules élastiques . . . . .	180
A.1.3	Arrangement "plan" de sphères . . . . .	182

**Annexe B**

*Why Effective Medium Theory Fails in Granular Materials*, Physical Review Letter, **83**, 5070, 1999

**Annexe C**

*Nonlinear Elasticity of Granular Media*, Physica B, **279**, 134, 2000

**Annexe D**

*The Apparent Failure of Effective Medium Theory in Granular Materials*, Physic and Chemistry of the Earth (A), **26**, 107, 2001

---



---

**Partie III Déformation et Endommagement des Matériaux Granulaires 203**

---



---

**Chapitre 6**

**Processus de déformation dans un matériau granulaire non cohésif 205**

6.1	Introduction . . . . .	205
6.1.1	Plasticité et localisation de la déformation . . . . .	205
6.1.2	Analyse de stabilité : enveloppe élastique et rupture plastique . . . . .	206
6.1.3	Résultats expérimentaux et numériques antérieurs . . . . .	207
6.1.4	Conditions initiales des tests de compression biaxiale . . . . .	208
6.2	Simulations Numériques . . . . .	208
6.2.1	Préparation des échantillons numériques . . . . .	208
6.2.2	Les données mécaniques caractéristiques . . . . .	212
6.2.3	Les propriétés des réseaux de contacts et de forces . . . . .	217
6.2.4	La localisation de la déformation . . . . .	220
6.2.5	Effets de la pression de confinement . . . . .	237
6.3	Conclusions et perspectives . . . . .	239

**Chapitre 7**

**Endommagement des roches granulaires : effets des hétérogénéités de cimentation et effets d'échelle 241**

7.1	Introduction . . . . .	241
7.2	Le modèle d'endommagement . . . . .	246
7.2.1	Critère d'endommagement <i>I</i> . . . . .	247
7.2.2	Critère d'endommagement <i>II</i> . . . . .	250
7.3	Simulations numériques . . . . .	252
7.3.1	Modèle numérique . . . . .	252
7.3.2	Evolution de la distribution d'énergie élastique et de l'endommagement	255
7.3.3	Endommagement et Pic de contrainte . . . . .	257
7.3.4	Localisation de l'endommagement . . . . .	259
7.3.5	Effet d'échelle de l'endommagement . . . . .	266
7.3.6	Effet de la Pression de Confinement . . . . .	268
7.3.7	Modèle statistique et pression . . . . .	269
7.3.8	Membrane flexible aux frontières . . . . .	269
7.4	Conclusions . . . . .	270

**Annexes**

**Annexe E**

*Modeling of Scale Effects of Damage in Cemented Granular Rocks, Physics and Chemistry of the Earth (A), 26, 83, 2001*

<b>Conclusion générale</b>		<b>281</b>
1	Rappels du contexte d'étude . . . . .	281
2	Principaux résultats . . . . .	282
3	Perspectives . . . . .	287
<b>Bibliographie</b>		<b>289</b>

# Introduction générale

## 1 Introduction et Motivations

La matière granulaire est omniprésente dans notre environnement naturel ; la surface de la terre est recouverte de "grains" que ce soit sous une forme consolidée, comme dans les roches granulaires, ou non consolidée sous la forme de sable dans les déserts, de sédiments au niveau des marges océaniques et lacustres ou bien de sols ; on peut aussi les trouver de façon diluée sous la forme de boues et de suspensions. Ces collections de grains de toutes formes et propriétés physico-chimiques correspondant à des objets dont les dimensions s'étendent sur plusieurs ordres de grandeurs (de quelques dizaines de microns à plusieurs kilomètres) montrent néanmoins des comportements universels.

On comprend alors l'importance de l'étude de la matière granulaire pour les Sciences de la Terre ; les géologues vont s'intéresser aux propriétés des milieux granulaires en liaison avec l'étude des sols ou des roches sédimentaires ; ces dernières sont formées par consolidation lente de grains détritiques et par la modification des contacts intergranulaires ; l'adhésion entre les grains intervient par diffusion en surface ou par dépôt chimique au contact. Dans sa forme non consolidée les grains sont susceptibles de se déplacer les uns par rapport aux autres même s'ils sont maintenus en contact par la pression et par les forces de frottement. On peut également les rencontrer sous une forme faiblement consolidée, lorsque l'adhésion est assurée par les forces capillaires dans les milieux granulaires humides.

En géophysique, la problématique de l'activité sismique est très liée à la matière granulaire ; en effet, les failles qui possèdent une certaine épaisseur sont remplies en surface par des fragments polydisperses de roche broyée qui constituent la gouge de faille ; la présence de ce matériau au coeur de la faille contrôle de façon importante les propriétés de frottement, de transport, mais également la transmission des contraintes. La compréhension mécanique de ce matériau est donc un enjeu important pour mieux appréhender ces objets géologiques.

Dans le secteur industriel, la matière granulaire concerne des quantités colossales ; le sable et les graviers sont à la base des matériaux de constructions ordinaires ; après l'eau, c'est la matière granulaire qui est la plus utilisée industriellement ; elle peut avoir une faible valeur ajoutée (granulats de construction et agro-alimentaires) ou bien au contraire une forte valeur ajoutée dans l'industrie pharmaceutique, et la chimie fine. Qu'ils soient naturels ou synthétiques ces granulats subissent un cycle de production (extraction ou confection, traitement, stockage, transport) et chaque étape est susceptible d'être perturbée par des phénomènes liés aux comportements mécaniques propres des matériaux granulaires. Si l'industrie des matériaux de base s'est satisfaite jusqu'à présent d'un traitement approximatif de ces problèmes, d'autres industries exigent un traitement de meilleure performance. Dans d'autres domaines industriels, on va s'intéresser au milieu granulaire sous la forme de matrice composant un milieu poreux et on va chercher à décrire les écoulements de fluides (comme l'eau, le pétrole et le gaz) dans ces milieux ; les enjeux économiques dans ces industries sont considérables. On retiendra également le rôle fondamental



des granulats dans l'amélioration de la résistance des bétons de haute performance en génie civil.

La matière granulaire étant très commune dans la nature comme dans l'industrie, les problèmes qui y sont liés ont été traités par de nombreux domaines de recherche ; ces efforts ont abouti à des développements importants aussi bien en recherche théorique qu'en recherche expérimentale et numérique. Dans tous ces domaines, la complexité de la définition des propriétés de ces matériaux tient à la multiplicité des paramètres présents dans la réalité naturelle et industrielle ; ceci pose des problèmes importants à la physique et à la mécanique actuelles qui sont encore loin de pouvoir apporter une réponse satisfaisante à des problèmes aussi complexes.

Si l'interaction mécanique entre deux particules peut être considérée comme relativement *simple* (dans la mesure où les constantes du matériau sont généralement bien définies), accéder au comportement mécanique effectif d'un assemblage granulaire n'est pas un problème aisé. L'étude du comportement collectif des particules en contact est au coeur des préoccupations et il existe deux approches distinctes pour déterminer les propriétés mécaniques d'un matériau granulaire : l'approche phénoménologique (très utilisée dans l'ingénierie et en mécanique des sols) et l'approche structurale (plutôt développée par les physiciens).

La première approche est basée sur les théories d'élasticité et de plasticité où le matériau granulaire est considéré comme un milieu continu, sans prendre en considération explicitement la micro-structure de l'assemblage de particules. On applique alors aux matériaux granulaires les lois de la mécanique dérivées de celles qui s'appliquent aux solides homogènes. Dans cette analyse mécanique, la détermination des modèles constitutifs est difficile et fait intervenir beaucoup de paramètres qui n'ont pas de significations physiques claires ; néanmoins le succès de la description du comportement mécanique trouve probablement son origine dans l'expression implicite de la géométrie de l'assemblage.

Dans l'approche structurale ou micro-mécanique en revanche, la mécanique est traitée sur la base des interactions entre les particules et cette approche discrète modélise de façon explicite l'arrangement des particules ; ces modèles microscopiques sont basés sur la notion de désordre et l'approche modélisatrice est souvent réductrice car on considère des empilements de grains idéalisés par des sphères et dont la population est généralement monodisperse. Si dans la nature ou dans l'industrie, les formes et les propriétés des grains sont très variables, ce qui joue forcément un rôle important dans les comportements statique et dynamique des assemblages, le facteur essentiel pourrait néanmoins résider dans l'arrangement géométrique des grains ; en effet, la réduction du problème granulaire à quelques paramètres micro-mécaniques et à la notion de désordre suffit à faire émerger les comportements particuliers des matériaux granulaires. Ainsi, même pour le cas le plus idéalisé de matériau granulaire (sphères monodisperses), on met en évidence une étonnante complexité ; la dispersion des propriétés locales dans le matériau résulte de l'hétérogénéité des contacts ; on observe la formation de *chaînes* de forces de contact formant des réseaux arborescents mis en évidence dans les expériences de photo-élasticité (biréfringence induite par contrainte mécanique) ; cette structure particulière donne naissance à des échelles intermédiaires entre la dimension du grain et celle de l'empilement et par conséquent une homogénéisation simple des propriétés locales n'est pas adaptée à ce type de matériau.

Ce travail préliminaire sur des systèmes *simples* cherche à obtenir des lois pour généraliser les solutions à des assemblages plus complexes et plus proches de la réalité naturelle en terme de formes, polydispersité et propriétés mécaniques des grains ; car au delà de la diversité des propriétés physiques des systèmes de grains, il existe des caractéristiques communes qui reposent sur la géométrie du désordre qu'il faut maîtriser sur des assemblages simplifiés avant d'espérer obtenir des lois plus générales. Il faut donc pouvoir décrire correctement ce *désordre* géométrique et comprendre comment il influe sur les propriétés mécaniques macroscopiques. Une autre source de complexité vient du fait que cette géométrie des contacts dépend de l'histoire antérieure de

formation du matériau granulaire.

Dans les études essentiellement numériques que nous avons menées au cours de cette thèse, nous avons cherché à dégager les principes de base de la physique de matériaux granulaires simplifiés mais bien caractérisés. Nous nous limitons à l'étude des propriétés physiques et du comportement des matériaux granulaires constitués de particules sphériques et faiblement polydisperses.

Ce n'est qu'en passant par cette approche élémentaire que l'on pourra modéliser de façon correcte les mécanismes mis en jeu dans l'environnement granulaire géophysique. Il se peut qu'à terme une solution généralisée du problème vienne d'une formulation phénoménologique construite sur une base structurale forte.

## 2 Présentation du mémoire

L'organisation de ce mémoire s'articule autour de trois parties :

La première partie est consacrée, premièrement à une introduction à la matière granulaire pour présenter le contexte et les motivations de ce travail de thèse, et deuxièmement à la présentation de la méthode de modélisation numérique (Méthode des Eléments Discrets) des milieux granulaires utilisée. Cette modélisation prend en compte l'existence individuelle de chaque grain composant l'ensemble granulaire macroscopique ; elle nécessite la résolution des équations du mouvement pour chaque grain et la définition de lois de contact intergranulaire afin de pouvoir rendre compte du comportement de l'assemblage.

La seconde partie est consacrée à l'étude des propriétés géométriques et mécaniques des assemblages granulaires denses sous contrainte. Le premier chapitre est consacré au protocole de préparation des assemblages granulaires denses ; nous y présentons une caractérisation complète des effets des paramètres de mélanges (tailles de grains et concentrations) sur les propriétés géométriques et mécaniques des assemblages granulaires sous contraintes. Le deuxième chapitre est consacré à l'élasticité non-linéaire et aux propriétés acoustiques de ces milieux ; on y compare les dépendances en pression des modules élastiques effectifs obtenues par les approches expérimentales, numériques et théoriques ; on y met en évidence le comportement viscoélastique de ces milieux lié à la relaxation collective des grains. Dans le troisième chapitre enfin, nous présentons la modélisation numérique d'une expérience test visant à mesurer la fonction réponse d'un matériau granulaire pour confirmer ou infirmer la validité des différentes théories granulaires : une force quasi-ponctuelle est appliquée au coeur du matériau et le champ de contraintes qu'elle génère dans le matériau est mesuré.

Dans la troisième et dernière partie, ce sont les processus de déformation et d'endommagement qui seront étudiés. Le premier chapitre est consacré à la modélisation numérique de tests de compression biaxiale utilisant un algorithme de membrane flexible ; nous mettons en évidence le phénomène de dilatance et la localisation de la déformation selon des bandes de cisaillement ; nous caractériserons également les processus micro-mécaniques de rotations et de glissements de contact sollicités dans ces bandes. Le second chapitre propose un modèle statistique d'endommagement des roches granulaires faisant ressortir une dépendance explicite de la taille des échantillons et de l'hétérogénéité de cimentation ; les modélisations numériques de tests triaxiaux associées corroborent les hypothèses et les prédictions de ce modèle.

### **3 Remarques**

Dans ce mémoire, nous avons souhaité présenter les différentes études dans un ordre rationnel du point de vue des problématiques traitées mais ne correspondant pas toujours à l'ordre chronologique de réalisation. Chaque étude tend à apporter un élément de réponse à la relation entre les propriétés microscopiques des grains et des contacts et la réponse mécanique macroscopique des agrégats granulaires. Nous examinons dans un premier temps la préparation d'un assemblage "polydisperse" de particules à l'équilibre statique, puis nous étudions les propriétés mécaniques de ces assemblages à l'état quasi-statique suite à des petites déformations ; par la suite nous nous intéressons aux grandes déformations dans des agrégats non consolidés et pour terminer nous nous intéressons à la déformation et l'endommagement des agrégats consolidés. Certains travaux ont fait l'objet de publications, que l'on retrouvera en Annexes. Les chapitres traitant ces travaux suivent la ligne directrice des articles correspondants et apportent des compléments d'études.

Première partie

Introduction à la Matière Granulaire et  
à sa Modélisation par les Eléments  
Discrets



# 1

## La matière granulaire : présentation et contexte d'étude

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>13</b>
<b>1.2</b>	<b>Les observations expérimentales</b>	<b>14</b>
1.2.1	L'essai de chargement triaxial	14
1.2.2	Le test de déchargement	16
<b>1.3</b>	<b>Les modèles élastoplastiques macroscopiques</b>	<b>17</b>
1.3.1	L'approche de milieu continu	17
1.3.2	Les lois de comportement	18
1.3.3	Le critère de rupture de Mohr-Coulomb	19
1.3.4	La déformation plastique	20
1.3.5	Un modèle élasto-plastique trop simple	21
<b>1.4</b>	<b>Le milieu granulaire à l'échelle microscopique</b>	<b>22</b>
1.4.1	Mécanique du contact inter-granulaire	23
<b>1.5</b>	<b>De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique</b>	<b>27</b>
1.5.1	Elasticité Non-Linéaire	27
1.5.2	Notion de texture granulaire	28
1.5.3	Désordre de contacts et hétérogénéité du réseau de forces	29
<b>1.6</b>	<b>Conclusions</b>	<b>29</b>

---

### 1.1 Introduction

Ce chapitre propose une introduction réductrice à la matière granulaire; on se concentre exclusivement sur le comportement à l'état solide de ce matériau. De façon plus générale, on rappelle qu'il est susceptible de reproduire le comportement des trois états de la matière; il peut présenter à la fois un comportement solide sous la forme d'un tas, un comportement liquide si il est déversé sur un plan incliné (ou si le tas se déstabilise par exemple), et enfin si on le soumet à une agitation intense, il acquiert des caractéristiques propres qui permettent de le décrire comme un gaz de particules.

En réalité, et c'est là le plus surprenant, c'est à l'état statique qu'on a le plus de difficultés à appréhender le comportement mécanique d'un matériau granulaire. Celui-ci résulte, d'une part des interactions entre les grains qui le compose et est donc lié à la mécanique du contact

solide/solide intergranulaire à l'échelle élémentaire du matériau ; ce problème n'est pas simple en soit. Le comportement macroscopique est également fonction de l'arrangement géométrique des grains dans l'assemblage et par suite de la répartition des contacts intergranulaires ; nous verrons que le désordre des contacts est une caractéristique déterminante de la physique des matériaux granulaires ; d'autre part la façon dont les efforts sont transmis dans ce milieu présente des particularités étonnantes faisant intervenir une échelle intermédiaire entre la taille élémentaire du grain et celle de l'assemblage de grains.

Dans un premier temps, nous nous intéresserons à des observations expérimentales sur la déformation des matériaux granulaires, dont nous dégagerons les traits caractéristiques de leur comportement mécanique. Nous verrons ensuite comment la définition de propriétés moyennes permet d'approcher le matériau granulaire, de nature discrète par définition, comme un continuum. Nous discuterons des limites de cette approche de milieu continu qui oblitère l'aspect granulaire et ne permet pas de saisir les processus mis en jeu dans le comportement macroscopique. Nous ferons donc un retour au *coeur* du matériau, à l'échelle élémentaire du contact intergranulaire, dont nous décrirons la mécanique ; nous verrons alors comment la non-linéarité et l'inélasticité de comportement du contact se répercute à l'échelle macroscopique ; enfin pour terminer nous tenterons d'identifier les autres facteurs qui influencent le passage micro-macro et détermine le comportement mécanique de l'assemblée de grains.

## 1.2 Les observations expérimentales

L'approche la plus traditionnelle pour appréhender le comportement mécanique des matériaux granulaires est l'approche expérimentale du Laboratoire ; un échantillon de matériau (défini comme volume élémentaire) est soumis à un jeu de contraintes (qui peuvent évoluer dans le temps, on parlera alors de chemin de contraintes), et les déformations qui en résultent sont mesurées ; les propriétés mécaniques sont alors exprimées comme une relation entre le chemin suivi dans l'espace des contraintes et des déformations en fonction du temps  $\sigma(t) = \mathcal{F}(\epsilon(t))$ . Expérimentalement, des chemins de chargement "simples" sont généralement suivis comme le test de compression isotrope, le test de compression uniaxiale ou bien encore le traditionnel test de compression triaxiale.

Ce sont ces tests expérimentaux et leur résultats ( $\mathcal{F}$ ) qui permettront de déterminer les lois de comportement mécanique d'un matériau granulaire comme nous le verrons un peu plus tard. Mais tout d'abord, nous présentons quelques traits caractéristiques que l'on peut dégager de ces expériences réalisées à l'échelle macroscopique qui vont nous donner un aperçu des propriétés des matériaux granulaires et nous faire sentir dans une certaine mesure les processus microscopiques qui en sont à l'origine. Nous nous concentrons sur le test de compression triaxiale qui apporte le plus d'informations.

### 1.2.1 L'essai de chargement triaxial

L'essai triaxial axisymétrique (voir figure 1.2) se déroule de la façon suivante [23] [114] [146] : un échantillon de matériau (à l'échelle du laboratoire) est soumis latéralement à des contraintes  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{33}$  et axialement à une déformation  $\epsilon_{11}$  (ou plutôt un taux de déformation  $\dot{\epsilon}_{11}$ ), respectivement en appliquant une pression de confinement  $P_c$  (par un fluide dont l'échantillon est isolé par une membrane flexible) et à l'aide d'un piston ; les déformations latérales  $\epsilon_{22}$  et  $\epsilon_{33}$  et la contrainte axiale  $\sigma_{11}$  sont alors mesurées respectivement par des jauges de déformation et par un capteur de force.

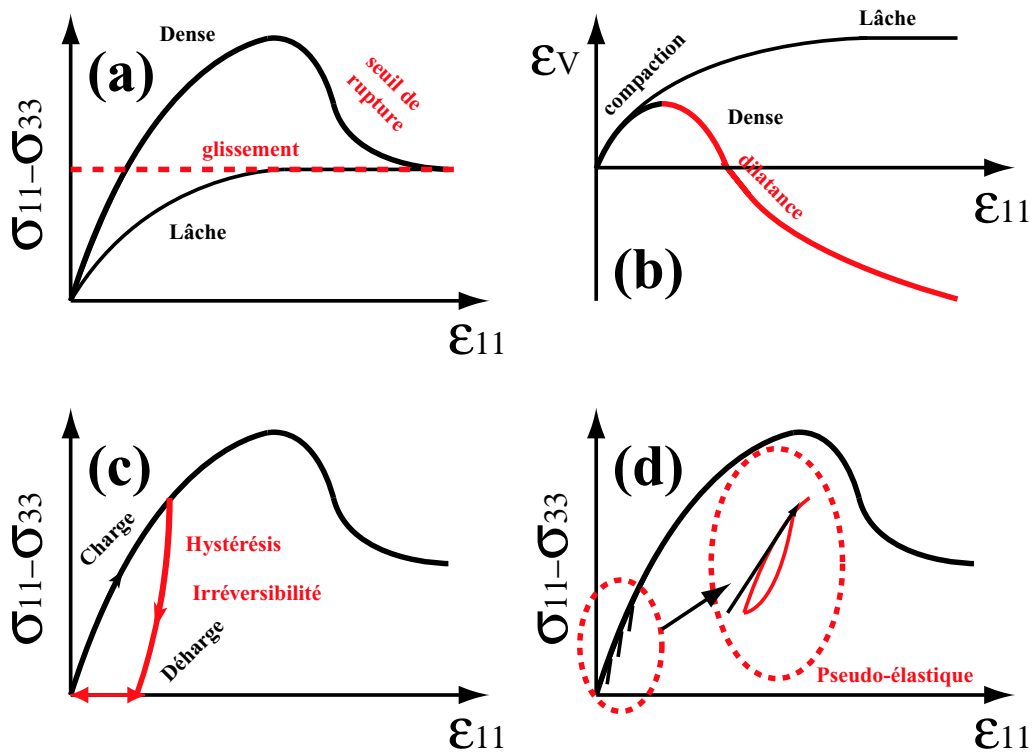


FIG. 1.1 – Expériences de compression triaxiale : (a) seuil de rupture (plasticité) vue par la contrainte déviatorique / déformation axiale (b) compaction et dilatance vue par la déformation volumique / déformation axiale (c) déformation inélastique pour cycle de chargement-déchargement, (d) régime pseudo élastique pour un micro-cycle de chargement-déchargement

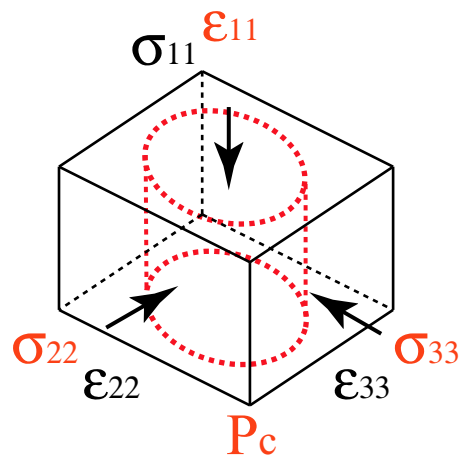


FIG. 1.2 – Test de chargement triaxial : (1) au départ l'état de contrainte est isotrope  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33}$ , (2) ensuite, la compression axiale débute avec un taux de déformation constant  $\dot{\epsilon}_{11} = cste$  et la pression de confinement (latérale) est maintenue également constante  $\sigma_{22} = \sigma_{33} = P_c$ ; la contrainte axiale augmente et est mesurée à l'aide d'un capteur de force; les déformations latérales  $\epsilon_{22}$  et  $\epsilon_{33}$  sont mesurées à l'aide de jauges de déformation (ou des LVDT) et on peut alors calculer la déformation volumique  $\epsilon_v$ .



L'échantillon est au préalable soumis lentement à une compression isotrope, c'est-à-dire  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33}$  et lorsque la pression  $p$  est atteinte, la compression est stoppée; c'est l'état de référence à partir duquel l'essai triaxial peut débuter. La déformation axiale  $\epsilon_{11}$  est appliquée progressivement en maintenant un taux de déformation constant; le taux de déformation axiale imposé  $\dot{\epsilon}_{11}$  est suffisamment petit pour que l'on puisse considérer des conditions quasi-statiques; la contrainte axiale  $\sigma_{11}$  augmente en conséquence. Les contraintes transversales  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{33}$  sont maintenues constantes à la valeur de la pression de confinement  $p_c$ . Au cours du test, l'échantillon se déforme et on calcule sa déformation volumique comme  $\epsilon_v = \epsilon_{kk}$ .

La représentation conventionnelle des résultats d'un test triaxial se résume classiquement à deux courbes : l'une en contrainte, et l'autre en déformation.

- La courbe contrainte-déformation (voir figure 1.1(a)) représente l'évolution du déviateur des contraintes  $q = (\sigma_{11}) - (\sigma_{33})$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{11}$
- La courbe en déformation (voir figure 1.1(b)) représente la déformation volumique  $\epsilon_v = \Delta V/V$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{11}$ .

Lorsqu'un matériau granulaire est soumis à un essai triaxial, on peut dresser les caractéristiques générales de ces courbes comme suit :

- Pour la courbe en contrainte (figure 1.1), au cours du chargement, on peut distinguer trois parties; la première partie correspond à une réponse linéaire (du moins au début), la seconde correspond à un adoucissement vers un maximum où a lieu la rupture macroscopique de l'échantillon; cette rupture apparaît sous la forme d'une bande de cisaillement; la troisième partie correspond au comportement post-rupture, où les mécanismes qui dominent le comportement du matériau ont lieu à l'échelle de la bande de cisaillement (on se reportera au chapitre 6 consacré à la localisation de la déformation). Le 'pic' de contrainte et le palier qui lui succèdent sont directement fonction de la pression de confinement  $P_c$  imposée à l'échantillon. On remarquera également que l'état de compaction du matériau granulaire ("sa préparation") influence la réponse mécanique de façon importante; un agrégat dense présente un pic avant la rupture alors qu'un agrégat lâche n'en présente pas. On retiendra donc l'influence fondamentale du mode de préparation sur la réponse mécanique; il correspond en réalité à des arrangements granulaires très différents; dans un cas la réponse est fortement non-linéaire (arrangement lâche) et dans l'autre le départ est linéaire.
- Pour la courbe en déformation, suivant l'état de compacité du matériau, les réponses sont également différentes; pour un agrégat lâche, on observe une compaction continue qui tend vers un palier; en revanche, un agrégat dense subit dans un premier temps une compression volumique puis à l'approche de la rupture le matériau se dilate; ensuite le comportement post-rupture tend vers un plateau. On retiendra ici l'influence de l'arrangement granulaire mais surtout le phénomène de dilatance du matériau; nous étudierons au chapitre 6, les mécanismes qui en sont à l'origine; ceux-ci ont lieu notamment à l'échelle de la bande de cisaillement lors de la localisation de la déformation mais pas seulement, car la dilatance peut être observée avant le pic de contrainte.

### 1.2.2 Le test de déchargement

Si on décharge le matériau, c'est-à-dire qu'on revient à un état de contrainte déviatorique nulle ( $\sigma_{11} - \sigma_{33} = 0$ ), on constate qu'une partie de la déformation subsiste ( $\epsilon_{11} \neq 0$  (voir figure 1.1(c)); la déformation est irréversible et par conséquent le comportement est inélastique. Ce phénomène d'hystérésis est observé même aux faibles déformations; aux très faibles déformations, l'hystérésis devient minimale; ce régime pseudo-élastique peut être approché en réalisant de petits cycles de déformations (voir figure 1.1(d)) sur un cycle de chargement plus important [119] [61].

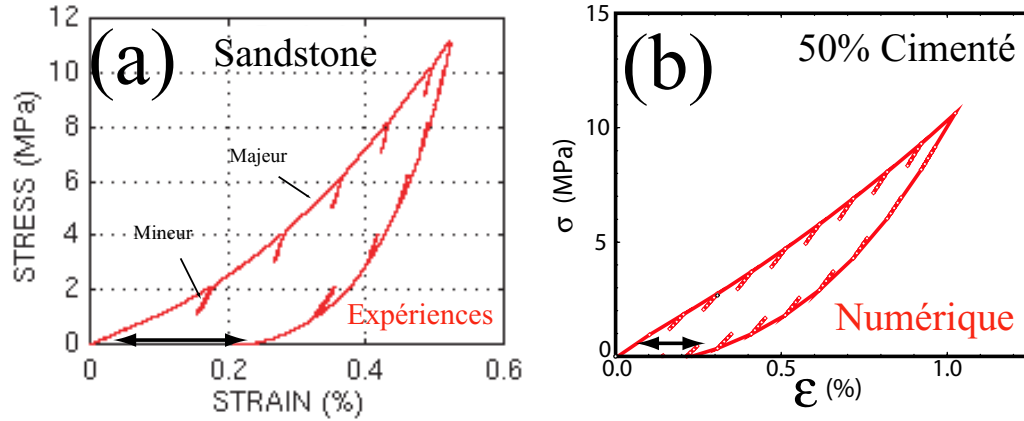


FIG. 1.3 – Cycles de chargement-déchargement (majeur et mineurs) et comportement hystérétique associé : (a) expérience de compression uniaxiale sur des agrégats faiblement consolidés [119]; (b) simulations d’agrégats partiellement consolidés; on montre dans [61] que plus la cimentation intergranulaire est importante, moins l’hystérésis est marquée : la cimentation empêche le glissement au contact des grains.

On peut alors différencier des constantes élastiques statiques (cycles majeurs) et dynamiques (cycles mineurs); ces derniers sont à mettre en relation avec les modules calculés à partir des mesures de vitesses (voir chapitre 4). Ces différences de comportement en fonction de l’intensité de la déformation appliquée trouve son origine au niveau des contacts intergranulaires; aux faibles déformations, la déformation serait élastique au niveau du contact et donc complètement réversible; aux déformations plus importantes, le contact intergranulaire passe d’un régime de déformation élastique à un régime inélastique caractérisé par le glissement irréversible des grains (la force d’interaction transverse sature); Dans un travail numérique [61], nous avons corrélé le comportement hystérétique observé à la mobilisation du frottement intergranulaire dans les cycles mineurs pseudo-élastiques et dans les cycles majeurs inélastiques. La déformation irréversible trouve son origine à l’échelle microscopique des grains (voir figure 1.3); en effet en cimentant les contacts intergranulaires [61], le comportement hystérétique diminue en proportion avec la cimentation.

Nous nous intéresserons un peu plus loin au cours de ce chapitre à la mécanique du contact intergranulaire non cimenté et au chapitre 7, nous nous intéresserons aux effets de la cimentation intergranulaire sur les propriétés mécaniques d’assemblages granulaires consolidés.

## 1.3 Les modèles élastoplastiques macroscopiques

### 1.3.1 L’approche de milieu continu

Dans l’approche physique des milieux continus équivalents, on considère les moyennes de certaines quantités sur des petits volumes  $\delta V$ ; la masse devient la masse volumique  $\rho$  et les forces deviennent des contraintes  $\bar{\sigma}$ ; l’approche continue se justifie en général par l’écart important de taille entre la particule microscopique élémentaire et le volume macroscopique du matériau considéré; le volume élémentaire  $\delta V$  doit être suffisamment grand pour que la moyenne sur un ensemble de particules élémentaires soit représentative des propriétés du matériau, et suffisamment petit pour justement être considéré comme l’objet élémentaire.

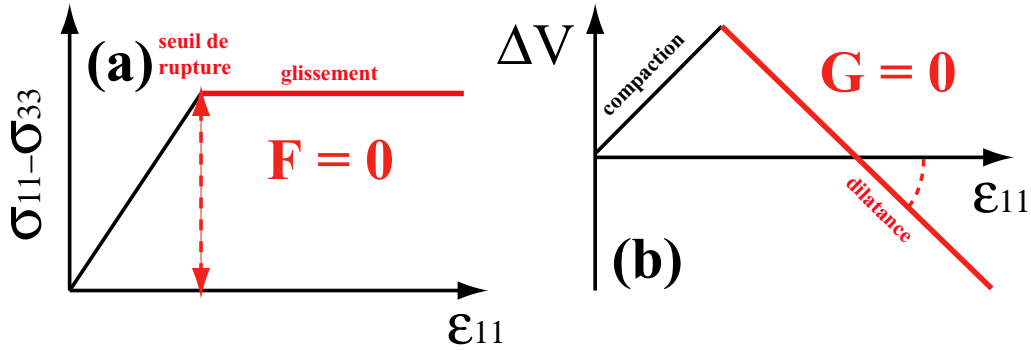


FIG. 1.4 – Réponse en contrainte (a) et en déformation (b) à un chargement triaxial pour le modèle de Mohr-Coulomb : (a) représente le critère de rupture  $\mathcal{F} = 0$ , (b) représente la dilatance lors de la déformation plastique  $\mathcal{G} = 0$ .

Les objets manipulés en mécanique des milieux continus sont principalement le tenseur des contraintes  $\bar{\sigma}$  et le tenseur des déformations  $\bar{\epsilon}$ .

- Le tenseur des contraintes  $\bar{\sigma}$  est relié à la force  $d\vec{F}$  appliquée sur une petite surface  $d\vec{S}$  comme  $d\vec{F} = \bar{\sigma}d\vec{S}$ ; des considérations sur l'équilibre des moments imposent que  $\bar{\sigma}$  soit un tenseur symétrique, c'est-à-dire  $(\sigma_{ij} = \sigma_{ji})$ .
- Si on applique des efforts sur un milieu, celui-ci se déforme, ce qui revient à dire qu'un point  $\vec{x}$  se déplace de  $\vec{u}(x)$ ; c'est le champ de déplacement qui caractérise la déformation et donc on lui associe un tenseur de déformation défini comme  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right)$ ; on constate que selon la définition donnée,  $\bar{\epsilon}$  est également un tenseur symétrique ( $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ ).

Si l'approche de milieu continu est parfaitement adaptée à la description de la matière condensée, qu'en est-il pour les milieux granulaires? Dans un milieu granulaire, l'objet élémentaire est le grain et sa différence de taille avec l'assemblage macroscopique n'est généralement pas aussi importante que cela, et ceci pose le problème de la définition du volume élémentaire représentatif. Néanmoins on peut tenter d'utiliser des modèles macroscopiques basés sur l'approche de milieu continu pour décrire le comportement des matériaux granulaires; c'est l'approche traditionnelle de la mécanique des sols qui considère le matériau granulaire comme un matériau élasto-plastique et tente d'élaborer des lois de comportement décrivant le plus fidèlement possible son comportement mécanique.

### 1.3.2 Les lois de comportement

Le principe fondamental de la dynamique stipule qu'à l'équilibre, la résultante des forces s'exerçant sur un petit volume est nulle; en terme des contraintes, cela équivaut à écrire :

$$\text{div} \bar{\sigma} = \rho \vec{g} \quad (1.1)$$

Cette équation nous fournit trois équations alors que le tenseur des contraintes (symétrique) a six composantes indépendantes. Il manque une relation caractérisant le comportement du matériau considéré. Dans le cas des matériaux granulaires, il n'y a pas aujourd'hui de consensus sur la forme de la loi de comportement; on peut utiliser une loi élastoplastique comme on va le voir mais d'autres relations de clôture ont été proposées récemment pour les matériaux granulaires.

Une loi de comportement complète nécessitera en réalité plusieurs lois de comportement intermédiaires pour obtenir une description satisfaisante; dans la formulation présentée, la plasticité

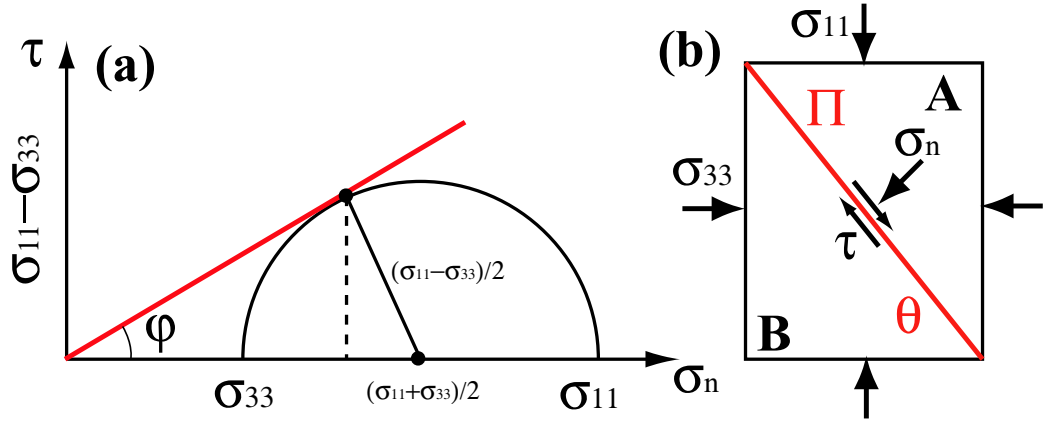


FIG. 1.5 – Critère de rupture de Mohr-Coulomb et Cercle de Mohr : le cercle représente l'ensemble des états de contraintes  $(\sigma_{11}, \sigma_{33})$  ou  $(\sigma_n, \tau)$  stables, et la droite représente la limite de plasticité ; l'angle  $\varphi$  est l'angle de frottement interne du matériau.

succède à l'élasticité :

- La première loi va caractériser le comportement réversible du matériau ; on se situe dans le domaine des déformations élastiques et la loi est par définition de type élastique éventuellement non-linéaire et anisotrope. Dans le cas d'un solide élastique isotrope linéaire, la relation entre contraintes et déformations fait intervenir deux constantes, par exemple les paramètres de Lamé  $\lambda$  et  $\mu$  ou bien le module d'Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$  dans la loi de Hooke présentée sous deux formes :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \epsilon_{kk} + 2\mu \epsilon_{ij}, & ; \\ \epsilon_{ij} = \frac{1}{E} ((1 + \nu) \sigma_{ij} - \nu \delta_{ij} \sigma_{kk}), & . \end{cases} \quad (1.2)$$

- Une seconde loi va spécifier les conditions de contraintes pour lesquelles le régime de déformation plastique succède au régime de déformation élastique ; c'est le critère de rupture, ou la limite de plasticité.
- Une fois passé dans le régime des déformations irréversibles, une troisième loi visera enfin à décrire l'écoulement plastique

Il est possible d'inclure dans ces lois de comportement la notion d'écrouissage qui traduit l'évolution de ces lois au cours des déformations plastiques, traduisant les modifications irréversibles au sein du matériau. Ici, on présente le modèle élasto-plastique de Mohr-Coulomb qui ne fait pas intervenir d'écrouissage mais rend compte d'un certain nombre d'observations expérimentales.

### 1.3.3 Le critère de rupture de Mohr-Coulomb

Le comportement mécanique des matériaux granulaires vis-à-vis de la rupture peut être abordé par la théorie de Coulomb dans la mesure où l'on considère ces matériaux comme étant élastiques parfaitement plastiques. Pour ces matériaux idéaux de Coulomb, aux faibles déformations (c'est-à-dire pour de faibles cisaillements), on peut décrire le comportement élastique par la loi de Hooke ; au-delà d'une certaine déformation critique (cisaillement critique), le matériau qui présente une rhéologie de type plastique subit la rupture.

Le critère de rupture lie les composantes du tenseur des contraintes entre elles et se présente sous la forme  $\mathcal{F}(\sigma_{ii}) = 0$  qui représente une surface dans l'espace des contraintes principales.

Pour déterminer l'espace des contraintes correspondant à un état stable, le critère de Mohr-Coulomb caractérise l'état de plastification du matériau ; le critère s'écrit alors avec un seul paramètre  $\varphi$  qui est l'angle de frottement interne de ce matériau.

Dans le repère des contraintes principales, le critère de Mohr-Coulomb s'exprime selon :

$$(\sigma_{11} - \sigma_{33}) = \sin(\varphi)(\sigma_{11} + \sigma_{33}) + C, \quad (1.3)$$

où  $\sigma_{11}$  est la contrainte axiale dans la direction de compression et  $\sigma_{33}$  est la contrainte latérale de confinement (voir figure 1.5(b)).

Le critère peut également s'écrire dans le repère du plan de rupture, c'est-à-dire par rapport à la direction du glissement :

$$\tau = \tan(\varphi)\sigma_n = \mu_f\sigma_n + C, \quad (1.4)$$

où  $\sigma_n$  et  $\tau$  sont respectivement les contraintes normale et tangentielle le long du plan de rupture (voir figure 1.5(b)),  $\mu_f$  est le coefficient de frottement interne et  $C$  la cohésion du matériau. Dans la plupart des études présentées dans ce mémoire, nous nous intéresserons à des matériaux granulaires non-cohésifs, ce qui revient à poser  $C = 0$ .

Cette formulation du critère de rupture offre une analogie avec le frottement solide/solide de Coulomb ; Considérons un plan  $\Pi$  séparant deux blocs solides distincts  $A$  et  $B$  (voir figure 1.5(b)) formant un angle  $\theta$  avec l'horizontale. Tant que la limite plastique n'est pas atteinte, les contraintes  $\sigma_n$  et  $\tau$  agissent au niveau du plan  $\Pi$  sur le bloc supérieur et contrebalancent la contrainte exercée par ce bloc dû à son poids. Tant que l'équilibre est assuré,  $\tau = \tan(\theta)\sigma_n$ , mais lorsque la limite de plasticité est atteinte  $\tau = \mu_f\sigma_n$ , l'équilibre est rompu et les deux blocs glissent l'un par rapport à l'autre le long du plan  $\Pi$ .

Par conséquent, tout plan  $\Pi$  d'inclinaison  $\theta$  tel que  $\tan(\theta) = \mu_f$  est un plan de rupture possible ; cet angle que nous notons  $\varphi$  correspond à l'angle de frottement interne du matériau. Cet angle de frottement interne  $\varphi$  caractérise les propriétés de frottement du matériau ; sa valeur va être en partie déterminée par le frottement microscopique aux contacts inter-granulaires, mais également par l'organisation de la structure granulaire ; ceci englobe de nombreux facteurs comme l'encombrement géométrique local dû à la forme des grains, le mode de préparation de l'assemblage qui va influencer sa densité, et naturellement les conditions aux limites vont jouer un rôle important. On comprend alors que la contrainte latérale de confinement dans un test de compression triaxiale va influencer sur l'angle de friction interne du matériau et donc sur l'angle du plan de rupture. Pour un matériau donné, cet angle fluctue autour de sa valeur moyenne.

Finalement, on retiendra que ce critère de rupture rend compte de l'existence d'un seuil et d'un palier pour les tests triaxiaux et qu'ils vont dépendre de l'angle de frottement interne du matériau lui-même influencé par de nombreux paramètres. La compréhension des conditions d'apparition des bandes de cisaillement en réponse aux contraintes déviatoriques appliquées peut être approchée par ce type de critère. Il a été montré que la forme des grains (tailles, angularité) influence la localisation de la déformation. Un des enjeux importants est de caractériser l'ensemble des variables microscopiques (et mésoscopiques) qui vont déterminer la localisation des déformations à plus grande échelle.

### 1.3.4 La déformation plastique

Lorsque le matériau a atteint son seuil de rupture, il va alors se déformer plastiquement et se mettre à "s'écouler" à la manière d'un fluide visqueux. Afin de décrire cette nouvelle phase de déformation, il faut se doter d'une règle qui lie le taux de déformation  $\dot{\epsilon}_{ij}$  à l'état de contrainte.

Dans le cas où le critère de plasticité n'est pas indépendant de la contrainte moyenne (et donc de la contrainte de confinement), la fonction  $\mathcal{F}$  sur laquelle repose le critère de Mohr Coulomb ne peut pas être utilisée et il faut définir une nouvelle fonction  $\mathcal{G}$ , le potentiel plastique qui définit comme  $\mathcal{F}$  une surface dans l'espace des contraintes principales. L'introduction de ce potentiel plastique et d'un nouvel angle  $\Phi$  permet de rendre compte du phénomène de dilatance (augmentation de volume de l'échantillon) que l'on peut observer expérimentalement dans les matériaux granulaires. L'angle  $\Phi$  est alors appelé angle de dilatance.

### 1.3.5 Un modèle élasto-plastique trop simple

Le modèle élasto-plastique décrit contient 4 paramètres : (1) et (2) les modules élastiques effectifs du matériau  $E$  et  $\nu$  qui vont caractériser la phase de déformation réversible élastique, (3) l'angle de frottement interne du matériau  $\varphi$  qui définit le seuil de rupture du matériau et le passage à un régime de déformation plastique, enfin (4) l'angle de dilatance  $\Phi$  qui entre dans la loi d'écoulement et permet de décrire le phénomène d'augmentation de volume (la dilatance) au cours de la déformation plastique.

Néanmoins, ce modèle ne permet pas de rendre compte parfaitement du comportement des matériaux granulaires ; l'expression du critère de rupture serait plus complexe que le critère de Mohr-Coulomb ; en effet, si l'angle de friction interne  $\varphi$  permet de prédire l'angle préférentiel d'apparition du plan de rupture (en l'occurrence  $\varphi/2$  avec la contrainte principale maximale), ce critère ne permet pas de prédire les déviations d'angle de ce plan de rupture en fonction des conditions de chargement et des paramètres constitutifs de la roche.

D'autre, part au cours d'essais où l'on soumet l'échantillon à des cycles de chargement-déchargement, le seuil de plasticité évolue, c'est le phénomène d'écrouissage ; le critère de rupture ne dépend donc pas uniquement de l'état de contrainte du matériau  $\mathcal{F}(\sigma_{ij}) = 0$ , mais également de l'histoire du chargement qui doit donc être prise en compte par une nouvelle variable. Ainsi, si le matériau atteint son seuil de rupture, à la suite d'une déformation plastique, celui-ci sera repoussé plus loin au cours du prochain cycle ; l'écrouissage est positif car le matériau s'est consolidé au cours de la déformation plastique.

Nous venons de voir le cas d'une loi de comportement élasto-plastique pour un matériau isotrope ; cependant nombreux sont les matériaux qui présentent une anisotropie ; dans ce cas, leur comportement mécanique présente une ou plusieurs directions privilégiées, et la réponse de ces matériaux va différer dans ces directions. La loi élastique isotrope de Hooke ne peut plus être utilisée et il faut la généraliser au cas anisotrope :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl}, \quad (1.5)$$

où  $C_{ijkl}$  est le tenseur des constantes élastiques de quatrième ordre ; des considérations de symétries sur les tenseurs des contraintes et des déformations et sur le potentiel d'énergie de déformation permet de réduire le nombre des constantes indépendantes à 21 ; ensuite plus la symétrie du matériau considéré augmente, plus le nombre de constantes indépendantes diminue. Par exemple pour un cas d'intérêt souvent pratique, l'anisotropie transverse, 5 constantes élastique seront nécessaires pour décrire totalement le matériau. On imagine alors que les lois de comportement deviennent très complexes.

Enfin, nous avons vu que l'état de contraintes dans le matériau ne dépend pas seulement de l'état de déformation du matériau mais qu'il va également dépendre de l'histoire des déformations inélastiques antérieures, ce qui oblige à introduire un paramètre supplémentaire dans le potentiel plastique.

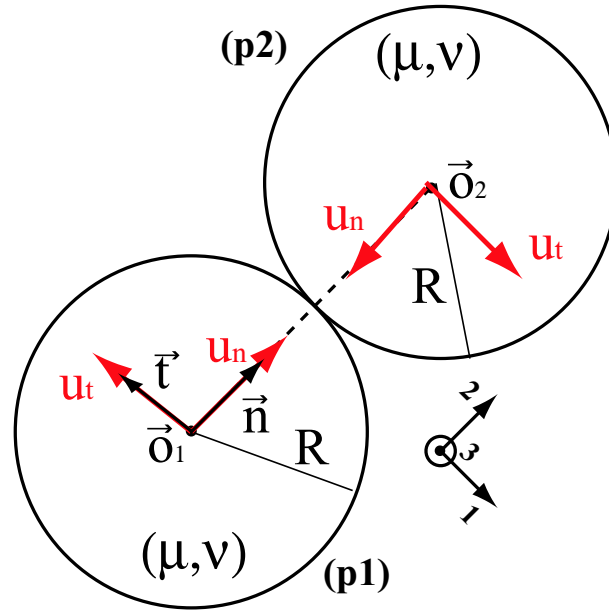


FIG. 1.6 – Contact entre deux sphères élastiques en tout point identiques ( $p1$ ) et ( $p2$ ) et déplacements normaux  $\vec{u}_n$  et tangentiels  $\vec{u}_t$ .

La prise en compte de toutes ces caractéristiques et processus dans les lois élastoplastiques, pour se rapprocher au plus près de la description des matériaux réels, peut rendre très complexe la résolution analytique du problème.

Lorsque l'on est en présence d'un comportement irréversible, la déformation n'est pas une fonction univoque de la contrainte. L'évolution est dépendante des déformations antérieures c'est-à-dire du chemin de contrainte suivi.

Les lois de comportement doivent alors être décrites de façon incrémentale et le comportement est intégré sur le chemin de contrainte. L'histoire du chargement subi par un volume élémentaire, détermine son état de contrainte final.

## 1.4 Le milieu granulaire à l'échelle microscopique

Une fois qu'un échantillon a été testé en laboratoire et soumis à différents chemins de contraintes, il est possible de réunir le jeu de paramètres qui va entrer dans les lois de comportement élasto-plastiques ; ces paramètres sont ajustés de façon à décrire le plus fidèlement les résultats expérimentaux. Nous sommes donc en mesure de décrire et prédire le comportement macroscopique du matériau ; ce n'est pourtant pas suffisant car avec cette approche "empirique", si le comportement du matériau est bien prédit, la compréhension qu'on en a reste faible.

En effet, le comportement mécanique d'un agrégat granulaire doit nécessairement trouver son origine à l'échelle microscopique des grains ; on doit donc comprendre comment les propriétés des grains (constantes élastiques, formes) et des contacts intergranulaires (propriétés de frottement) influencent le comportement macroscopique de l'assemblage. Les lois élastoplastiques ne font que refléter en un sens ce passage "micro-macro", et il faut donc chercher l'information au niveau de l'objet le plus élémentaire de l'assemblage granulaire, le contact inter-granulaire.

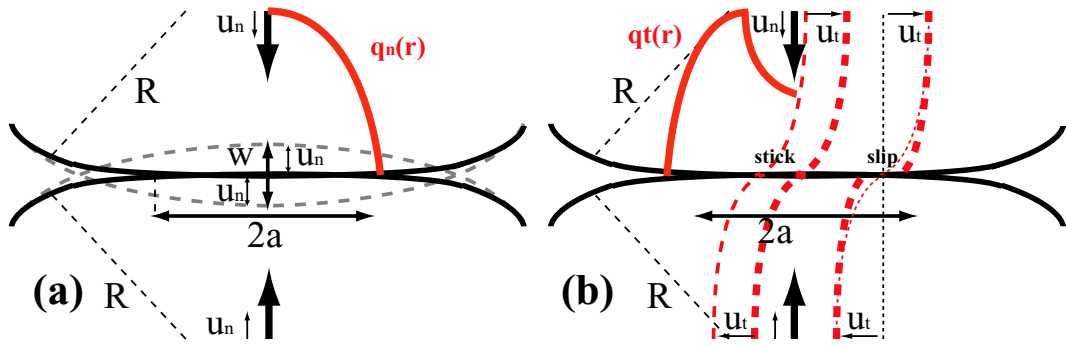


FIG. 1.7 – Représentations schématiques : (a) contact et distribution des tractions normales, (b) contact, glissement partiel et distribution des tractions tangentielles.

### 1.4.1 Mécanique du contact inter-granulaire

Considérons deux sphères ( $p1$ ) et ( $p2$ ) identiques en contact ; chacune est de rayon  $R$  et est composée d'un matériau élastique de module de cisaillement  $\mu$  et de coefficient de Poisson  $\nu$ . Les centres de ces sphères  $\vec{O}_1$  et  $\vec{O}_2$  sont déplacés axialement de  $\vec{u}_n$  et tangentiellement de  $\vec{u}_t$  comme illustré sur la figure 1.6, de telle façon qu'aucun mouvement relatif de rotation ( $\vec{\omega}_1 = \vec{\omega}_3 = 0$ ) ou de torsion ne soit permis ( $\vec{\omega}_2$ ). De part la symétrie du problème, les déplacements normaux et tangentiels du centre de la région de contact  $O^{(C)}$  par rapport aux centres des sphères seront respectivement  $\vec{u}_n$  et  $\vec{u}_t$ . Par la suite  $\vec{u}_n$  et  $\vec{u}_t$  feront référence aux déplacements normaux et tangentiels du contact.

#### Le contact de Hertz-Mindlin

Hertz (1882) a résolu le problème du contact entre deux sphères élastiques identiques ( $p1$ ) et ( $p2$ ) pressées axialement l'une contre l'autre par un déplacement  $\vec{u}_n$  [79] ; il montra que la distribution des tractions normales dans la zone de contact circulaire ( $C$ ) est donnée par :

$$q_n^{HM} = \frac{4\mu}{\pi R(1-\nu)} (Ru_n - r^2)^{1/2}, \quad (1.6)$$

où  $r$  est la distance radiale par rapport au centre de l'aire de contact  $O^{(C)}$ . Comme le rayon de la surface de contact circulaire  $a = \sqrt{Ru_n}$ , on a  $0 < r < \sqrt{Ru_n}$ .

Mindlin (1949) montra plus tard [105], que lorsque deux sphères pressées axialement l'une contre l'autre par un déplacement  $\vec{u}_n$  dans un premier temps sont par la suite déplacées tangentiellement de  $\vec{u}_t$ , la surface de contact et la distribution des tractions normales, ne sont pas affectées et la distribution des tractions tangentielles (asymétrique de part et d'autre de la zone de contact) est donnée par :

$$q_t^{HM} = \frac{4\mu u_t}{\pi(2-\nu)} (Ru_n - r^2)^{-1/2}. \quad (1.7)$$

Comme nous l'avons signalé auparavant, cette solution suppose qu'il n'existe ni mouvement de rotation, ni mouvement de torsion relatif entre les deux sphères ( $p1$ ) et ( $p2$ ). On constate que la traction tangentielle  $q_t$  est singulière à la circonférence de la surface de contact, à l'endroit justement où la traction normale  $q_n$  devient nulle. Par conséquent, il est nécessaire de prendre en compte la possibilité de glissement au niveau de la zone de contact [105] [106] [107]. Dans cette solution le glissement au niveau de la surface de contact peut être partiel ; s'il a lieu, il



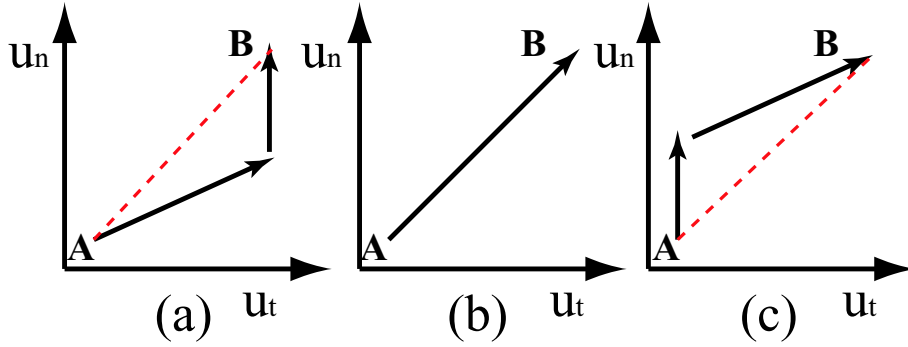


FIG. 1.8 – Différents chemins de chargement (a), (b), (c),  $f(du_n, du_t)$  d'un matériau depuis un état initial  $A$  identique ( $u_n = 0, u_t = 0$ ) et aboutissant à un état final  $B$  identique,  $(u_n, u_t)$ .

apparaît dans un anneau circulaire périphérique ( $r_s \leq r \leq a$ ); pour un déplacement normal  $\vec{u}_n$  donné créant une surface de contact  $S^{(C)}$  de rayon  $a$ , appliquer un petit déplacement tangentiel  $\vec{u}_t$  entraîne un petit mouvement relatif tangentiel sur une partie de la zone de contact qui glisse ("slip"), alors qu'aucun mouvement relatif n'a lieu sur le reste de la surface de contact qui adhère ("stick").

### Le contact de Walton

Une solution intéressante proposée par Walton [158], montre qu'un déplacement tangentiel  $\vec{u}_t$  ne cause pas nécessairement de glissement; Walton considéra le cas particulier où les déplacements normaux et tangentiels sont appliqués simultanément et proportionnellement, c'est-à-dire,  $u_t = cu_n$ , où  $c$  est une constante.

Dans ce cas particulier, les distributions de tractions normales et tangentielles sont données par :

$$\begin{cases} q_n^W = \frac{4\mu}{\pi R(1-\nu)}(Ru_n - r^2)^{1/2}, & ; \\ q_t^W = \frac{8\mu c}{\pi R(2-\nu)}(Ru_n - r^2)^{1/2}, & . \end{cases} \quad (1.8)$$

A la différence de la solution de Hertz-Mindlin, ici les tractions normales et tangentielles sont proportionnelles ( $q_t^W \propto q_n^W$ ) pour tout  $r$  et par conséquent le glissement, s'il a lieu, se produira cette fois sur la totalité de la zone de contact.

### La forme différentielle

Les différentes solutions obtenues pour les distributions de tractions tangentielles (cas de Hertz-Mindlin et cas de Walton) résultent on l'a vu, de la différence des chemins de chargement supposés : ( $\tau^{HM}$ ) déplacements normal puis tangentiel dans le cas de Hertz-Mindlin, ( $\tau^W$ ) déplacements normal et tangentiel simultanés et proportionnels dans le cas de Walton.

Pour pouvoir considérer un chemin de chargement quelconque ( $\tau$ ), il est possible d'écrire la solution de Hertz-Mindlin reliant les tractions aux déplacements sous une forme différentielle :

$$\begin{cases} dq_n = \frac{2\mu}{\pi(1-\nu)}(Ru_n - r^2)^{-1/2} du_n, & ; \\ dq_t = \frac{8\mu}{\pi(2-\nu)}(Ru_n - r^2)^{-1/2} du_t, & . \end{cases} \quad (1.9)$$

où  $dq_n$  et  $dq_t$  sont les incréments de tractions normales et tangentielles de la zone de contact et  $du_n$  et  $du_t$  sont les incréments de déplacements normaux et tangentiels du contact.

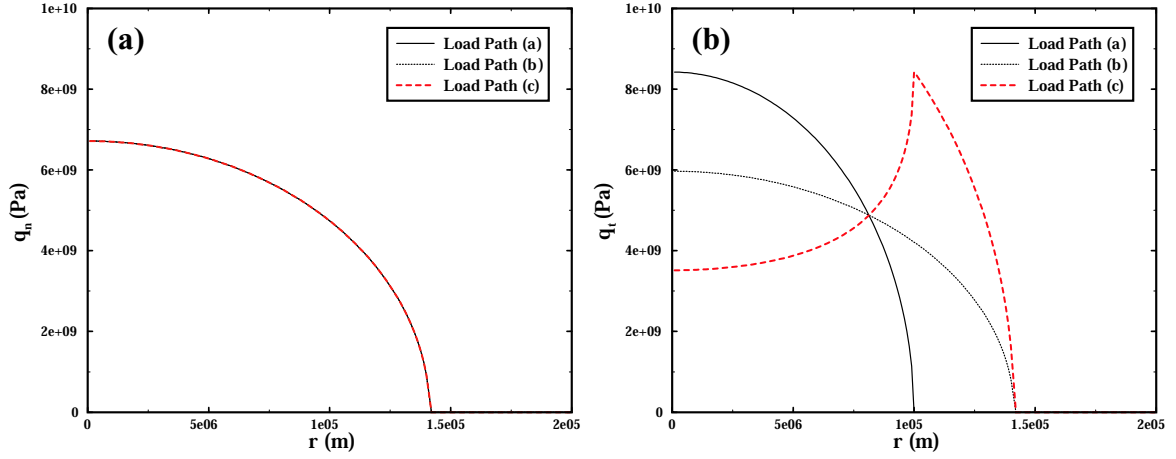


FIG. 1.9 – Champs de tractions (a) normales et (b) tangentielles résultant de trois chemins de chargement différents (a), (b) et (c) (voir figure 1.8) ; le champ des tractions normales est identique pour les trois chemins ("path-independant") ; le champ des tractions tangentielles est fonction du chemin de chargement suivi ("path-dependant").

Etant donné que cette solution différentielle est dérivée de la solution de Hertz-Mindlin,  $dq_t$  résulte d'un déplacement tangentiel  $du_t$  en conservant le déplacement normal  $\vec{u}_n$  fixé ; le déplacement tangentiel  $du_t$  est lié au déplacement normal  $du_n$  par  $du_t = c(\tau)du_n$ , où  $\tau$  est le paramètre caractérisant l'histoire du chargement.

Dans ces conditions, on peut réécrire l'équation 1.9 comme :

$$dq_t = \frac{8\mu c(\tau)}{\pi(2-\nu)} (Ru_n - r^2)^{-1/2} du_n, \quad (1.10)$$

### Lois de contact

En intégrant ces équations sur le chemin de chargement approprié  $\tau^{HM}$  ou  $\tau^W$ , on retrouve bien sûr à la fois les solutions de distributions de tractions de Hertz-Mindlin et celles de Walton.

Finalement, pour n'importe quel état du contact entre les particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) résultant des déplacements  $u_n(\tau)$  et  $u_t(\tau)$  le long du chemin de chargement  $\tau$ , les tractions  $dq_n$  et  $dq_t$  peuvent être intégrées sur la surface de contact  $S^{(C)}(\tau)$  afin d'obtenir les forces d'interactions normales  $f_n^{(C)}(t)$  et tangentielles  $f_t^{(C)}(t)$  au contact ; on obtient alors les lois de contacts de type *force-déplacement* :

$$f_n^{(C)} = \int_{S^{(C)}} q_n^{(C)}(u_n) dS = \frac{8}{3} \frac{\mu}{1-\nu} R^{1/2} u_n^{3/2}, \quad (1.11)$$

et

$$f_t^{(C)} = \int_{S^{(C)}} \int_{\tau} dq_t^{(C)}(u_n(\tau), c(\tau)) dS = \int_{S^{(C)}} q_t^{(C)} dS. \quad (1.12)$$

Si on peut intégrer  $f_n^{(C)}$  qui est fonction exclusivement de l'état final  $u_n$ , pour intégrer  $f_t^{(C)}$  il faut connaître explicitement la forme du chemin de chargement  $\tau$ . Néanmoins, sans connaître  $\tau$ , on peut tout de même calculer les rigidités de contacts normales  $k_n^{(C)}$  et tangentielles  $k_t^{(C)}$  ; elles sont obtenues en calculant  $k_n = \frac{df_n}{du_n}$  et  $k_t = \left. \frac{df_t}{du_t} \right|_{u_n}$ , soit :

$$\begin{cases} k_n^{(C)} = \frac{4\mu}{1-\nu} R^{1/2} u_n^{1/2}, & ; \\ k_t^{(C)} = \frac{8\mu}{2-\nu} R^{1/2} u_n^{1/2}, & . \end{cases} \quad (1.13)$$

On voit donc que ces rigidités normales et tangentielles ne sont fonction que de la valeur de  $u_n$  et sont, par conséquent, indépendantes de l'histoire du chargement du contact  $\tau$ . Ce sont ces rigidités que nous utiliserons dans les lois de contact utilisées dans les simulations numériques pour nos différentes études. Néanmoins, nous gardons à l'esprit que la force tangentielle  $f_t^{(C)}$  reste elle dépendante du chemin de chargement suivi.

### Dépendance au chemin de chargement

Pour illustrer ce propos, nous considérons en figure 1.8 trois chemins de chargement différents  $(\tau_a), (\tau_b)$  et  $(\tau_c)$  à partir du point  $A$  avec au final au point  $B$  les mêmes déplacements normaux  $\vec{u}_n$  et tangentiels  $\vec{u}_t$ ; numériquement nous pouvons facilement calculer les distributions de tractions normales  $q_n^{(C)}$  et tangentielles  $q_t^{(C)}$  au point  $B$  en intégrant  $dq_n^{(C)}$  et  $dq_t^{(C)}$  données par les équations 1.9. On pourrait ensuite calculer les forces de contact résultantes  $f_n^{(C)}$  et  $f_t^{(C)}$  qui sont les quantités qui vont réellement nous intéresser numériquement; cependant, pour illustrer notre propos sur la dépendance au chemin de chargement, nous présentons donc en figure 1.9 les résultats des calculs pour les distributions de tractions normales et tangentielles pour chacun des chemins  $(a), (b)$  et  $(c)$ .

Nous constatons que la distribution des tractions normales résultante  $q_n^{(C)}(r)$  est identique pour les trois chemins considérés (et par suite, le résultat est le même pour la force de contact  $f_n^{(C)}$ ; par contre, les distributions des tractions tangentielles résultantes  $q_t^{(C)}(r)$  sont différentes pour les trois chemins considérés (et en conséquence, les forces de contact tangentielles  $f_t^{(C)}$  sont également différentes).

On remarquera qu'aucune des formes de ces distributions tangentielles de tractions ne laissent penser qu'il y ait eu à priori un glissement au cours du chargement [79]

### Contact de deux sphères - Déchargement

Nous illustrons brièvement la réponse mécanique d'un contact inter-granulaire lors d'un déchargement; nous supposons que deux grains ont été dans un premier temps pressés en contact de telle façon que des tractions normales et tangentielles se soient développées au niveau de la zone de contact et nous postulons que la friction au contact a été suffisamment importante (rugosité de la surface des grains) pour qu'il n'y ait pas eu de glissement lors du chargement; dans un deuxième temps, le contact est déchargé, c'est-à-dire que le déplacement  $\vec{u}_n$  est réduit tout en appliquant un déplacement tangentiel  $\vec{u}_t$ ; dans ces conditions, le glissement au contact va pouvoir être favorisé.

### Implications pour un assemblage granulaire

Nous comprenons maintenant un peu mieux comment le comportement mécanique d'un assemblage de grains est nécessairement lié à la mécanique du contact inter-granulaire; nous constatons également qu'appréhender la réponse mécanique de l'objet élémentaire qu'est le contact inter-granulaire n'est pas aussi simple; en effet même pour un problème de contact simplifié (pas de rotation, ni de torsion relative des grains), pour des conditions de chargement local différentes, nous venons de voir que la distribution des tractions tangentielles et donc les forces

d'interaction tangentielles entre les grains vont être modifiées ; tous ces effets microscopiques de dépendance au chemin de chargement mais aussi de déformations irréversibles (tel qu'on peut considérer le glissement au contact) vont jouer un rôle fondamental dans la réponse macroscopique de l'assemblage ; cependant, on entrevoit déjà la difficulté pour remonter à l'échelle du matériau : car comprendre la mécanique d'un contact inter-granulaire isolé ne résout pas tout, il faut comprendre la mécanique d'une assemblée de grains en interactions, ce qui est un problème encore plus délicat comme nous le verrons.

## 1.5 De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique

Nous venons de voir quelques caractéristiques des contacts intergranulaires ; si ces propriétés microscopiques importantes déterminent en partie le comportement macroscopique d'un matériau granulaire, les propriétés de l'assemblage des grains sont elles aussi fondamentales car ce sont elles qui déterminent le passage du comportement de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.

Dans un premier temps, nous allons voir comment la non-linéarité du contact intergranulaire se transmet à l'échelle de l'agrégat granulaire ; on pourra se rapporter au chapitre 4 pour une discussion plus détaillée. Ensuite, nous ferons état de l'existence d'une échelle intermédiaire dans l'arrangement granulaire tout aussi importante que l'échelle microscopique du contact pour le comportement macroscopique ; elle fait intervenir la structure du réseau de contacts et surtout l'hétérogénéité des forces qui s'y développe ; elle correspond à l'échelle de transmission des efforts dans le milieu granulaire ; le chapitre 3 présente une illustration de ces effets.

### 1.5.1 Elasticité Non-Linéaire

Comme nous l'avons déjà évoqué, remonter aux lois de comportement à partir des mécanismes mis en jeu à l'échelle des grains est très important ; c'est pourquoi, nous avons introduit précédemment la théorie du contact de Hertz-Mindlin entre deux solides élastiques de constantes élastiques  $\mu$  et  $\nu$  (par exemple), sans détailler le calcul élastique. A l'échelle microscopique, lorsque deux grains sphériques en contact ponctuel sont soumis à une force de compression  $F$ , leurs centres se rapprochent d'une distance  $2\vec{u}_n$  (voir figure 1.6) , les grains se déforment et une surface de contact  $S^{(C)}$  de rayon  $a$  se développe. L'évolution de la surface de contact entraîne une relation non-linéaire entre la force appliquée  $F$  et la distance d'interpénétration  $w = 2u_n$  :

- Le concept géométrique d'interpénétration fait croître la surface de contact comme  $S^{(C)} \propto a^2 = 2u_n R$ .
- Nous avons calculé les raideurs normales  $k_n^{(C)}$  et tangentielles  $k_t^{(C)}$  du contact de Hertz-Mindlin (voir les équations 1.13), et nous avons vu qu'elles évoluaient comme le déplacement normal  $u_n^{1/2}$  ; plus la surface de contact augmente entre les grains, plus les raideurs deviennent importantes ; le contact durcit de façon non-linéaire avec l'interpénétration et en conséquence les lois d'interactions normales  $f_n^{(C)}$  et tangentielles  $f_t^{(C)}$  vont être non-linéaires :

$$\begin{cases} f_n^{(C)} \propto \sqrt{R} u_n^{3/2}, & ; \\ \delta f_t^{(C)} \propto \sqrt{R} u_n^{1/2} \delta u_t, & . \end{cases} \quad (1.14)$$

En remontant à l'échelle des milieux continus [36] [160] [159] en postulant une homogénéisation statistique, le comportement de l'agrégat macroscopique reflète le comportement à l'échelle microscopique ; il se comporte comme un matériau élastique non-linéaire dont les modules élastiques ( $K$  et  $\mu$  par exemple) seront d'autant plus important que la pression de confinement  $p$

est élevée. La Théorie de Milieu Effectif prédit une évolution des modules élastiques comme  $(K, \mu) \propto p^{1/3}$ . Cette prédiction peut être testée par des mesures acoustiques en mesurant la vitesse de propagation des ondes ultrasonores dans le milieu granulaire. Comme la vitesse  $c$  varie comme  $\sqrt{K, \mu}$ , pour vérifier la validité du contact de Hertz-Mindlin à la base de la Théorie de Milieu Effectif, les vitesses devraient dépendre de façon non-linéaire avec la pression de confinement  $p$  selon  $c \propto p^{1/6}$ .

En fait, si les mesures acoustiques présentent en effet une dépendance non-linéaire, la loi puissance sur les vitesses serait plus proche de  $p^{1/4}$  (d'où une dépendance en  $p^{1/2}$  pour les modules élastiques). Certains modèles ont donc remis en cause la validité de la loi de contact de Hertz pour expliquer ces divergences ; en effet la théorie de Hertz traite le contact entre des grains idéalisés (sphériques, homogénéité des propriétés) ; pour traiter l'angularité, les aspérités, l'hétérogénéité des grains, d'autres modèles de contact ont été élaborés aboutissant à des comportements non-linéaires microscopiques et macroscopiques différents.

Le chapitre 4 est justement consacré à l'étude de ce problème et les résultats qui y sont présentés, montrent que l'origine du désaccord viendrait plutôt de la modification progressive du réseau de contacts lorsque la pression augmente. La compression a pour effet de rapprocher les grains ce qui tend à créer de nouveaux contacts. En faisant une analogie avec les microfissures ("cracks") de certains matériaux, on peut dire que lors des déformations, des contacts s'ouvrent (disparaissent) et d'autres se ferment (apparaissent) ; cette seconde source de non-linéarité modifie donc les propriétés macroscopiques de l'assemblage et souligne l'importance de l'arrangement dans l'édifice granulaire. La "texture" granulaire devient aussi importante que la mécanique du contact élémentaire pour comprendre le comportement de l'agrégat.

### 1.5.2 Notion de texture granulaire

Le comportement moyen d'un assemblage de grains est le résultat de l'interaction des particules entre elles par l'intermédiaire des contacts comme on vient de le voir. Quelle que soit la nature mécanique de ces contacts, le réseau géométrique qu'ils déterminent implique une structure particulière qui constitue une composante fondamentale de la description des milieux granulaires. Cette structure correspond à ce que l'on appelle la texture du milieu granulaire et elle va être influencée par différents facteurs.

- La forme des grains : si les grains ne sont pas sphériques mais de forme allongée, on peut avoir une orientation préférentielle des grains dans l'assemblage qui va engendrer des directions de contact privilégiées.
- Le mode de préparation de l'assemblage : selon le mode de dépôt des grains (par exemple "point source", pluviation, ...) on obtiendra ou non des directions de contacts privilégiées.
- L'histoire des déformations : selon les sollicitations en déformation : pour un cisaillement simple par exemple, on obtiendra une direction de contacts privilégiée (selon la diagonale "compactante").

Si des directions de contact sont privilégiées ( $\mathcal{P}(\theta)$ ), l'assemblage est anisotrope du point de vue de la texture de son réseau de contact. Il est alors tentant de chercher à relier la texture et l'anisotropie des propriétés mécaniques macroscopiques. Ainsi, l'introduction de variables géométriques dans le formalisme élasto-plastique pourrait permettre "d'explicitier" les propriétés texturales de l'assemblage et donc de décrire de façon plus réaliste le comportement du matériau.

Dans les observations expérimentales, nous avons vu que des assemblages lâches et denses de grains (les préparations sont différentes) avaient des propriétés mécaniques très différentes que ce soit en dessous du seuil de rupture ou au niveau du seuil de rupture ; on a également vu que les déformations engendraient l'évolution des propriétés mécaniques (l'écroutissage) ; la

texture rend donc compte à la fois de l'histoire de la préparation mais également de l'histoire des déformations ; elle est donc fondamentale pour comprendre le comportement mécanique car elle est au coeur du passage "micro-macro".

### 1.5.3 Désordre de contacts et hétérogénéité du réseau de forces

Les assemblages granulaires présentent un désordre de contacts et le réseau de forces qui se développe sur ce réseau est très hétérogène, que l'on considère des grains frottants ou non.

Les forces de contacts entre grains s'exercent sur des distances très faibles et les grains même idéalisés comme des sphères pourront être légèrement polydispersés ; la polydispersité ainsi que le frottement solide sont à l'origine de la répartition hétérogène des forces.

Les expériences de photoélasticimétrie (biréfringence induite par les efforts) (et les simulations numériques plus récemment) sur des assemblages de grains photoélastiques et confinés montrent qu'une contrainte extérieure appliquée sur ce milieu tend à se *propager* selon des chemins impliquant préférentiellement certains grains en contact ; ainsi l'essentiel de la charge appliquée semble soutenue par un faible nombre de grains. Ces grains forment donc entre eux un réseau de contacts sur lequel les forces se concentrent ; c'est ce que l'on appelle communément les chaînes de forces.

Cette hétérogénéité de la transmission des forces semble être une propriété fondamentale des milieux granulaires si on se réfère à un matériau élastique où les contraintes sont distribuées de façon homogène. D'autre part il existe une échelle associée à ce réseau de forces qui caractérise la longueur de la transmission des forces dans le milieu (obtenues par des fonctions de corrélations) ; cette échelle intermédiaire, entre l'échelle élémentaire donnée par la taille des grains et l'échelle macroscopique de l'assemblage, pose le problème de la définition du volume représentatif dans les milieux granulaires dont on a parlé au tout début de ce chapitre.

Au fond, on ne sait pas encore très bien répondre à la question de savoir si ces chaînes de forces sont si importantes pour la réponse macroscopique ; il se pourrait que moyennées sur un volume suffisant, leur influence (qui est significative localement) ne soit pas aussi critique qu'on aurait pu le penser (l'étude présentée au chapitre 5 se rattache directement à cette problématique). Néanmoins, l'organisation des chaînes de forces et plus généralement la texture granulaire constitue la mémoire du milieu et *fige* son histoire après chaque sollicitation mécanique.

## 1.6 Conclusions

Le comportement mécanique d'un matériau granulaire n'est pas facile à appréhender. Nous avons vu que l'approche mécanique des milieux continus lorsqu'elle traite le matériau granulaire à l'aide de modèles "simples" ne permet pas de rendre compte de toutes les observations expérimentales ; lorsque les modèles utilisés sont plus complexes, le nombre de paramètres augmente et ces derniers perdent de leurs significations physiques ; le comportement est bien décrit mais la compréhension des processus mis en jeu est faible ; c'est la limite de la formulation implicite des propriétés du matériau. Nous avons également survolé la mécanique du contact intergranulaire et nous avons vu que le comportement de cet objet élémentaire est complexe en soit. Finalement le passage "micro-macro" fait intervenir la structure de l'arrangement des grains (plus généralement la texture) qui présente des propriétés inattendues. Comment faire le lien entre toutes ces échelles et ces différents niveaux de complexité et lever les ambiguïtés de l'approche continue ? La modélisation numérique basée sur l'approche des Eléments Discrets apporte une solution intéressante. Les grains sont traités individuellement de même que leurs interactions mécaniques au niveau des contacts, et l'arrangement est traité de façon explicite ce qui permet de réaliser

le passage micro-macro de façon la plus réaliste. La simplification dans ce type d'approche tient dans la modélisation des grains dont la géométrie est souvent idéalisée (sphères, ellipsoïdes) par rapport aux formes variées rencontrées dans les granulaires réels. Cette méthode numérique sera traitée dans le chapitre suivant et c'est sur sa base que seront développés tous les travaux que nous avons réalisés au cours de cette thèse.

# La Méthode des Eléments Discrets

## Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>31</b>
<b>2.2</b>	<b>Particules en mouvements et en interactions</b> . . . . .	<b>33</b>
<b>2.3</b>	<b>Schéma de résolution numérique</b> . . . . .	<b>34</b>
<b>2.4</b>	<b>Conditions limites aux frontières</b> . . . . .	<b>35</b>
2.4.1	Détection des Interactions de Paires . . . . .	37
2.4.2	Lois d'Interaction au Contact . . . . .	42
<b>2.5</b>	<b>Intégration du Mouvement</b> . . . . .	<b>48</b>
2.5.1	Schémas numériques d'intégration . . . . .	49
2.5.2	Temps de contact et échantillonnage critique . . . . .	53
2.5.3	Modélisation d'une collision binaire . . . . .	53
2.5.4	Echantillonnage critique . . . . .	54
2.5.5	Dissipation d'énergie . . . . .	54
<b>2.6</b>	<b>Calcul du tenseur des contraintes</b> . . . . .	<b>55</b>
<b>2.7</b>	<b>Structure des données - Implémentation Série</b> . . . . .	<b>57</b>
<b>2.8</b>	<b>Implémentation parallèle</b> . . . . .	<b>58</b>
2.8.1	Conclusions et Perspectives . . . . .	60

---

## 2.1 Introduction

Les méthodes des éléments discrets ont pour origine la dynamique moléculaire ; l'objectif de la modélisation numérique des milieux particulaires est le suivant : à partir de la considération des particules élémentaires constituant un milieu et de la connaissance de leurs interactions réciproques, la méthode de modélisation devrait être capable de prévoir le comportement de ce milieu ; il s'agit donc, de calculer le mouvement des particules (les éléments discrets) composant un système, c'est-à-dire de calculer la variation de la quantité de mouvement et du moment angulaire de ces particules en leur appliquant la loi fondamentale de la dynamique ; on peut alors suivre l'évolution globale de ce système. A l'origine, cette méthode a été employée pour étudier les liquides ; elle fût par exemple utilisée pour élaborer un modèle d'Argon liquide en utilisant des potentiels inter-atomiques de type Lehnard-Jones [126].

Cette méthode a été adaptée par Cundall et Strack [26] pour permettre la simulation du comportement des milieux granulaires ; dans ce cas, la nature des forces d'interaction est très souvent exclusivement répulsive. Depuis, la modélisation numérique des milieux granulaires a



subi un essor considérable, et la difficulté inhérente à la modélisation de ces milieux a entraîné le développement d'autres méthodes numériques. Chacune de ces méthodes (par exemple la méthode "Event-Driven" [96] [5] ou bien la méthode "Contact Dynamics" [77] [146]) présente des avantages et des inconvénients et sera plus ou moins bien adaptée à l'étude d'un problème donné.

Résoudre les équations du mouvement des particules nécessite des expressions *explicites* des forces d'interactions; on parlera d'interactions de contact pour un milieu granulaire; le contact dans la Méthode numérique des Eléments Discrets est conceptualisé par l'interpénétration des particules (c'est-à-dire leur chevauchement); c'est pourquoi, on qualifie parfois les particules sphériques (la géométrie la plus simple donc la plus utilisée) dans ce type de modélisation de *sphères molles* à la différence d'autres méthodes numériques de modélisation des milieux granulaires où les particules sont *dures* et ne peuvent pas s'interpénétrer. Le qualificatif de "mou" est bien sûr exagéré car les interactions de contact sont généralement fortement répulsives.

Si la mécanique du contact devrait nous permettre d'obtenir des expressions des forces de contact entre les particules, le problème du contact solide-solide dans des conditions générales est extrêmement complexe [79]; des schémas de forces de contact simplifiés sont utilisés dans les simulations car premièrement comme on vient de le dire, l'expression analytique la plus générale n'est pas accessible et deuxièmement, plus la loi est simple, plus elle sera facile à implémenter et surtout plus efficace sera la modélisation d'un nombre important de particules en interactions; nous verrons au cours de ce chapitre que pour modéliser d'une façon représentative le comportement d'un milieu, la taille du système considérée (en nombre de particules) est importante; nous verrons également, que le fait d'introduire en plus des forces centrales d'interactions, des forces transversales de frottement, même simples, compliquent sérieusement la modélisation, surtout en géométrie tri-dimensionnelle.

Nous ne traiterons pas en détail dans ce chapitre des modèles constitutifs de contact entre particules solides; on se rapportera au chapitre 1, où quelques modèles importants seront présentés et leur implémentation numérique discutée. Ici, nous considérerons simplement des modèles de contact type "ressorts" et "amortisseurs", normaux et tangentiels, au niveau de chaque contact, avec une limite de friction sur la force tangentielle; la possibilité de comportement non-linéaire des "ressorts" et des "amortisseurs" sera simplement évoquée.

Dans la Méthode des Eléments Discrets, le schéma numérique de résolution est séquentiel et explicite, basé sur un schéma de différences finies qui s'accommodent bien d'un "échantillonnage" périodique; il est important, lorsqu'on aborde la dynamique des systèmes particuliers de prendre des précautions sur les échelles de temps et les distances caractéristiques du problème; en effet, la méthode repose sur un échantillonnage (c'est-à-dire, un pas de temps de calcul) suffisamment petit, pour que, durant un cycle, les perturbations imposées au niveau des contacts d'une particule, ne puissent pas se propager plus loin que ses "voisines" immédiates (c'est-à-dire partageant un contact); de cette façon, on s'assure que les forces agissantes sur les particules seront déterminées exclusivement par leurs interactions de contacts. Comme la vitesse à laquelle une perturbation se propage dans un matériau est fonction uniquement des propriétés physiques de ce dernier, nous verrons qu'on peut facilement contraindre l'échantillonnage afin que cette condition soit vérifiée.

La méthode la plus générale des Eléments Discrets permet de modéliser des particules réellement déformables et de formes complexes (depuis l'ellipsoïde au polygone). L'implémentation de la méthode développée au cours de cette thèse se limite au cas "simple" des particules sphériques non-déformables, interpénétrables; l'avantage tient à la fois au nombre de particules modélisables mais aussi à l'extension du modèle à trois dimensions qui devient assez facile à mettre en oeuvre. Ceci nous a permis notamment de conduire des simulations réalistes pour l'étude de

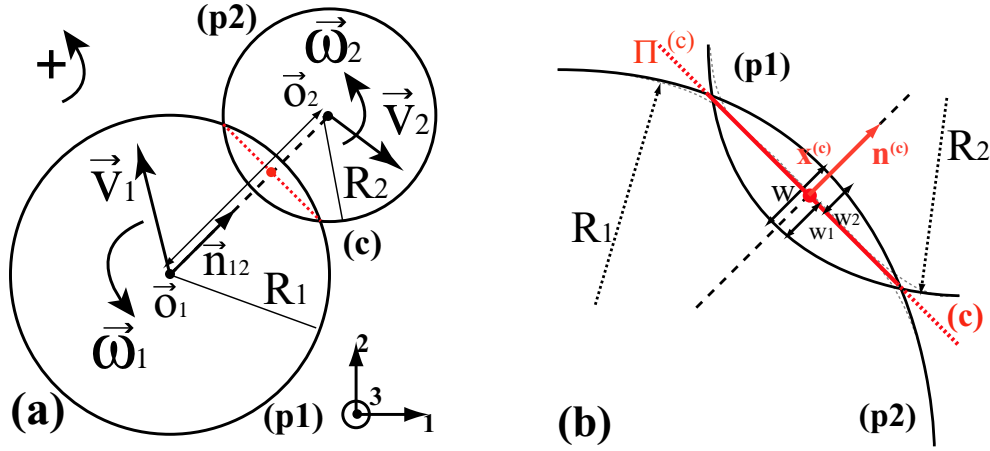


FIG. 2.1 – Deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en interaction : (a) Mouvements relatifs des deux particules en translation et en rotation ; (b) interpénétration  $w$  entre les particules partageant la surface de contact ( $C$ ).

la déformation des matériaux granulaires non-consolidés et consolidés (voir les chapitres 6 et 7 respectivement).

## 2.2 Particules en mouvements et en interactions

Avant de considérer un système de particules, considérons plus simplement le problème de deux particules en mouvements et en interactions car c'est la *bricole* à la base de la modélisation numérique : soient deux particules sphériques ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en mouvement relatif l'une par rapport à l'autre (voir figure 2.1(a)) et partageant une surface de contact ( $C$ ) (voir figure 2.1(b)) :

- Les rayons des particules sont rayon  $R_1$  et  $R_2$ .
- Les positions des centres de gravité  $\vec{O}_1$  et  $\vec{O}_2$  de ces particules sont respectivement  $\vec{x}_{(1)}$  et  $\vec{x}_{(2)}$  et leurs rotations sont  $\vec{\theta}_1$  et  $\vec{\theta}_2$  (définies positives dans le sens anti-horaire).
- Leurs vitesses de translation sont  $\vec{x}_1$  et  $\vec{x}_2$ , leurs vitesses de rotation  $\vec{\omega}_1$  et  $\vec{\omega}_2$ .
- Leurs accélérations sont  $\vec{\ddot{x}}_1$  et  $\vec{\ddot{x}}_2$ , leurs accélérations angulaires  $\vec{\ddot{\omega}}_1$  et  $\vec{\ddot{\omega}}_2$ .
- Chaque particule possède une masse  $m$  et un moment d'inertie  $I$  et des modules élastiques  $\mu$  et  $\nu$ .
- La gravité est désignée par  $\vec{g}$  ; Dans les études réalisées au cours de cette thèse, nous travaillerons toujours en supposant les forces gravitationnelles négligeables par rapport aux autres forces mises en jeu dans le système de particules ; nous poserons donc  $\vec{g} = \vec{0}$ .
- L'interpénétration des particules en contact  $w$  est fortement exagérée sur les figures 2.1 par rapport aux interpénétrations des particules dans nos simulations.
- On définit les deux vecteurs  $\vec{n}^{(c)} = \vec{n}^{(p1p2)}$  et  $\vec{t}^{(c)} = \vec{t}^{(p1p2)}$  perpendiculaires entre eux, qui permettront de décomposer, la vitesse relative  $\vec{x}^{(p1p2)}$  des particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) et la force  $\vec{f}^{(c)} = \vec{f}^{(p1p2)}$  s'exerçant au point de contact ( $c$ ) selon une composante normale et composante tangentielle,  $\vec{x}_n^{(p1p2)}$  et  $\vec{x}_t^{(p1p2)}$  pour la vitesse et  $\vec{f}_n^{(c)}$  et  $\vec{f}_t^{(c)}$  pour la force.

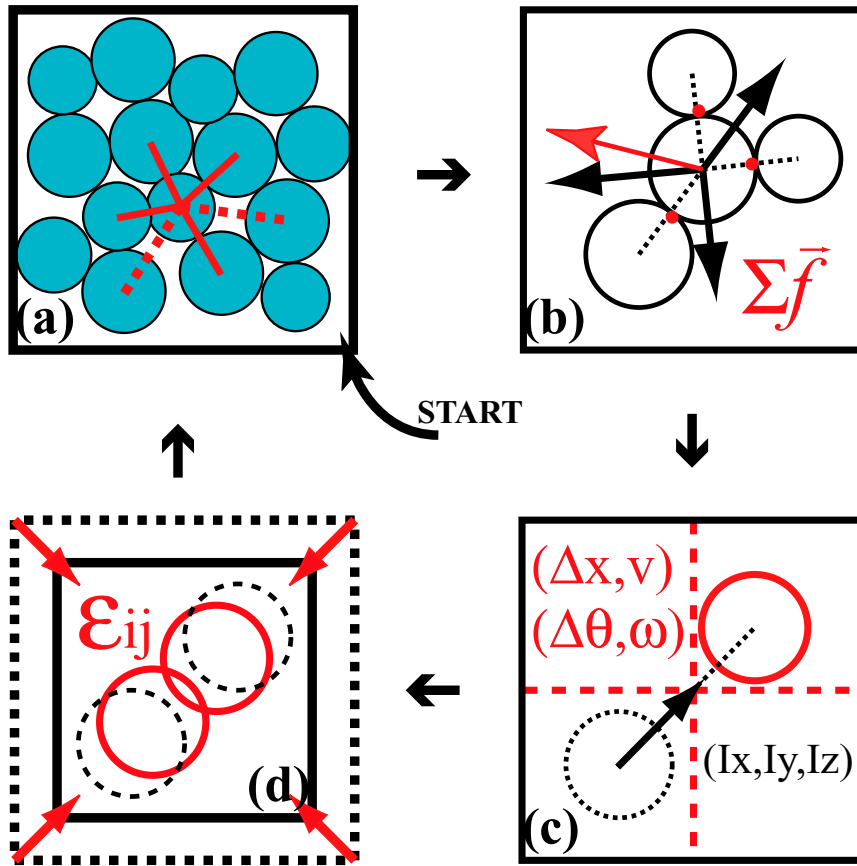


FIG. 2.2 – Processus de résolution dans un algorithme de "Dynamique Moléculaire" de type "Eléments Discrets" : 4 étapes sont réalisées au cours d'un cycle de calcul : (a) la recherche des paires de particules en interactions (c'est-à-dire recherche des contacts pour un milieu granulaire), (b) le calcul des forces d'interactions (de contact), (c-1) l'intégration du mouvement des particules en translation et en rotation, (c-2) lorsqu'une notion de voisinage est considérée pour la recherche des interactions, les nouvelles positions des particules sont testées par rapport à ce voisinage, et (d) forçage extérieur sur le système (déformation, perturbation locale, etc), ou modification de certaines conditions aux limites (frontières périodiques, frontières rigides, etc), modifications de certains paramètres physiques ou numériques.

### 2.3 Schéma de résolution numérique

Le cycle de calcul est un algorithme de type 'pas à pas' qui requiert la répétition d'un schéma de résolution que nous présentons :

- Au début de chaque cycle de calcul, le jeu d'interaction est mis à jour à partir de la position des particules ; en effet, ces interactions se forment et disparaissent au cours de la simulation en fonction des positions relatives des particules et de la portée des interactions.
- Une fois les interactions repérées, on applique une loi d'interaction entre les particules. Pour un milieu granulaire on applique à chaque contact une loi de type *force-déplacement* ; elle permet de calculer les intensités des forces de contact à partir du mouvement relatif des deux particules et du modèle constitutif utilisé.
- Lorsque toutes les forces de contact ont été évaluées et que la force nette et le moment résultant sur chaque particule ont été calculés, on applique l'équation du mouvement pour

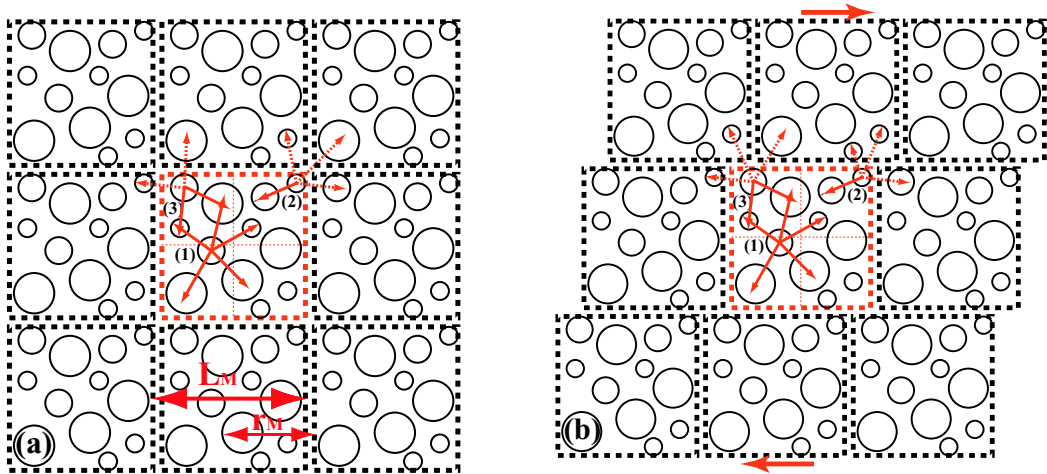


FIG. 2.3 – Conditions aux frontières du système : (a) frontières périodiques (répétition virtuelle dans les trois directions de l'espace d'un motif de configuration de particules et de forces de contact), (b) cisaillement dans une configuration de frontières périodiques; d'autres conditions de frontières sont possibles : frontières "physiques", rigides ou déformables.

déterminer et mettre à jour la position et la vitesse des particules.

- On peut enfin, si on le souhaite, modifier les conditions aux frontières du système (déformation macroscopique), ou effectuer un forçage du système (déformation locale), ou bien encore modifier un paramètre de la simulation.

## 2.4 Conditions limites aux frontières

Les systèmes de tailles finies et les systèmes infiniment grands peuvent se comporter très différemment. Il n'existe pas de réponse unique au problème de savoir quelle doit être la taille minimale à considérer pour qu'un système de taille finie se comporte de façon la plus proche possible d'un système infiniment grand.

Il existe plusieurs façons de définir les frontières qui délimitent un système dans l'espace; on peut considérer des frontières réelles, rigides (c'est-à-dire indéformables) ou bien flexibles (déformables et adaptatives), ou bien encore des frontières virtuelles périodiques, représentées en figure 2.3(a).

Si l'on considère des frontières physiques dans un système grande taille, seule une faible proportion des particules interagit avec ces frontières; ces particules ressentent les déviations induites par rapport aux conditions qui dominent au coeur du système; les autres particules (la majorité) évoluent dans un environnement qui n'est pas affecté par l'existence des frontières.

Si maintenant on considère un système de taille réduite, la majorité des particules évoluent dans un environnement modifié par les frontières. Considérons, par exemple, un système tridimensionnelle de faible taille contenant 1000 particules ( $10 \times 10 \times 10$ ); plus de la moitié des particules sont en interaction immédiate avec les frontières du système. Dans cette géométrie, la taille de ce système ne permettra pas de décrire correctement l'état qu'aurait une particule 'interne' dans un système de grande taille (ou une particule quelconque dans un système infiniment grand); le système est spatialement inhomogène du point de vue de ses propriétés.

Souvent, on ne s'intéresse pas au comportement des particules près des frontières, mais l'on cherche plutôt à décrire l'état homogène interne d'un système; seulement, les capacités de calcul

dont on dispose posent naturellement des limitations sur le nombre de particules modélisables et donc sur la taille du système.

La solution couramment utilisée pour résoudre ce type de problème, consiste à ne pas considérer des frontières réelles mais des frontières virtuelles; il est en effet possible de définir un système dont l'extension est limitée spatialement à une taille  $L$  mais, qui est libre de frontières physiques en utilisant des conditions de frontières périodiques.

L'introduction de ces frontières périodiques revient à considérer un espace infini composé d'une juxtaposition dans l'espace de copies d'un système donné (voir figure 2.3(a)). Ce système serait le motif de base sans un milieu infini.

Il y a des conséquences à cette périodicité :

- Une particule ( $p$ ) qui sortirait du système par l'une des frontières, réentrerait immédiatement dans le système par la frontière opposée; conceptuellement, il s'agit d'une particule différente ( $p'$ ) de celle qui a quitté le système ( $p$ ) mais qui aurait néanmoins exactement les mêmes propriétés.

Lorsque la particule ( $p$ ) de position  $x_i^{(p)}$  dans une direction quitte le système de dimension  $L_i$  dans cette même direction, c'est-à-dire,  $x_i^{(p)} < 0$  ou  $x_i^{(p)} > L_i$ , la position  $x_i^{(p')}$  de la nouvelle particule ( $p'$ ) qui rentre dans le système est :

$$x_i^{(p')} = x_i^{(p)} + \text{sign}(L_i - x_i^{(p)})L_i, \quad (2.1)$$

- Une particule ( $p$ ) proche d'une frontière dans une direction  $i$  donnée pourrait interagir avec des particules ( $p'$ ) proches de la frontière opposée; conceptuellement, de la même façon, la particule ( $p$ ) n'interagit pas avec les particules ( $p'$ ) mais avec des particules différentes ( $p''$ ) qui auraient les mêmes propriétés; la distance d'interaction  $r$  entre ( $p$ ) et ( $p''$ ) peut se calculer à l'aide des positions de ( $p$ ) et ( $p'$ ) selon que  $x_i^{(p)} > x_i^{(p')}$  ou  $x_i^{(p)} < x_i^{(p')}$  selon :

$$r = |x_i^{(p')} + \text{sign}(x_i^{(p)} - x_i^{(p')})L_i - x_i^{(p)}|, \quad (2.2)$$

- Dans un système de taille  $L_i$  dans la direction  $i$ , la distance d'interaction  $r^{(pp')}$  entre les particules ( $p$ ) et ( $p'$ ) ne peut pas dépasser la distance d'interaction maximale  $r_M = \min(L_1, L_2, L_3)/2$ , sous peine de prendre en compte plusieurs fois la même paire d'interactions.

$$r^{(pp')} = |x_i^{(p')} - x_i^{(p)}| < \min(L_1, L_2, L_3)/2, \quad (2.3)$$

En utilisant les conditions de frontières périodiques, il devient possible de modéliser des systèmes spatialement limités mais qui sont cependant spatialement homogènes du point de vue des propriétés considérées.

Comme nous venons de le voir, l'utilisation de conditions de frontières périodiques limite la portée des interactions entre particules à la moitié de la plus petite dimension du système  $\min(L_1, L_2, L_3)$ ; dans le cas d'un potentiel d'interaction de très courte portée, comme pour les granulaires, ce problème n'en est plus un; il conviendra cependant de se rappeler de cette limitation lors du calcul de longueurs de corrélations dans le système.

D'autre part, les frontières périodiques n'éliminent pas les effets de taille finie sur certaines propriétés macroscopiques comme nous pourrions le mettre en évidence au chapitre 7.

La taille minimale à considérer est donc fonction des propriétés du système considéré et doit en tout état de cause être supérieure aux longueurs de corrélations qui peuvent exister dans le système.

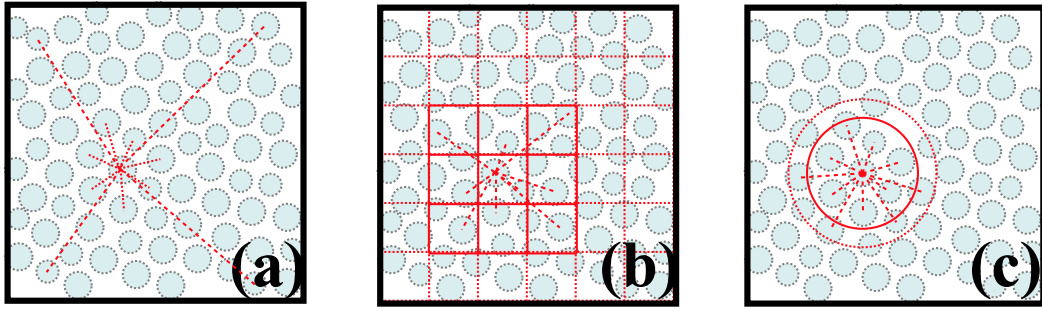


FIG. 2.4 – Techniques de recherche des paires de  $N$  particules en interactions : (a) évaluation de toutes les paires possibles ( $N \times N$ ), (b) partitionnement de l'espace en sous-domaines permettant de définir un voisinage et évaluation des paires de particules appartenant à des cellules voisines (9 et 27 cellules voisines en  $2D$  et  $3D$  respectivement), (c) évaluation des paires de particules dans un rayon ( $r_M + \epsilon_r$ ) où  $r_M$  est la distance d'interaction maximum (le plus gros diamètre de particules dans un granulaire sec) et  $\epsilon_r$  est une tolérance.

Seule une étude numérique considérant ces effets permettrait de s'assurer de la validité des résultats obtenus.

Il existe des techniques permettant d'imposer des déformations à des systèmes ayant ce type de conditions aux limites, sans violer la symétrie des conditions périodiques ; on peut par exemple imposer un champ de déformation homogène au système de particules en utilisant une déformation affine ( $u_i = \epsilon_{ij}x_j$ ) ; on peut même cisailer le système comme cela est représenté sur la figure 2.3(b).

### 2.4.1 Détection des Interactions de Paires

Dans un système composé de  $n$  particules, c'est la portée maximale des interactions qui constitue le paramètre critique pour le temps de modélisation. Plus la portée des interactions est importante, et plus il faudra tester de paires d'interactions. Dans un système granulaire non cohésif, la portée des interactions est réduite ; si  $R_M$  est le rayon des plus grandes particules du système, la portée maximale des interactions sera  $2R_M$  ; il serait donc inutile de tester toutes les paires de particules ; il faudrait donc pouvoir trouver rapidement les particules proches les unes des autres, c'est-à-dire pouvoir définir un voisinage d'interactions pour chaque particule ou bien pour un groupe de particules.

Nous allons présenter brièvement les méthodes de détection des interactions de paires par des définitions différentes de la notion de voisinage (se reporter à la figure 2.4) ; les ouvrages classiques de Dynamique Moléculaire [2] [127] traitent de ces techniques en détails.

#### Totalité des Paires

Comme nous venons de le mentionner, c'est la plus simple des méthodes à implémenter mais aussi la moins efficace en terme de volume de calcul, en particulier, lorsque la portée des interactions est petite par rapport à la taille du système considéré et, c'est justement le cas dans un matériau granulaire.

Cette méthode implique de considérer toutes les paires de particules possibles pour déterminer quelles sont les particules qui interagissent entre elles. La notion de voisinage est ici étendue à tout le système comme cela est représenté sur la figure 2.4(a) ; étant donné les réarrangements

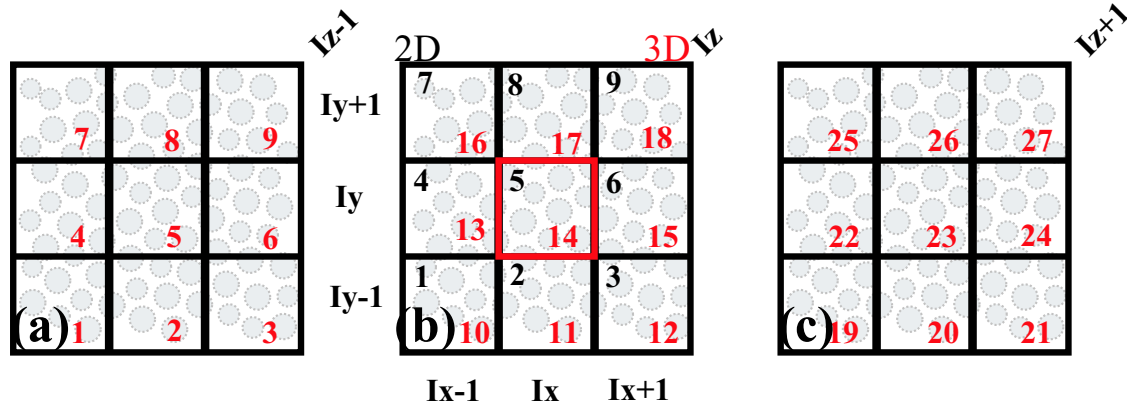


FIG. 2.5 – Partitionnement en cellules et indexation locale : la cellule centrale ( $I_x = k, I_y = l$ , et  $I_z = m$  en  $3D$ ) possède 8 et 26 cellules voisines à  $2D$  et  $3D$  respectivement ( $I_x = k \pm 1$ ,  $I_y = l \pm 1$  et  $I_z = m \pm 1$  en  $3D$ ), dont 5 et 13 cellules respectivement ont un index (local et global) supérieur à celui de la cellule considérée.

continus de particules au cours des simulations, la procédure de détection des interactions devra être répétée au cours de chaque cycle de calcul.

Le temps de calcul (c'est-à-dire le nombre d'opérations) avec une telle méthode croît comme  $\mathcal{O}(N^2)$ , où  $N$  est le nombre de particules ; on considère en effet  $N \times N$  paires de particules ; ceci signifie que si l'on double le nombre de particules, on multiplie par quatre le nombre de tests à effectuer. Par conséquent, l'utilisation de cette méthode n'est à envisager que pour des nombres très faibles de particules et si la portée des interactions est très importante (au maximum  $\min L_1, L_2, L_3$  en conditions de frontières périodiques).

Remarquons d'autre part, qu'il est possible d'optimiser cette méthode pour éviter de prendre en compte deux fois la même paire d'interactions ( $pp'$ ) et ( $p'p$ ). Les particules étant indicées de 1 à  $N$ , il suffit de tester les paires (c'est-à-dire calculer leur distance relative) en parcourant une à une les particules tel que l'indice de la particule courante soit inférieur à l'indice de la particule "voisine" testée.

Cette méthode peut être également utilisée pour s'assurer du bon fonctionnement de méthodes plus élaborées dont les implémentations sont complexes et sources d'erreurs comme la méthode de Partitionnement en Cellules (*Cells subdivision*) ou bien la méthode de Voisinage de Particules (*Neighbor-list*).

## Partitionnement en cellules

La méthode de partitionnement du système en cellules consiste à subdiviser l'espace du système au moyen d'une grille bidimensionnelle ou tridimensionnelle carrée (ou rectangulaire). Les particules sont assignées à ces cellules sur la base de leur positions respectives. La notion de voisinage est ici réduite aux cellules proches les unes des autres, c'est-à-dire, les cellules partageant un sommet, une arête ou bien encore un face à  $3D$  (voir figure 2.5). Ces cellules sont indicées globalement de 1 à  $N^{(C)}$  ou bien sur une base cartésienne  $(1, 2, 3)$  de  $i = 1, N_1^{(C)}$ ,  $j = 1, N_2^{(C)}$  et  $k = 1, N_3^{(C)}$ .

La dimension des cellules doit être plus grande que la portée maximale des interactions et ces interactions n'interviennent qu'entre les particules assignées dans une même cellule ou bien entre les particules dont les cellules sont immédiatement voisines (voir figure 2.5 et figure 2.7). Il

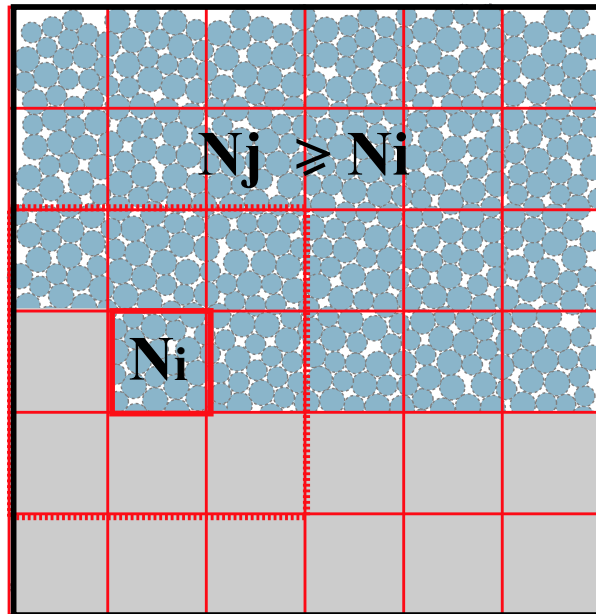


FIG. 2.6 – Méthode des index supérieurs pour le partitionnement en cellules : pour éviter de comptabiliser deux fois chaque contact, la méthode consiste à restreindre la recherche des contacts sur les cellules voisines dont l'index (local ou global) est supérieur à celui de la cellule considérée ; c'est la même optimisation que pour l'index des particules dans la méthode de voisinage étendu à tout le système.

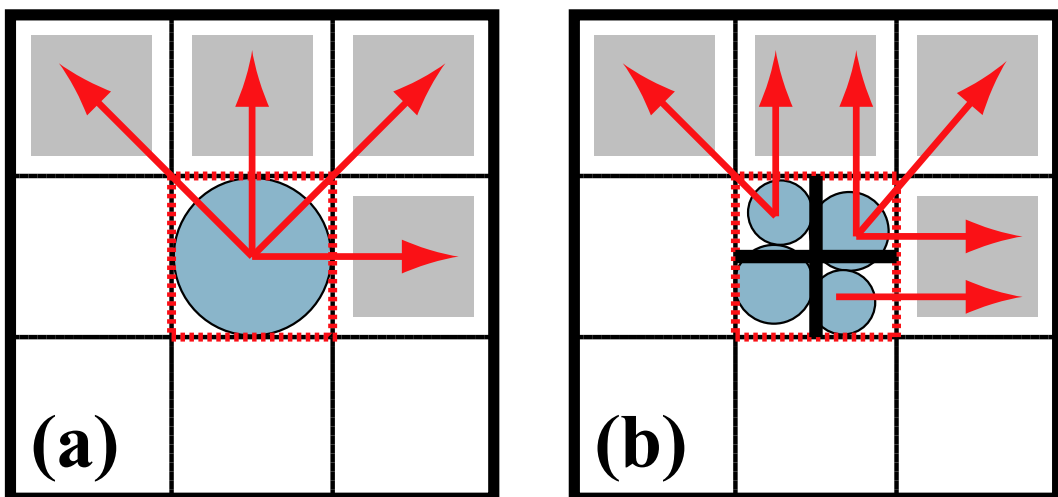


FIG. 2.7 – Recherche des contacts dans la méthode du partitionnement en cellules : selon que la cellule centrale contiennent une ou plusieurs particules, on peut subdiviser la cellule en quarts de cellule : (a) dans le premier cas, on considère l'ensemble des cellules voisines de la cellule considérée d'index supérieurs ; (b) dans le second cas, la particule est dans un premier temps attribuée à un des quarts de cellule (1, 2, 3) ou 4, et seulement les cellules voisines du quart de cellule sont considérées ; on réduit ainsi le nombre de paires de particules considérées.



est préférable que la taille des cellules  $L^{(C)}$  (plus petite dimension) soit plus grande que la portée maximale des interactions  $r_M$  car si cela n'est pas le cas, il faudrait considérer non seulement les cellules de premier voisinage  $(i \pm 1, j \pm 1, k \pm 1)$  mais également celles plus éloignées de second voisinage par exemple  $(i \pm 2, j \pm 2, k \pm 2)$  par exemple.

La méthode se décompose comme suit ; une fois les paires de cellules voisines connues (déterminées une fois lors de l'initialisation de la simulation), celles-ci sont parcourues successivement et les couples de particules contenues dans ces cellules sont considérés comme des interactions possibles et sont donc testés. Si les particules sont suffisamment proches pour interagir, la paire considérée est répertoriée comme une interaction, c'est-à-dire un contact pour un assemblage granulaire. Cette technique permet de réduire considérablement le volume de calcul ; cette fois-ci, le nombre d'opérations ne croît plus comme  $\mathcal{O}(N^2)$  mais seulement comme  $\mathcal{O}(N)$ , ce qui est un gain considérable.

Comme pour la technique précédente, il existe une optimisation simple de la méthode ; en effet, du fait de la symétrie de l'organisation en cellule, seulement la moitié des paires de cellules est à considérer pour éviter de répertorier deux fois la même interaction entre deux particules. Il suffit de tester les paires de particules, uniquement lorsque l'indice global de la cellule courante est inférieur à l'indice de la cellule voisine considérée (voir figure 2.6).

Dans le cadre de la modélisation d'un matériau granulaire, on notera que l'efficacité de cette méthode est maximale lorsque le système est très homogène en taille ; on pourra utiliser une cellule de dimension optimale  $L^{(C)} = 2R_M$  où  $R_M$  est le plus grand rayon. Cependant, dans le cas où on déformerait le système au cours de la simulation, la dimension des cellules pourrait diminuer et, par conséquent, on pourrait se retrouver dans la situation à risque où  $L_C < 2R_M$  et, dans ce cas, on risquerait de manquer des interactions (cas où des particules appartiendraient à deux cellules d'index  $i$  et  $i + 2$  dans une direction et dont les positions seraient très proches des frontières des cellules dans la direction considérée). Par précaution, il sera donc préférable de définir une dimension de cellules  $L_C > 2R_M$  (par exemple 2.5) et de s'assurer au cours de la simulation, si le système est déformé) que  $L^{(C)}(t) > 2R_M$ .

Au cours des simulations, les particules en mouvement peuvent être amenées à se déplacer de cellules en cellules. Il faut donc réassigner les particules aux nouvelles cellules et rechercher les paires d'interactions à chaque fois que cela est nécessaire, a priori, à chaque cycle de calcul. Il existe pourtant un moyen pour éviter de répéter cette tâche à chaque cycle comme nous allons le voir.

Cette méthode de subdivision en cellules est très souvent employée comme composante d'une autre méthode de détection des interactions, la méthode de Voisinage de Particules (Neighbors-List) que l'on va maintenant présenter.

## Voisinage de particule

Dans la précédente méthode de Partitionnement en Cellules, une fraction des paires d'interactions 'possibles', définies sur la base du voisinage des cellules, est ensuite répertoriée comme des interactions 'réelles' (sur la base de la portée des interactions). Il est donc possible de tenir dans ce voisinage local, une liste des paires où l'interaction est 'réelle' et où l'interaction est 'possible' selon une certaine tolérance. Il est alors très intéressant de pouvoir se resservir de cette liste au cours d'un certain nombre de cycles successifs, en s'assurant par un certain critère qu'aucune nouvelle interaction ne puisse apparaître entre temps. Cela éviterait d'avoir à déterminer à chaque cycle l'ensemble des interactions ; si cela permet de s'assurer qu'aucune nouvelle interaction ne sera manquée, cela revient "souvent" à reconstruire inutilement la même liste de paires d'interaction ; en effet, à chaque cycle de calcul ne correspond pas l'apparition de nouvelles

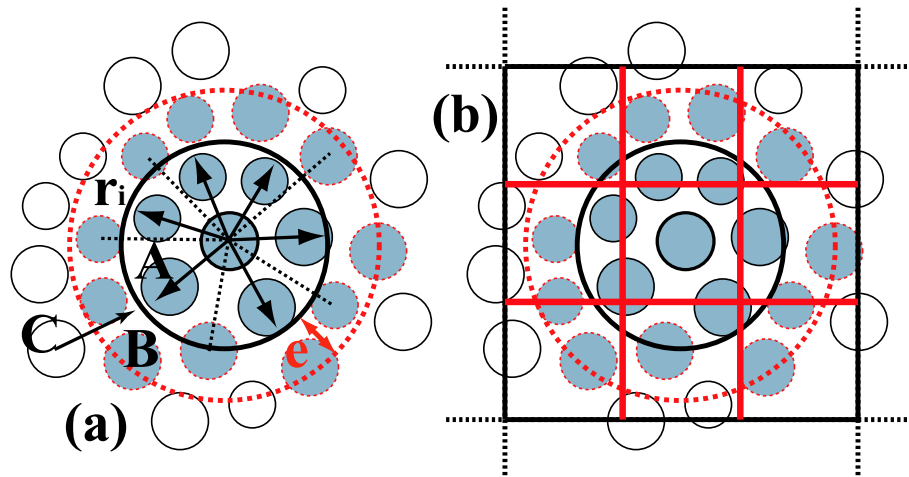


FIG. 2.8 – Liste de voisinage : (a) construction pour chaque particule ; (b) en combinaison avec le partitionnement en cellule ; la liste de voisinage de la particule centrale est construite à  $t_0$  ; les particules (A) sont en interactions réelles avec cette particule ; les particules (B) sont susceptibles d’entrer en interaction avec la particule centrale au cours de  $t + N\Delta t$  ; les particules (C) ne pourront rentrer en interaction avec la particule centrale avant  $t + N\Delta t$  car leurs vitesses maximales (intégrées sur toutes les particules du système), ne leur permet pas de parcourir la distance  $\epsilon_r$  sur cet intervalle de temps. Après  $N$  cycles, la liste doit être reconstruite.

interactions.

La technique consiste à tenir dans un premier temps une liste des interactions ‘possibles’ sur un critère de portée maximale des interactions  $r_M$  à laquelle on ajoute une tolérance  $\epsilon_r$  soit  $r_i = r_M(1 + \epsilon_r)$ . On trouvera donc dans la liste de voisinage à la fois des paires de particules en interactions réelles, mais également des interactions possibles à la faveur de l’évolution locale des particules dans les cycles à venir (voir figure 2.4). Ainsi, pendant un certain nombre de cycles, il suffira de tester uniquement la liste de voisinage pour s’assurer de ne manquer aucune interaction.

Une fois la liste de voisinage construite, il faudra plusieurs cycles de calcul avant que les mouvements relatifs des particules (particule ‘au centre’ de la liste et particules à l’extérieur de la liste c’est-à-dire en dehors de la portée de la tolérance) ne rendent nécessaire la reconstruction d’une nouvelle liste. Le succès de cette approche repose donc sur une modification lente de l’environnement des particules.

Le critère de rafraîchissement de la liste est basée sur la détermination de la vitesse relative maximum pour toutes les paires ; Lorsque :

$$\sum_t \max(|\vec{v}^{(paires)}(t)|) 2\Delta t > \epsilon_r, \quad (2.4)$$

alors il faut rafraîchir la liste.

Remarquons que ce critère est de nature globale, dans la mesure où il combine sur un nombre de cycles la contribution de différentes paires de particules et garantit qu’aucune nouvelle interaction de paires ne sera omise, car les particules ne peuvent pas se déplacer de  $\epsilon_r$  au cours de cet intervalle de cycles.

Pour finir on remarquera que ces méthodes d’optimisation reposent sur la recherche des nouvelles interactions ; les interactions qui disparaissent sont elles de toutes façons répertoriées à chaque cycle de calcul lors de l’étape de calcul des forces d’interaction préliminaire à l’étape d’intégration du mouvement (voir figure 2.2).

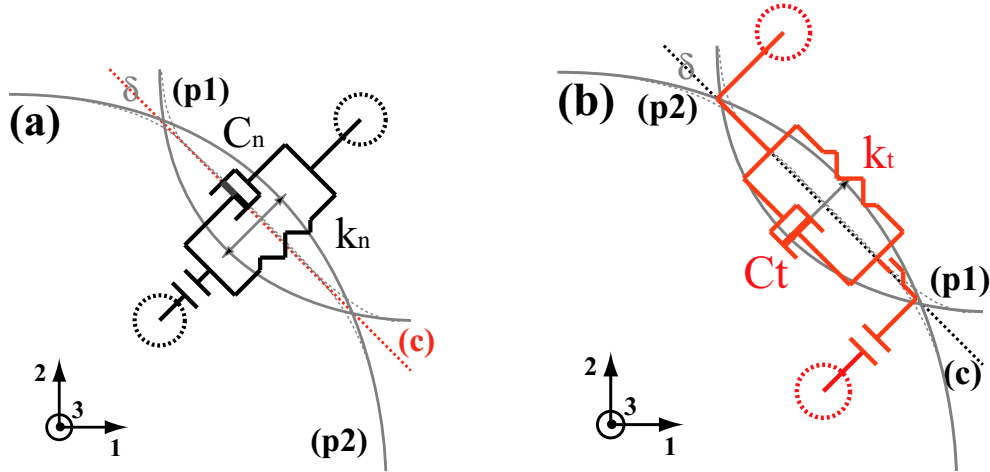


FIG. 2.9 – Lois d'interaction aux contacts : (a) interaction normale élastique non linéaire (de type Hertz), (b) interaction transversale élastique (de type Mindlin) dépendante de l'histoire du chargement et du seuil de friction.

### 2.4.2 Lois d'Interaction au Contact

Les lois de contact relient les composantes du déplacement relatif des deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en contact aux forces agissantes sur ces particules.

Le contact est modélisé par l'interpénétration des sphères (approche de contact 'mou' par opposition au contact 'dur' de sphères rigides) peut être décrit en terme d'un point de contact  $\vec{x}^{(c)}$  appartenant au plan de contact  $\Pi^{(c)}$ . Ce plan est défini par un vecteur normal unité  $\vec{n}^{(c)}$  (voir figure 2.1(b)). Le vecteur unité normal de contact est dirigé selon le segment de droite défini par les centres des deux particules  $\vec{x}^{(p1)}$  et  $\vec{x}^{(p2)}$ . Le point de contact  $\vec{x}^{(c)}$  se situe dans le volume correspondant au concept d'interpénétration des deux particules défini par la distance  $w$ .

La force de contact  $\vec{f}$  se décompose selon une force normale  $\vec{f}_n$  agissant dans la direction du vecteur unité de contact normal  $\vec{n}^{(c)}$  et une force transversale  $\vec{f}_t$  agissant dans le plan de contact  $\Pi^{(c)}$  selon le vecteur unité de contact transversal  $\vec{t}^{(c)}$ . Ces forces  $\vec{f}_n$  et  $\vec{f}_t$  sont reliées aux déplacements relatifs des particules correspondants  $\vec{u}_n^{(p1p2)}$  et  $\vec{u}_t^{(p1p2)}$  par des lois de contact faisant intervenir entre autre des rigidités normales  $k_n^{(c)}$  et tangentielles  $k_t^{(c)}$  (voir figure 2.10(a) et (b)).

Nous présentons d'abord la loi de contact normale de nature élastique répulsive et ensuite nous présentons la loi de contact transversale sous une forme incrémentale, de nature élastique en dessous du seuil de friction (voir figures 2.10).

#### Interaction Normale

Le vecteur unité de contact normal  $\vec{n}^{(c)}$  qui définit le plan de contact  $\Pi^{(c)}$  entre deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) est :

$$\vec{n}^{(c)} = \frac{\vec{x}^{(p2)} - \vec{x}^{(p1)}}{|\vec{x}^{(p2)} - \vec{x}^{(p1)}|}, \quad (2.5)$$

où  $\vec{x}^{(p1)}$  et  $\vec{x}^{(p2)}$  sont les positions des centres des particules et  $|\vec{x}^{(p2)} - \vec{x}^{(p1)}|$  est la distance entre les centres des particules. On a  $\vec{n}^{(c)} = n^{(p1p2)} = -n^{(p2p1)}$ .

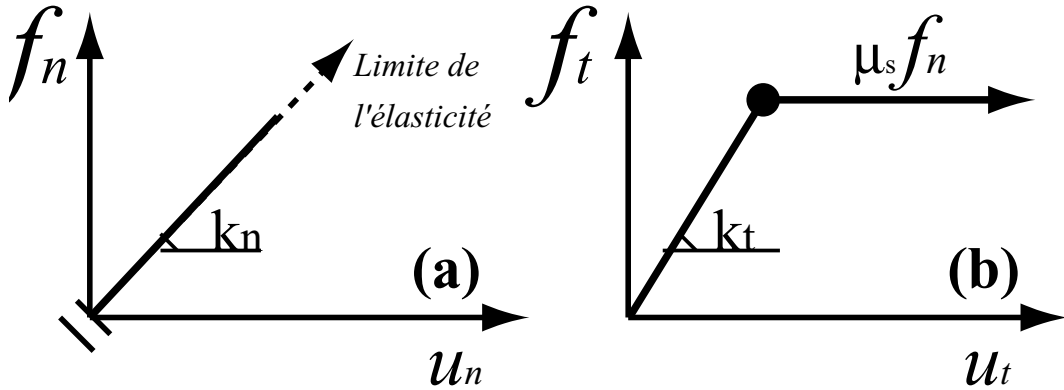


FIG. 2.10 – Lois d'interaction aux contacts (pour le cas linéaire) : (a) interaction normale élastique, l'intensité de la force normale  $f_n^{(c)}$  au contact est donnée en fonction de la composante normale du déplacement relatif  $u_n^{(p1p2)}$  des particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) selon la raideur  $k_n$ ; (b) interaction transversale élastique et seuil de friction ; l'intensité de la force transversale  $f_t^{(c)}$  au contact est donnée en fonction de la composante transversale du déplacement relatif  $u_t^{(p1p2)}$  des particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ).

L'interpénétration  $w$  est définie par le déplacement relatif des deux particules en contact dans la direction normale (voir figure 2.1), c'est-à-dire par  $w = |u_n^{(\vec{AB})}|$ .  $w$  peut être calculée simplement comme :

$$w = |\vec{x}^{(p2)} - \vec{x}^{(p1)}| - (R_{(1)} + R_{(2)}), \quad (2.6)$$

Selon cette définition,  $w$  est négatif lorsque les deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) sont en contact et s'interpénètrent. Cette interpénétration définit une surface  $S_w^{(c)}$  ou un volume  $V_w^{(c)}$  selon la géométrie de la modélisation dans lequel se trouve le point de contact  $\vec{x}^{(c)}$  défini comme :

$$\vec{x}^{(c)} = \vec{x}^{(p1)} + \left(R^1 - \frac{1}{2}w\right) \vec{n}^{(c)}, \quad (2.7)$$

Connaissant  $\vec{x}^{(c)}$ , il est possible de calculer la surface des deux segments de cercle composant  $S_w^{(c)}$  ou bien les deux segments de sphères composant  $V_w^{(c)}$ . Cette surface et ce volume interviennent dans le calcul de la fraction solide d'un assemblage de particules compressées ; leurs calculs seront présentés dans le chapitre 3.

Le vecteur de force de contact  $\vec{f}^{(c)} = \vec{f}_{(p1p2)}$  qui représente l'action de la particule ( $p1$ ) sur la particule ( $p2$ ) peut être décomposée en une force normale  $\vec{f}_n^{(c)}$  selon  $\vec{n}^{(c)}$  et une force transversale  $\vec{f}_t^{(c)}$  dans le plan de contact selon  $\vec{t}^{(c)}$  :

$$\vec{f}^{(c)} = \vec{f}_n^{(c)} + \vec{f}_t^{(c)}, \quad (2.8)$$

De forme générale la composante normale de la force de contact est calculée comme :

$$\vec{f}_n^{(c)} = k_n^{(c)} w \vec{n}^{(c)}, \quad (2.9)$$

où  $k_n$  est la raideur normale du contact (voir figure 2.10(a)). Remarquons que la valeur de  $k_n$  est déterminée par le modèle de contact choisi ; aussi, si la raideur est dépendante de

l'interpénétration (augmentation de la surface de contact),  $k_n(w)$ , la loi de contact devient non linéaire. La raideur normale  $k_n$  est un module de type "sécant" car elle relie le déplacement normal à la force correspondante par contre, comme nous le verrons par la suite, la raideur tangentielle  $k_t$  est un module de type "tangent" car elle relie le déplacement incrémental transverse et la force correspondante.

On réalise la somme vectorielle de toutes les forces de contact normales afin d'obtenir leur contribution au mouvement de translation de la particule ( $p$ ) (voir figure 2.13(a)) :

$$\vec{f}_n^p = \sum_{i=1}^{n_c^p} \vec{f}_n^c \quad (2.10)$$

A cette force viendra s'ajouter la contribution des forces de contact transversales  $\vec{f}_t^p$ .

### Interaction Transversale

La force de contact transversale  $\vec{f}_t^{(c)}$  est calculée de façon incrémentale, c'est-à-dire, sous la forme  $\Delta \vec{f}_t^{(c)}$ . Le déplacement relatif entre les particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en plus de créer une interpénétration  $w$ , donne également un déplacement transversal  $\Delta s$  (voir figure 2.1) qui est à l'origine de force transversale élastique (sous le seuil de friction).

Soient deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) ayant chacune respectivement une vitesse instantanée  $\vec{v}^{(p1)}$  et  $\vec{v}^{(p2)}$ , la vitesse relative du contact, c'est-à-dire, de la paire de particules est  $\vec{v}^{(c)} = \vec{v}^{(p2)}$  (la vitesse relative de la particule ( $p2$ ) par rapport à la particule ( $p1$ )).

$$\vec{v}^{(c)} = \vec{v}^{(p2)} - \vec{v}^{(p1)}, \quad (2.11)$$

Cette vitesse  $\vec{v}^{(c)}$  peut être à son tour décomposée : selon  $\vec{n}^{(c)}$ , on obtient la composante normale  $\vec{v}_n^{(c)}$  et selon  $\vec{t}^{(c)}$  dans le plan de contact  $\Pi^{(c)}$ , on a la composante transversale  $\vec{v}_t^{(c)}$ . La composante transversale est alors calculée selon :

$$\vec{v}_t^{(c)} = \vec{v}^{(c)} - \vec{v}_n^{(c)}, \quad (2.12)$$

Comme nous considérons également le mouvement de rotation de chaque particule  $\omega^{(p1)}$  et  $\omega^{(p2)}$  (voir figure 2.1), la composante transversale  $\vec{v}_t^{(c)}$  doit être calculée plus généralement selon :

$$\vec{v}_t^{(c)} = (\vec{v}^{(c)} - \vec{v}_n^{(c)}) - (\vec{\omega}_{(A)} R_{(A)} + \vec{\omega}_{(B)} R_{(B)}) \times \vec{n}_{(c)}, \quad (2.13)$$

Etant donné que nous considérons la forme incrémentale de la force transversale  $\Delta \vec{f}_t^{(c)}$ , la composante transversale de l'incrément de déplacement  $\Delta \vec{s} = \vec{u}_t^{(p1p2)}$  peut être calculée à partir de la vitesse de contact transversale sur un incrément de temps  $\Delta t$  :

$$\Delta \vec{s} = \vec{v}_t^{(c)} \Delta t, \quad (2.14)$$

On peut alors calculer l'incrément de force  $\Delta \vec{f}_t^{(c)}$  dans la direction transversale par :

$$\Delta \vec{f}_t^{(c)} = -k_t \Delta \vec{s}, \quad (2.15)$$

où  $k_t$  est la raideur transversale du contact et sa valeur est déterminée par le modèle de contact utilisé ;  $k_t$  peut par exemple être dépendant de l'interpénétration  $w$  ; plus l'interpénétration de deux sphères est importante et plus la raideur transversale devient grande.

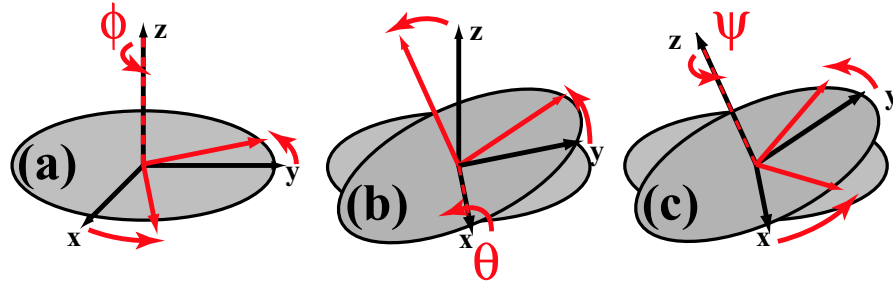


FIG. 2.11 – Définition des angles d'Euler, et de la séquence de rotations associées : (a) première rotation  $\mathcal{R}_1$  d'angle  $\phi_E$  autour de l'axe  $z$ , (b) suivie d'une rotation  $\mathcal{R}_2$  d'angle  $\theta_E$  autour du nouvel axe  $x$  et (c) rotation  $\mathcal{R}_3$  d'angle  $\Psi_E$  autour du nouvel axe  $z$ .

La force transversale au contact  $\vec{f}_t^{(c)}$  est calculée en intégrant sur l'histoire de chargement du contact selon :

$$\vec{f}_t^{(c)} = \int_{t=0}^t \vec{d}f_t^{(c)}, \quad (2.16)$$

Numériquement, l'intégrale est remplacée par une somme sur les intervalles  $\Delta t$ , et on a donc :

$$\vec{f}_t^{(c)} = \sum_{t=0}^t \Delta \vec{f}_t^{(c)}, \quad (2.17)$$

Et donc au cycle de calcul  $N_c$  (à  $t$ ), la force de contact transversale vaut la force au cycle  $N_c - 1$  (à  $t - \Delta t$ ) incrémentée de  $\Delta \vec{f}_t^{(c)}$  :

$$\vec{f}_t^{(c)}(t) \leftarrow \vec{f}_t^{(c)}(t - \Delta t) + \Delta \vec{f}_t^{(c)}, \quad (2.18)$$

### Rotation du Plan de Contact - Quaternions

On a vu que le mouvement d'une particule ( $p$ ) peut être décomposé selon un mouvement de translation  $\vec{x}^{(p)}$  et un mouvement de rotation  $\vec{\omega}^{(p)}$ . Le premier est gouverné par la force nette  $\vec{f}$  agissant sur la particule, alors que le second dépend du moment appliqué sur la particule  $\vec{M}$  ("bras" du centre du point de contact  $x^{(c)}$  au centre de masse  $x^{(p)}$ ). Nous allons considérer le mouvement de rotation  $\mathcal{R}$  de la surface de contact  $S^{(c)}$  entre deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) qui ont chacune un mouvement de translation  $\mathcal{T}^{p1}$  et  $\mathcal{T}^{p2}$  (voir figure 2.12(a)).

### Les angles d'Euler

Les angles d'Euler sont définis en terme d'une séquence de rotations autour d'un jeu d'axes en coordonnées cartésiennes (voir figure 2.11) ; la première rotation  $\mathcal{R}_1$  fait intervenir un angle  $\phi_E$  (sens anti-horaire) autour de l'axe  $z$ . Elle est ensuite suivie par une rotation  $\mathcal{R}_2$  d'angle  $\theta_E$  autour du nouvel axe  $x$  et enfin la rotation finale  $\mathcal{R}_3$  fait intervenir l'angle  $\Psi_E$  autour du nouvel axe  $z$ .

La matrice de rotation complète  $[\mathcal{R}]$  est le produit des matrices de rotations individuelles  $\mathcal{R}_1$ ,  $\mathcal{R}_2$  et  $\mathcal{R}_3$  :

$$[\mathcal{R}] = \mathcal{R}_1(\phi_E)\mathcal{R}_2(\theta_E)\mathcal{R}_3(\Psi_E) \quad (2.19)$$

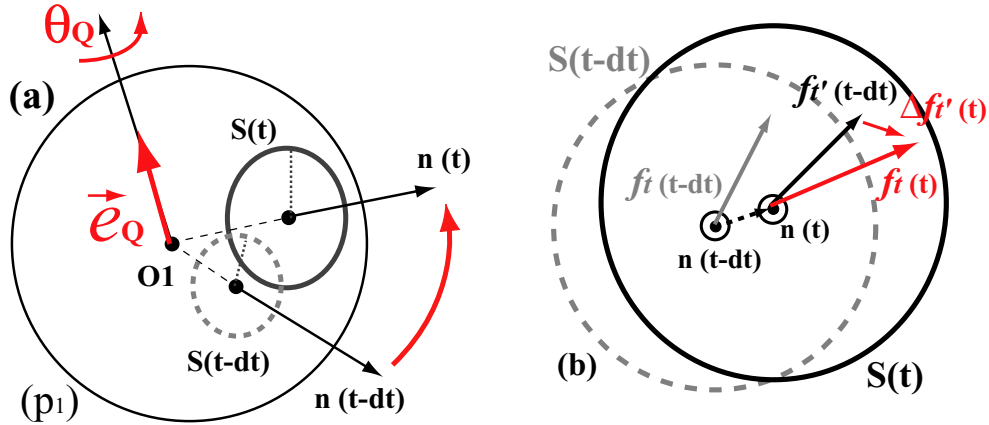


FIG. 2.12 – Rotation du plan de contact et des forces qui y sont associées : (a) le mouvement relatif  $\vec{x}^{(c)}$  des particules en contact est à l'origine de la rotation du plan  $\Pi^{(c)}$  en fonction du temps : cette rotation du plan de  $n^{(c)}(t - \Delta t)$  à  $n^{(c)}(t)$  est définie par l'axe de rotation  $e_Q$  et de l'angle  $\theta_Q$  (produit vectoriel, et produit scalaire respectivement) ; (b) la rotation du plan de contact entraîne la rotation des vecteurs qui y sont associés (rotation rigide de l'ensemble) ; la force transversale de contact  $\vec{f}_t$  effectue donc le même mouvement de rotation de  $\vec{f}_{t-\Delta t}$  à  $\vec{f}_t$ .

Il y a deux façons d'interpréter la rotation exprimée par  $[\mathcal{R}]$  :

- (1) On peut considérer un vecteur  $\vec{r}$  et utiliser la matrice de rotation  $[\mathcal{R}]$  pour connaître ses composantes dans le nouveau système de coordonnées après rotation :  $\vec{r}' = [\mathcal{R}]\vec{r}$ .
- (2) On peut aussi considérer le vecteur  $\vec{r}'$  et appliquer la rotation inverse  $[\mathcal{R}]^{-1}$  en utilisant la transposée de la matrice  $[\mathcal{R}]$  pour obtenir le vecteur  $\vec{r}$  :  $\vec{r} = [\mathcal{R}]^T \vec{r}'$

Mais le problème peut se poser différemment ; imaginons que l'on dispose par exemple de deux vecteurs unité  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  et que l'on souhaiterait remonter à la matrice de rotation  $[\mathcal{R}]$  afin d'appliquer cette rotation à un autre vecteur  $\vec{r}''$ . On convient que la détermination de la matrice de rotation n'est pas simple.

Afin de pouvoir remonter à la matrice de rotation, il est préférable de décrire les rotations dans un autre référentiel ; une méthode particulièrement intéressante pour les problèmes numériques de ce genre fait intervenir les *Quaternions* [53] [2].

## Les Quaternions

Une définition alternative de la matrice de rotation, vient du fait que toute rotation  $[\mathcal{R}]$  autour d'un point fixe  $\mathcal{O}$  peut être exprimée sous la forme :

$$\vec{r}' = \vec{r} \cos(\theta_Q) + (e_Q \cdot \vec{r}) e_Q (1 - \cos(\theta_Q)) + (e_Q \times \vec{r}) \sin(\theta_Q), \quad (2.20)$$

où  $e_Q$  est le vecteur unité caractérisant l'axe de rotation passant par  $\mathcal{O}$  et  $\theta_Q$  est l'angle de rotation autour cet axe.

Un *Quaternion*  $\mathcal{Q}$  est un jeu de quatre quantités scalaires  $\mathcal{Q} = \{q_1, q_2, q_3, q_4\}$  ou bien on peut le définir également comme un vecteur  $\vec{q}$  tel que  $q_i = c_i \sin(\theta_Q/2)$  pour  $i = \{1, 2, 3\}$  et un scalaire  $q_4 = \cos(\theta_Q/2)$ .

Ce *quaternion* satisfait  $\sum_{i=1}^4 q_i^2 = 1$  en normalisant ses composantes  $\vec{q}$  et  $q_4$ .

On peut alors réécrire l'équation 2.20 selon :

$$\vec{r}' = (2q_4^2 - 1)\vec{r} + 2(\vec{q} \cdot \vec{r})\vec{q} + 2q_4\vec{q} \times \vec{r} \quad (2.21)$$

Les composantes des quaternions  $q_i$  en fonction des angles d'Euler  $\phi_E$ ,  $\theta_E$  et  $\Psi_E$  sont :

$$\begin{cases} q_1 = \sin(\theta_E/2)\cos((\phi_E - \Psi_E)/2), & ; \\ q_2 = \sin(\theta_E/2)\sin((\phi_E - \Psi_E)/2), & ; \\ q_3 = \cos(\theta_E/2)\sin((\phi_E - \Psi_E)/2), & ; \\ q_4 = \cos(\theta_E/2)\cos((\phi_E - \Psi_E)/2), & . \end{cases} \quad (2.22)$$

Et la matrice de rotation  $[\mathcal{R}]$  s'écrit alors en terme de  $\vec{q}$  et  $q_4$  comme :

$$[\mathcal{R}] = 2 \begin{pmatrix} q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_1q_2 + q_3q_4 & q_1q_3 - q_2q_4 \\ q_1q_2 - q_3q_4 & q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_2q_3 + q_1q_4 \\ q_1q_3 + q_2q_4 & q_2q_3 - q_1q_4 & q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Si nous reprenons notre problème : nous avons deux particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en contact à  $t$  en mouvement de translation  $\mathcal{T}^{(p1)}$  et  $\mathcal{T}^{(p2)}$  ; la surface de contact est  $S^{(c)}(t)$  ; à  $t + \Delta t$ , les particules sont toujours en contact ( $w < 0$ ) ; la surface de contact  $S^{(c)}(t + \Delta t)$  peut avoir diminué ( $|w(t + \Delta t)| < |w(t)|$ ) ou bien augmenté ( $|w(t + \Delta t)| > |w(t)|$ ).

Le vecteur de contact unité est  $\vec{n}^{(c)}$  à  $t$  et  $\vec{n}'^{(c)}$  à  $t + \Delta t$ . La rotation du plan de contact  $\Pi^{(c)}$  entre  $t$  et  $t + \Delta t$  se définit comme on vient de le voir à l'aide du vecteur  $\vec{e}_Q$  définissant l'axe de rotation et l'angle  $\theta_Q$  qu'il est très facile d'obtenir à partir de  $\vec{n}^{(c)}$  et  $\vec{n}'^{(c)}$  :

$$\begin{cases} \vec{e}_Q = \vec{n}^{(\vec{A}B)} \times \vec{n}'^{(\vec{A}B)}, & ; \\ \cos(\theta_Q) = |\vec{n}^{(\vec{A}B)} \cdot \vec{n}'^{(\vec{A}B)}|, & . \end{cases} \quad (2.24)$$

Une fois,  $\vec{e}_Q$  et  $\theta_Q$  connus, on peut calculer les composantes du *quaternion*  $\vec{q}$  et  $q_4$  qui vont définir la matrice rotation du contact  $[\mathcal{R}]^{(c)}(t \rightarrow t + \Delta t)$ . On peut ensuite appliquer cette rotation à n'importe quel vecteur  $\vec{r}$  ; Dans le cas qui nous intéresse, on appliquera la rotation à la force transversale de frottement  $\vec{f}_t(t)$  qui appartient au plan de contact  $\Pi^{(c)}(t)$  ; on obtient ainsi  $\vec{f}_t(t)$  dans  $\Pi^{(c)}(t + \Delta t)$  et on peut alors sommer vectoriellement  $\vec{f}_t(t)$  et  $\Delta \vec{f}_t(t + \Delta t)$  calculé pour obtenir  $\vec{f}_t(t + \Delta t)$  :

$$\vec{f}_t(t + \Delta t) = [\mathcal{R}] \vec{f}_t(t) + \Delta \vec{f}_t(t + \Delta t) \quad (2.25)$$

De cette façon, on peut suivre correctement l'évolution de la force transverse de contact  $\vec{f}_t(t + \Delta t)$  de en suivant la rotation du plan de contact au cours du mouvement relatif des particules (d'où l'utilisation de la forme différentielle pour le calcul de cette force).

### Seuil de friction

Le modèle de contact utilisé inclut un frottement de type Coulomb ; la force tangentielle  $\vec{f}_t^{(c)}$  est bornée par le seuil de frottement de Coulomb, égal au produit de la force normale  $|\vec{f}_n^{(c)}|$  par le coefficient de frottement  $\mu_f$  ; à chaque contact ( $c$ ), la magnitude de la force de frottement est donc limitée par :

$$|\vec{f}_t^{(c)}| \leq \mu_f |\vec{f}_n^{(c)}| \quad (2.26)$$

Si cette condition n'est pas respectée, on aura  $|\vec{f}_t^{(c)}| = \mu_f |\vec{f}_n^{(c)}|$  et :

$$\vec{f}_t^{(c)} \leftarrow \frac{\vec{f}_t^{(c)}}{|\vec{f}_t^{(c)}|} \mu_f |\vec{f}_n^{(c)}| \quad (2.27)$$



Enfin on calculera la résultante vectorielle  $\vec{f}_t^{(p)}$  sur la particule de ces forces de contact transversales  $\vec{f}_t^{(c)}$  pour obtenir leur contribution au mouvement de translation de la particule (voir figure 2.13(a)) :

$$\vec{f}_t^{(p)} = \sum_{i=1}^{n_c^p} \vec{f}_t^{(c)} \quad (2.28)$$

On sommerá cette contribution à la contribution des forces normales précédemment calculée.

$$\vec{f}^{(p)} = \vec{f}_n^{(c)} + \vec{f}_t^{(c)} \quad (2.29)$$

### Moments

Afin de calculer le moment résultant  $\vec{\mathcal{M}}^{(p)}$  agissant sur une particule ( $p$ ), on calcule la somme vectorielle de tous les moments agissant à partir de tous les points de contacts  $\vec{\mathcal{M}}^{(c)}$  (approximation à la distance  $R^{(p)}$ ) de la particule ( $p$ ); chaque moment correspond au produit vectoriel de la force  $\vec{f}_t^c$  par le vecteur unité normal de contact  $\vec{n}^{(c)}$  multiplié par le rayon de la particule  $R^{(p)}$  :

$$\vec{\mathcal{M}}^{(c)} = \vec{n}^{(c)} \times \vec{f}_t^{(c)} R^{(p)}, \quad (2.30)$$

Et le moment résultant  $\vec{\mathcal{M}}^p$  agissant sur la particule ( $p$ ) est obtenu en sommant ces moments :

$$\vec{\mathcal{M}}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n_c^p} \vec{\mathcal{M}}^{(c)} \quad (2.31)$$

C'est à partir de ce moment que l'on va pouvoir calculer le mouvement de rotation de la particule ( $p$ ), à savoir déterminer sa vitesse angulaire  $\omega^{(p)}$  et sa rotation  $\theta^p$  (voir figure 2.13(b)).

## 2.5 Intégration du Mouvement

Le mouvement d'une particule est déterminé par la force nette  $\vec{f}^{(p)} = (\vec{f}_n^{(p)} + \vec{f}_t^{(p)})$  et le moment  $\vec{\mathcal{M}}^{(p)}$  résultant sur la particule et, peut être décomposé en un mouvement de translation  $\mathcal{T}^{(p)}$  et un mouvement de rotation  $\mathcal{R}^{(p)}$  (voir figure 2.13).

- (1) Le mouvement de translation  $\mathcal{T}^{(p)}$  de la particule (c'est-à-dire, de son centre de masse) est décrit par sa position  $\vec{x}^{(p)}$ , sa vitesse  $\dot{\vec{x}}^{(p)}$ , et son accélération  $\ddot{\vec{x}}^{(p)}$ .
- (2) Le mouvement de rotation  $\mathcal{R}^{(p)}$  lui est décrit par sa rotation  $\vec{\theta}^{(p)}$ , sa vitesse angulaire  $\vec{\omega}^{(p)}$  et son accélération angulaire  $\ddot{\vec{\omega}}^{(p)}$ .

On écrit, l'équation du mouvement de translation sous la forme :

$$m(\ddot{\vec{x}}^{(p)} - \vec{g}) = \vec{f}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n_c^p} \vec{f}^{(c)}, \quad (2.32)$$

où  $m$  est la masse de la particule,  $\vec{f}^{(p)}$  est la force résultante (la somme vectorielle de toutes les forces appliquées  $\vec{f}^{(c)}$ ) sur la particule ( $p$ ), et  $\vec{g}$  est l'accélération gravitationnelle ( $\vec{g} = \vec{0}$  dans nos travaux).

L'équation pour le mouvement de rotation s'écrit sous la forme :

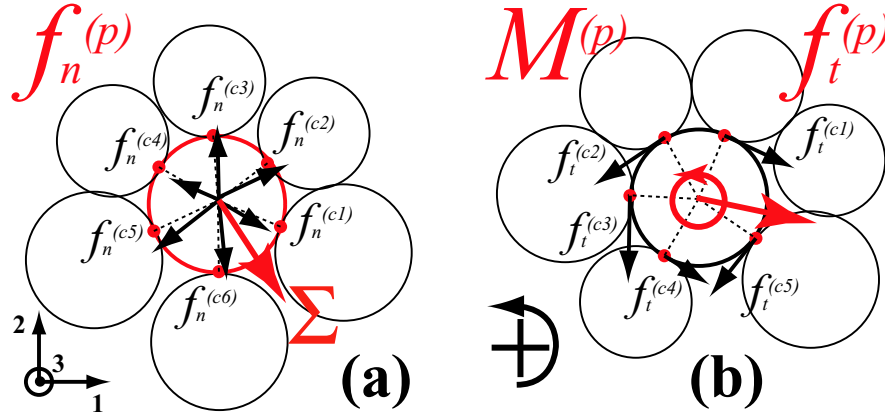


FIG. 2.13 – Détermination de la trajectoire  $x^{(p)}$  et de la rotation  $\theta^{(p)}$  des particules à partir des forces de contact : (a) sommation vectorielle des forces de contact normales  $\vec{f}_n^{(c)}$  agissant sur le centre de masse d'une particule ( $p$ ) (composante du mouvement de translation avec les forces de contact transversales non représentées), (b) sommation vectorielle des moments  $\vec{M}^{(c)}$  agissant sur une particule ( $p$ ) (mouvement de rotation) issus des forces transversales de contact  $\vec{f}_t^{(c)}$  (mouvement de translation et de rotation).

$$I\vec{\omega}^{(p)} = \vec{M}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n_c^{(p)}} \vec{M}^{(c)}, \quad (2.33)$$

où  $I$  est le moment d'inertie de la particule, et  $\vec{M}^{(p)}$  est le moment résultant (la somme vectorielle de tous les moments appliqués  $\vec{M}^{(c)}$ ) sur la particule.

### 2.5.1 Schémas numériques d'intégration

Il existe un certain nombre de méthodes d'intégration numériques du mouvement mais toutes ne sont pas adaptées à la Méthode des Eléments Discrets.

Premièrement, dans ce type de simulations, au cours d'un cycle de calcul c'est l'étape d'évaluation des forces de contact qui consomme le plus de temps ; de ce fait, les méthodes d'intégration qui requièrent plusieurs évaluations des forces au cours d'un cycle de calcul (méthodes itératives) sont à proscrire.

Dans ce type de modélisation, obtenir un degré d'exactitude dans la résolution des trajectoires n'est pas vraiment un objectif réaliste (et pratique) ; les interactions de nature fortement répulsives sont à l'origine d'une croissance exponentielle de l'erreur sur la trajectoire avec le temps. Les critères de choix de la méthode numérique d'intégration à utiliser devraient plutôt être basés sur la conservation d'énergie dans le système.

Les particules évoluent généralement dans un environnement sujet à des modifications qui peuvent être brutales dues aux réarrangements constants. Deux schémas numériques d'intégration sont généralement utilisés pour la Méthode des Eléments Discrets ; Les variantes 'Leap-Frog' et 'Verlet' (algébriquement complètement équivalentes) et la méthode 'Prédicteur-Correcteur'.

Dans le programme que nous avons développé au cours de cette thèse, ces deux schémas d'intégration ont été implémentés ; nous avons réalisé des simulations de préparation d'échantillons

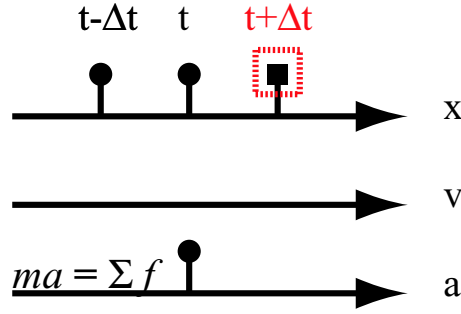


FIG. 2.14 – Schéma numérique d'intégration de Verlet : à partir de l'accélération de la particule  $\vec{x}$  à  $t$  et de sa position  $\vec{x}$  à  $t$  et à  $(t - \Delta t)$ , on peut calculer sa nouvelle position à  $t + \Delta t$ .

numériques suivant un protocole qui sera développé au chapitre 3 en utilisant l'un ou l'autre de ces schémas. Chronologiquement, c'est la méthode Leap-frog que nous avons implémentée dans un premier temps et, c'est celle-ci que nous avons conservée par la suite pour rester consistant avec des simulations et des résultats obtenus dans des travaux antérieurs.

### Méthode Verlet

Intéressons nous dans un premier temps au schéma d'intégration de 'Verlet' [157] :

Considérons le développement de Taylor de la position  $x(t)$  :

$$\begin{cases} x(t + dt) = x(t) + \dot{x}(t)dt + \ddot{x}(t)\frac{dt^2}{2} + O(dt^3), & ; \\ x(t - dt) = x(t) - \dot{x}(t)dt + \ddot{x}(t)\frac{dt^2}{2} - O(dt^3), & . \end{cases} \quad (2.34)$$

où  $x(t)$ ,  $\dot{x}(t)$ ,  $\ddot{x}(t)$  sont respectivement la position, la vitesse et l'accélération de la particule au temps  $t$ . Bien que  $\ddot{x}(t)$  soit exprimé dans ce développement comme une fonction de  $t$ , dans la Méthode des Eléments Discrets,  $\ddot{x}$  est en réalité une fonction des positions des particules déterminées à partir des lois de contact.

A partir des deux développements, 2.34, il s'ensuit :

$$x(t + dt) = 2x(t) - x(t - dt)dt + \ddot{x}(t)dt^2 + O(dt^4) \quad (2.35)$$

Remarquons que la vitesse n'intervient pas dans cette formule, mais peut être obtenue par :

$$\dot{x}(t) = \frac{(x(t + dt) - x(t - dt))}{2dt} + O(dt^2) \quad (2.36)$$

Les équations de mouvement sont donc intégrées en utilisant un schéma de différences finies de pas de temps  $\Delta t$ .

Au temps  $t$ , connaissant les positions  $\vec{x}^{(p)}(t)$  de toutes les particules ( $p$ ) dans le système et, connaissant toutes les interactions de paires  $(x^{(p1)}, x^{(p2)})(t)$ , nous calculons les intensités des forces de contact  $\vec{f}_n^{(p)}(t)$  et  $\vec{f}_t^{(p)}(t)$  par les lois de contact et les moments  $\vec{\mathcal{M}}^{(p)}(t)$  de chaque particule. Nous résolvons alors l'accélération translationnelle  $\vec{x}^{(p)}(t)$  et rotationnelle  $\vec{\omega}^{(p)}(t)$ .

Connaissant les positions et les rotations de toutes les particules au cycle précédent  $x(t - \Delta t)$ , nous pouvons calculer leurs positions et leurs rotations au cycle suivant  $x(t + \Delta t)$  selon :

$$\begin{cases} x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \ddot{x}(t)\Delta t^2, & ; \\ \theta(t + \Delta t) = 2\theta(t) - \theta(t - \Delta t) + \dot{\omega}(t)\Delta t^2, & . \end{cases} \quad (2.37)$$

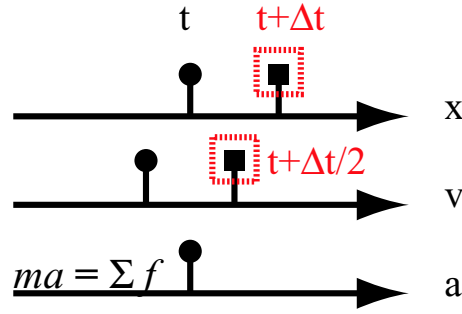


FIG. 2.15 – Schéma numérique d'intégration "Leap-Frog" : à partir de l'accélération de la particule  $\vec{x}$  à  $t$ , de sa vitesse  $\vec{x}$  à  $(t - \Delta t/2)$ , et de sa position  $\vec{x}$  à  $t$ , on peut calculer sa nouvelle position à  $(t + \Delta t)$  et sa nouvelle vitesse à  $(t + \Delta t/2)$ .

Les nouvelles positions  $x(t + \Delta t)$  et rotations  $\theta(t + \Delta t)$  étant connues, le cycle suivant  $t + \Delta t$  peut être commencé (voir figure 2.2).

### Méthode Leap-Frog

La schéma d'intégration Leap-Frog est une variante du schéma précédent ; en effet, nous pouvons réécrire les développements de Taylor sous des formes sensiblement différentes :

$$\begin{cases} x(t + dt) = x(t) + (\dot{x}(t) + \ddot{x}(t)\frac{dt}{2})dt + O(dt^3), & ; \\ \dot{x}(t + \frac{dt}{2}) = (\dot{x}(t) + \ddot{x}(t)\frac{dt}{2}) + O(dt^3), & ; \\ \dot{x}(t - \frac{dt}{2}) = (\dot{x}(t) - \ddot{x}(t)\frac{dt}{2}) + O(dt^3), & . \end{cases} \quad (2.38)$$

A partir de ces trois développements, 2.38, il s'ensuit :

$$\begin{cases} x(t + dt) = x(t) + \dot{x}(t + \frac{dt}{2})dt, & ; \\ \dot{x}(t + \frac{dt}{2}) = \dot{x}(t - \frac{dt}{2}) + \ddot{x}(t)dt, & . \end{cases} \quad (2.39)$$

Remarquons que les positions  $x(t + dt)$  et les vitesses  $\dot{x}(t + \frac{dt}{2})$  sont évaluées à des instants différents ; néanmoins, cela ne présente pas de réel problème et si les vitesses ont besoin d'être évaluées à  $t$ , alors celles-ci peuvent être calculées comme :

$$\dot{x}(t) = \dot{x}(t \pm \frac{dt}{2}) \mp \ddot{x}(t)\frac{dt}{2}, \quad (2.40)$$

De la même façon que dans le précédent schéma d'intégration, au temps  $t$ , connaissant les positions  $\vec{x}^{(p)}(t)$  de toutes les particules ( $p$ ) dans le système, et connaissant toutes les interactions de paires  $(\vec{x}_{(p1)}, \vec{x}_{(p2)})(t)$ , nous calculons les intensités des forces de contact  $\vec{f}_n^{(p)}(t)$  et  $\vec{f}_t^{(p)}(t)$  par les lois de contact et les moments  $\vec{M}^{(p)}(t)$  de chaque particule. Nous résolvons alors l'accélération translationnelle  $\vec{\ddot{x}}^{(p)}(t)$  et rotationnelle  $\vec{\ddot{\omega}}^{(p)}(t)$ .

Connaissant les vitesses de toutes les particules à l'intervalle de cycle précédent  $\dot{x}(t - \frac{dt}{2})$ , nous pouvons calculer dans un premier temps leurs vitesses à l'intervalle de cycle suivant  $\dot{x}(t + \frac{dt}{2})$  et dans un deuxième temps leurs positions au cycle suivant  $x(t + dt)$ .

Comme c'est le schéma que nous avons surtout utilisé dans nos simulations, nous allons en donner une description plus complète ; ici, les équations de mouvement sont donc intégrées en utilisant un schéma de différences finies centrées sur le pas de temps  $\Delta t$ .

Les quantités  $\dot{x}$  et  $\omega$  sont calculées sur l'intervalle  $t \pm \frac{\Delta t}{2}$  alors que les quantités  $x, \ddot{x}, \theta, \ddot{\omega}$ ,  $f$  et  $M$  sont calculées sur l'intervalle  $t \pm n\Delta t$ . Les accélérations en translation et en rotation sont calculées à  $t$  en fonction des vitesses aux centres des intervalles  $t \pm n\Delta t$  :

$$\begin{cases} \vec{\dot{x}}(t) = \frac{1}{\Delta t} [\vec{x}(t + \Delta t/2) - \vec{x}(t - \Delta t/2)], & ; \\ \vec{\dot{\omega}}(t) = \frac{1}{\Delta t} [\vec{\omega}(t + \Delta t/2) - \vec{\omega}(t - \Delta t/2)], & . \end{cases} \quad (2.41)$$

En insérant ces équations dans la relation fondamentale de la dynamique, nous obtenons les expressions des vitesses aux centres des intervalles ( $t \pm n\Delta t$ ) :

$$\begin{cases} \vec{x}(t + \Delta t/2) = \vec{x}(t - \Delta t/2) + \left( \frac{\vec{F}(t)}{m} + \vec{g} \right) \Delta t, & ; \\ \vec{\omega}(t + \Delta t/2) = \vec{\omega}(t - \Delta t/2) + \left( \frac{\vec{M}(t)}{I} \right) \Delta t, & . \end{cases} \quad (2.42)$$

Et finalement, on peut calculer les positions  $\vec{x}$  et les rotations  $\vec{\theta}$  des particules en ( $t + \Delta t$ ) :

$$\begin{cases} \vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \vec{\dot{x}}(t + \Delta t/2)\Delta t, & ; \\ \vec{\theta}(t + \Delta t) = \vec{\theta}(t) + \vec{\dot{\omega}}(t + \Delta t/2)\Delta t, & . \end{cases} \quad (2.43)$$

### Méthode de Prédicteur-Correcteur

Nous introduisons brièvement l'autre méthode d'intégration relativement répandue dans les modélisations de Dynamique Moléculaire, le *Prédicteur-Correcteur* [121]; cette méthode utilise d'avantage d'informations que les méthodes précédentes et se révèle en général plus précise. Les deux formes les plus familières sont :

- (1) la méthode 'multi-cycles' qui utilise les valeurs des accélérations aux cycles antérieurs  $\{\ddot{x}(t), \ddot{x}(t - \Delta t), \ddot{x}(t - 2\Delta t), \dots\}$ ,
- (2) la méthode qui utilise au cycle courant ( $t$ ) les dérivés d'ordres supérieurs de l'accélération au pas de temps considéré  $\{\ddot{x}(t), \frac{d}{dt}\ddot{x}(t), \frac{d^2}{dt^2}\ddot{x}(t), \dots\}$ .

L'intégration se ramène à résoudre l'équation différentielle de second ordre :

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, t), \quad (2.44)$$

qui se déroule en deux étapes :

- (1) Dans un premier temps, la position  $x(t + \Delta t)$  et la vitesse  $\dot{x}(t + \Delta t)$  sont prédites au pas de temps ( $t + \Delta t$ ) à l'aide de la formule de prédicteur  $\{P(x)$  et  $P(\dot{x})\}$ ; on peut alors calculer la fonction  $f(P(x(t + \Delta t)), P(\dot{x}(t + \Delta t)), t + \Delta t)$ .
- (2) Dans un deuxième temps, la position  $x(t + \Delta t)$  et la vitesse  $\dot{x}(t + \Delta t)$  prédites sont corrigées à l'aide de la formule de correcteur ( $C(x)$  et  $C(\dot{x})$ ) en prenant en compte la valeur de  $f$  précédemment calculée, c'est-à-dire,  $f(P(x(t + \Delta t)), P(\dot{x}(t + \Delta t)), t + \Delta t)$ .

Etant donné que cette méthode prend en compte un nombre plus important d'informations, elle atteint une meilleure précision dans le calcul des trajectoires des particules et donc les interactions sont mieux reproduites; cependant elle reste plus complexe à mettre en oeuvre et nécessite une allocation mémoire plus importante. Bien que deux étapes soient nécessaires à l'intégration, les forces ne sont calculées qu'une seule fois au cours d'un cycle de calcul avant l'étape de prédiction et elles ne sont pas réévaluées avant l'étape de correction. C'est en effet l'évaluation des forces qui est la plus consommatrice en temps de calcul dans un algorithme de Dynamique Moléculaire.

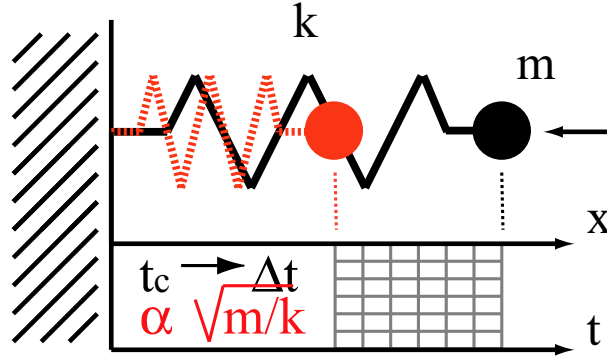


FIG. 2.16 – Modèle masse-ressort : une masse  $m$  est accrochée à une extrémité d'un ressort de raideur  $k$ , dont l'autre extrémité est fixée à une paroi rigide.

## 2.5.2 Temps de contact et échantillonnage critique

### 2.5.3 Modélisation d'une collision binaire

Si nous considérons le problème simple d'une collision binaire frontale de particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) en interaction élastique ; on a vu que la force normale d'interaction est liée à l'interpénétration  $w$  (négative) des deux particules ; cette force de restitution élastique, liée à l'énergie élastique stockée au contact, est de la forme :

$$\begin{cases} \vec{f}_n^{el} = k_n^{(c)} w n^{(c)}, & \text{en élasticité linéaire ;} \\ \vec{f}_n^{el} = k_n^{(c)} w^{1+\gamma} n^{(c)}, & \text{en élasticité non linéaire.} \end{cases} \quad (2.45)$$

Dans le cas linéaire, c'est l'équation classique d'un ressort de rigidité  $k$  comme c'est illustré sur la figure 2.16 ; Dans le cas non-linéaire, à différents modèles de contacts de particules sphériques correspondent différents paramètres  $\gamma$  (Pour un modèle de contact de Hertz,  $\gamma = 1/2$ , et  $f_n^{(c)} \propto w^{3/2}$ ).

On peut également introduire une force dissipative de nature dynamique au contact de la forme :

$$\begin{cases} \vec{f}_n^{diss} = -2D_n \bar{m} (\dot{x}^{(c)} \cdot n^{(c)}) n^{(c)}, & \text{en élasticité linéaire ;} \\ \vec{f}_n^{diss} = -2D_n \bar{m} (\dot{x}^{(c)} \cdot n^{(c)}) w^\gamma n^{(c)}, & \text{en élasticité non linéaire.} \end{cases} \quad (2.46)$$

$D_n$  est le coefficient de dissipation normale,  $\bar{m}$  est la masse réduite des particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ) et le paramètre  $\gamma$  introduit la non-linéarité du modèle de contact.

Dans le cas où les interactions de contact sont strictement linéaires, le mouvement relatif des particules ( $p1$ ) et ( $p2$ ), matérialisé par le point  $x^{(c)}$  est gouverné par l'équation différentielle :

$$\bar{m} \ddot{x}^{(c)} + \bar{m} D \dot{x}^{(c)} + k x^{(c)} = 0 \quad \rightarrow \quad \ddot{x}^{(c)} + \mu \dot{x}^{(c)} + \omega_0^2 x^{(c)} = 0, \quad (2.47)$$

où  $\mu = D_n$  et  $\omega_0^2 = \sqrt{k/\bar{m}}$ .

la solution classique de cette équation d'oscillateur amorti est :

$$\begin{cases} x^{(c)}(t) = \frac{\dot{x}^{(c)}(t < t_c)}{\omega} \exp^{-\mu t} \sin(\omega t), & \text{et} \\ x^{(c)}(t) = \frac{\dot{x}^{(c)}(t < t_c)}{\omega} \exp^{-\mu t} (-\mu \sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)), & . \end{cases} \quad (2.48)$$

où  $\dot{x}^{(c)}(t < t_c)$  est la vitesse relative avant la collision frontale, et  $\omega$  est la pulsation de l'oscillateur amorti valant  $\sqrt{\omega_0^2 - \mu^2}$ .

Le temps de contact, c'est-à-dire le temps que dure la collision depuis le moment où  $w \leq 0$  au moment où  $w > 0$  est :

$$t_w = \frac{\pi}{\omega} = \frac{\pi}{\sqrt{(k/\bar{m}) - (D_n/\bar{m})^2}}, \quad (2.49)$$

soit  $t_w = \pi\sqrt{m/k}$  lorsqu'il n'y a pas de dissipation au contact ( $D_n = 0$ , temps de contact plus court).

### 2.5.4 Echantillonnage critique

Maintenant que nous avons introduit l'équation et la solution d'un oscillateur amorti dans le cadre d'un contact entre particules, considérons un système de "masse-ressort" à une dimension (voir figure 2.16), décrit par une particule de masse  $m$  et un ressort de raideur  $k$ . Le mouvement du point est gouverné par l'équation différentielle  $m\ddot{x}^{(p)} = -kx^{(p)}$ , la résolution numérique de ce problème, calculée par un schéma de différences finies de second ordre, sera stable seulement si le pas de temps  $\Delta t$  n'excède pas un pas de temps critique  $\Delta t_c$  qui vaut :

$$\Delta t_c = \frac{T}{\pi}, \text{ avec } T = 2\pi\sqrt{m/k}, \quad (2.50)$$

où  $T$  est la période du système.

Le système que nous modélisons dans la Méthode des Eléments Discrets est un assemblage de particules en contact dans un espace bidimensionnel ou tridimensionnel ; chacune des particules ( $p$ ) peut avoir sa propre masse  $m^{(p)}$  (par exemple, si l'on considère une distribution de taille de particules) et chaque contact peut également avoir une raideur différente (si l'on considère par exemple des particules de propriétés élastiques différentes) ou simplement pour une distribution de surfaces de contact  $S^{(c)}$  dans un modèle de contact non-linéaire.

Pour chaque degré de liberté (mouvement de translation  $\mathcal{T}$  et mouvement de rotation  $\mathcal{R}$ ) supposés non couplés, un pas de temps critique est calculable  $\Delta t_c^{\mathcal{T}} = \sqrt{m/k^{\mathcal{T}}}$  et  $\Delta t_c^{\mathcal{R}} = \sqrt{I/k^{\mathcal{R}}}$ . Le pas de temps critique retenu sera le plus petit de tous les pas de temps critiques calculés pour tous les degrés de libertés des particules. On choisira enfin un pas de temps  $\Delta t$  de l'ordre du dixième de la valeur du pas de temps critique déterminée  $\Delta t_c$  afin de résoudre correctement le mouvement de la particule sur la période d'oscillation  $T$ .

### 2.5.5 Dissipation d'énergie

Dans un système frictionnel, l'énergie apportée au système de particules est dissipée par glissement au contact des grains lorsque la force transversale atteint le seuil de friction. Cependant, dans certaines simulations, le glissement peut ne pas être autorisé ou bien alors ce mode de dissipation peut se révéler insuffisant pour aboutir à un état d'équilibre dans un délai (nombre de cycles de calcul) raisonnable.

Il existe des méthodes alternatives pour dissiper l'énergie du système en amortissant le mouvement des particules.

#### Amortissement global de *fluide environnant visqueux*

Un amortissement global associé au milieu dans lequel les particules sont en mouvement peut être pris en compte dans les équations de la dynamique des particules ; On réécrit, les équations

du mouvement de translation  $\mathcal{T}^{(p)}$  et du mouvement de rotation  $\mathcal{R}^{(p)}$  en prenant en compte les termes d'amortissement globaux :

$$\begin{cases} m(\ddot{\vec{x}}^{(p)} - \vec{g}) + C_T^g \dot{\vec{x}}^{(p)} = \vec{f}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n^{(c)}} \vec{f}^{(c)}, & ; \\ I \ddot{\vec{\omega}}^{(p)} + C_R^g \dot{\vec{\omega}}^{(p)} = \vec{\mathcal{M}}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n_c^{(p)}} \vec{\mathcal{M}}^{(c)}, & . \end{cases} \quad (2.51)$$

où  $C_T^g$  est le coefficient d'amortissement global pour le mouvement de translation et  $C_R^g$  est le coefficient d'amortissement global pour le mouvement de rotation.

### Amortissement local de collisions visco-élastiques

Il est également possible d'introduire un terme d'amortissement de contact qui rend compte d'une interaction purement visco-élastique ; la forme générale des composantes normales et tangentielles des forces de contact est :

$$\begin{cases} \vec{f}_n^{(c)} = k_n^{(c)} w n^{(c)} + C_n^l \dot{x}^{(c)} n^{(c)}, & ; \\ \Delta \vec{f}_t^{(c)} = -k_t \Delta s + C_t^l \dot{x}^{(c)} t^{(c)}, & . \end{cases} \quad (2.52)$$

où  $C_n^l$ , et  $C_t^l$  sont les coefficient d'amortissement locaux aux contacts pour les composantes normales et tangentielles de la force de contact.

On notera que ces termes de dissipation introduits dans les équations maîtresses de la dynamique, rendent compte exclusivement d'interactions visco-élastiques aux contacts mais ne reproduisent en aucun cas des déformations permanentes (c'est-à-dire plastiques).

## 2.6 Calcul du tenseur des contraintes

La contrainte  $\bar{\sigma}$  est une quantité continue ; par conséquent, elle ne peut pas être définie en chaque point de l'espace dans un assemblage particulière car ce milieu est par définition de nature discrète. Les forces de contact sont définies à la micro-échelle et pour passer de la micro-échelle des contacts à l'échelle du milieu continu de l'assemblage, il est nécessaire d'opérer une moyenne sur l'espace.

Les composantes du tenseur des contraintes moyennes  $\bar{\sigma}$  dans un volume de matériau  $V$  sont définies comme :

$$\langle \sigma_{ij}^{(V)} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV, \quad (2.53)$$

où  $\sigma_{ij}$  est le tenseur des contraintes au sein du volume  $V$ .

Pour un matériau de nature discrète, la plus petite échelle à laquelle les contraintes sont définissables correspond à l'échelle des particules et, par conséquent, l'intégrale sur le volume  $V$  du matériau peut être remplacée par une somme sur les  $N$  particules contenues dans ce volume :

$$\langle \sigma_{ij}^{(V)} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle V^{(p)}, \quad (2.54)$$

où  $\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle$  est le tenseur des contraintes moyennées sur la particule  $(p)$  ; il peut se réécrire en terme du tenseur local des contraintes dans la particule  $\sigma_{ij}^{(p)}$  comme :

$$\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle = \frac{1}{V^{(p)}} \int_{V^{(p)}} \sigma_{ij}^{(p)} dV^{(p)}, \quad (2.55)$$



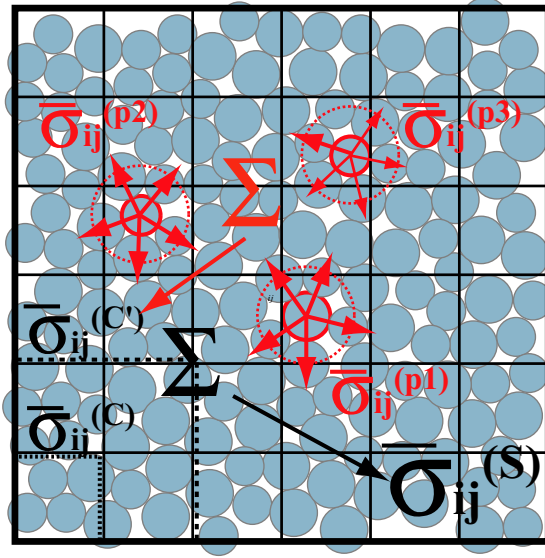


FIG. 2.17 – Détermination des contraintes dans un matériau granulaire : le tenseur local  $\sigma_{ij}^{(p)}$  est tout d’abord moyenné sur chaque particule à partir des forces de contact  $f_n$  et  $f_t$ , ensuite on peut calculer un tenseur de contraintes moyenné sur un ensemble de particules contenues dans une cellule  $\langle \sigma_{ij}^{(C)} \rangle$  ou bien sur l’ensemble des particules contenues dans le système  $\langle \sigma_{ij}^{(S)} \rangle$ .

Pour un tenseur quelconque  $A_{ij}$ , on peut écrire l’identité suivante :

$$A_{ij} = \delta_{ik} A_{kj} = x_{i,k} A_{kj} = [(x_i A_{kj})_{,k} - x_i A_{kj,k}], \quad (2.56)$$

En appliquant cette identité au tenseur local des contraintes  $\sigma_{ij}^{(p)}$  de la particule  $(p)$ , on obtient :

$$\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle = \frac{1}{V^{(p)}} \int_{V^{(p)}} \left[ (x_i \sigma_{kj}^{(p)})_{,k} - x_i \sigma_{kj,k}^{(p)} \right] dV^{(p)}, \quad (2.57)$$

L’intégrale de volume peut être réécrite comme une intégrale de surface en appliquant le théorème de ”Gauss-Divergence” au premier terme de l’intégrale; l’équation d’équilibre en l’absence de forces centrales (agissant sur le centre de masse, ici  $\vec{g} = \vec{0}$ ) s’écrit comme  $d\vec{i}v\vec{\sigma} = \vec{0}$  et le second terme de l’intégrale s’annule.

$$\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle = \frac{1}{V^{(p)}} \int_{S^{(p)}} (x_i \sigma_{kj}^{(p)}) n_k dS^{(p)}, \quad (2.58)$$

où  $S^{(p)}$  est la surface de la particule  $(p)$ ,  $\vec{n}^{(p)}$  est le vecteur unité normal dans la direction sortante de cette surface.

Chaque particule étant chargée par des forces ponctuelles agissant  $\vec{f}^c$  sur des surfaces finies de contact  $S^{(c)}$ , l’intégrale précédente peut être remplacée par une somme sur les  $n_c^{(p)}$  contacts de la particule  $(p)$ , et l’expression du tenseur des contraintes moyenné sur la particule  $(p)$  devient :

$$\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle = \frac{1}{V^{(p)}} \sum_{k=1}^{n_c^{(p)}} x_i^{(c)} f_j^{(c)}, \quad (2.59)$$

où  $\vec{x}^{(c)}$  et  $\vec{f}^{(c)}$  sont respectivement les points de contact et les forces agissantes sur les surfaces de contact  $S^{(c)}$ . Le signe négatif est ici introduit pour s'assurer qu'une force compressive corresponde à une contrainte moyenne négative, selon la convention choisie.

La position du contact  $\vec{x}^{(c)}$  peut être réécrite d'une autre façon en terme de la position de la particule  $\vec{x}^{(p)}$  selon

$$x_i^{(c)} = x_i^{(p)} + \left| x_i^{(c)} - x_i^{(p)} \right| n_i^{(c,p)}, \quad (2.60)$$

où  $n_i^{c,p}$  est le vecteur unité normal dirigé du centre de la particule ( $p$ ) vers le point de contact ( $c$ ).

Si une particule est en équilibre alors la force nette  $\vec{f}^{(p)}$  sur la particule est nulle, soit :

$$\vec{f}^{(p)} = \sum_{k=1}^{n^{(c)}} \vec{f}^k = \vec{0} \quad (2.61)$$

En remplaçant 2.60 et 2.61 dans l'expression du tenseur des contraintes moyennes  $\langle \sigma_{ij} \rangle$  dans la particule ( $p$ ), on obtient :

$$\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle = -\frac{1}{V^{(p)}} \sum_{k=1}^{n^{(c)}} \left| x_i^{(c)} - x_i^{(p)} \right| n_i^{(c,p)} f_j^{(c)} \quad (2.62)$$

Le tenseur des contraintes moyennes sur le volume  $V$  du matériau peut maintenant être calculé en reprenant l'expression 2.54 et en y incorporant l'expression du tenseur des contraintes  $\langle \sigma_{ij}^{(p)} \rangle$  moyennées à l'échelle des particules ( $p$ ). L'expression finale obtenue pour ce tenseur est :

$$\langle \sigma_{ij}^{(V)} \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{l=1}^{N_p} \sum_{k=1}^{n_c^{(p)}} \left| x_i^{(c)} - x_i^{(p)} \right| n_i^{(c,p)} f_j^{(c)} \quad (2.63)$$

## 2.7 Structure des données - Implémentation Série

Nous présentons brièvement la structure de données que nous avons choisie d'utiliser pour implémenter la Méthode des Eléments Discrets (voir figure 2.18). Les principaux groupes de données que nous traitons dans cette méthode sont : les données du système ( $S$ ), les données des cellules ( $C$ ), les données des particules ( $p$ ) et les données des contacts ( $c$ ); ces données sont regroupées selon des structures de données propres à chaque type ( $S$ ), ( $C$ ), ( $p$ ) et ( $c$ ). Ces structures de données peuvent être reliées entre elles, et la façon de les lier va définir la structure globale des données.

Une structure de données autoreférentielle (ou structure récursive) correspond à une structure dont au moins un des champs contient un lien (pointeur) vers une structure de même type (organisation horizontale sur figure 2.18). Ce sera le cas pour les structures de données de type cellule, de particule et de contact. Chaque structure contient des données propres à son type, et chaque structure est organisée selon une liste double chaînée (c'est le cas dans notre structure de données) : chaque structure fait référence à deux autres structures de même type (structure autoréférentielle) qui pointent elles mêmes sur cette structure. Mais chaque structure ne fait pas seulement référence à une structure de même type; elle peut également faire référence à une structure de type différent et on parle alors d'une structure en arbre (organisation verticale sur figure 2.18).

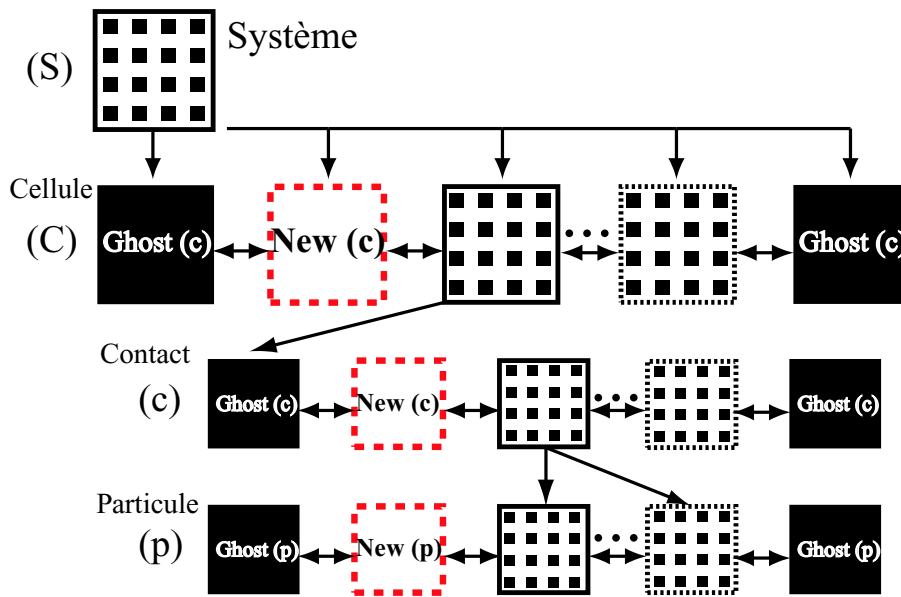


FIG. 2.18 – Structure de données dans le programme de "Dynamique Moléculaire" développé : quatre types de données sont définis (a) Système, (b) Cellule, (c) Contact et (d) Particule ; à partir de ces éléments, on construit une structure complexe (entre liste chaînée et arbre) reliant les éléments entre eux ; cette structure de données évolue au cours de la simulation.

Tous ces éléments ou noeuds de données peuvent être éparpillés en mémoire, mais sont reliés entre eux par des liens logiques (les pointeurs vers des adresses mémoires) ; c'est ce qui permet d'avoir une gestion par allocation dynamique de la mémoire. Dans les simulations, ce sont surtout les structures de type contact qui font le plus appel à la gestion dynamique de la mémoire ; en effet, si le nombre de contacts évolue constamment au cours des simulations, le nombre de cellules et le nombre de particules sont souvent fixés au début de la simulation et restent inchangés par la suite.

## 2.8 Implémentation parallèle

La limite pratique de modélisation pour la Méthode des Eléments Discrets sur des architectures séries (PC et stations de travail) en terme de capacité mémoire et de temps de calcul est de l'ordre de quelques dizaines de milliers de particules que ce soit en géométrie  $2D$  ou en géométrie  $3D$ . Si l'on souhaite modéliser des systèmes de plusieurs centaines de milliers de particules, il devient inévitable de recourir à la modélisation sur des architectures parallèles.

Il existe différentes façons d'implémenter la Méthode des Eléments Discrets sur une architecture parallèle selon, qu'il s'agisse d'une architecture à mémoire partagée (l'ensemble des noeuds se partagent une unité de mémoire unique) ou bien d'une architecture à mémoire distribuée (chaque noeud possède son unité de mémoire propre, à laquelle il est le seul à avoir accès). Dans le cadre de cette thèse, nous avons implémenté de deux façons la Méthode des Eléments Discrets sur une architecture parallèle à mémoire distribuée.

- (1) Dans le cas où le système à modéliser est de petite taille, la mémoire d'un noeud sera suffisante pour stocker la totalité des données. Dans ces conditions, il peut être intéressant de modéliser le même système de particules sur chaque noeud en faisant par exemple varier un ou plusieurs paramètres pour échantillonner l'espace des paramètres d'un problème

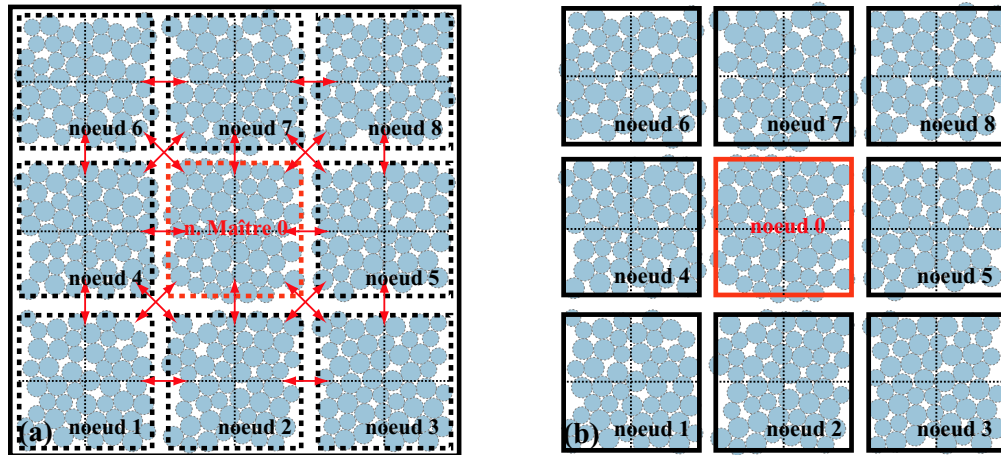


FIG. 2.19 – Modes d’implémentation parallèle d’un algorithme de ”Dynamique Moléculaire” : (a) par décomposition de domaines pour simuler un système de particule de grande taille où chaque processeur traite une région du système et communique avec les autres processeurs pour calculer les interactions entre les domaines ; (b) chaque processeur traite indépendamment, soit le même système de particules avec des paramètres de simulations différents, soit il traite des systèmes différents (configurations de particules) avec les mêmes paramètres, et seul le processeur maître effectue des communications pour affecter les tâches aux processeurs esclaves.

donné. Ou bien, on peut modéliser des systèmes différents (différentes réalisations initiales, c’est-à-dire, des configurations spatiales de particules différentes) avec le même jeu de paramètres afin de pouvoir moyenner certaines quantités sur l’ensemble des simulations. Dans ces deux configurations, la technique consiste à lancer depuis un noeud ’maître’, l’ensemble des simulations sur les noeuds ’esclaves’ ; le noeud maître s’occupe d’initialiser les simulations sur les autres noeuds en leur communiquant les informations nécessaires comme les positions initiales des particules (la réalisation), les jeux de paramètres, il s’occupe également de gérer les modifications des conditions au cours des simulations.

- (2) Dans le cas où l’on souhaite modéliser un système de grande taille, deux problèmes peuvent se poser ; soit la mémoire d’un noeud n’est pas suffisante pour stocker toutes les informations nécessaires pour la simulation, soit le nombre de particules devient trop important et le temps de calcul devient trop grand. Dans ces conditions, la technique consiste à partager la tâche de modélisation globale sur l’ensemble des noeuds ; à chaque noeud sera attribué un domaine de l’espace totale à modéliser. Il faut donc partitionner le système en un certain nombre de domaines et d’assigner à chaque noeud une de ces régions. Chacune de ces régions est elle même composée d’un ensemble de cellules. De cette façon, toutes les particules et toutes les interactions assignées à une cellule seront assignées au noeud traitant la région où se trouve la cellule.

Lorsqu’une particule se déplace d’une cellule  $i$  appartenant à une région vers une cellule appartenant à une autre région  $j$ , toutes les informations concernant cette particule et ces interactions devront être transférées de la mémoire du noeud traitant la cellule  $i$  vers la mémoire du noeud traitant la cellule  $j$ . Ces communications d’informations entre noeuds sont pénalisantes en terme de temps de calcul puisqu’elles augmentent le temps du cycle de calcul. Cependant, au cours d’un cycle, seule une petite fraction du nombre total de particules se déplacent ainsi d’une région vers une autre région. Dans le cas où les interactions entre particules sont de courtes portées, la majorité des interactions ont lieu entre les

particules appartenant à une même région et par conséquent le volume des communications entre noeuds est réduit.

Une des conditions requises pour l'efficacité de l'implémentation parallèle est que la mise en oeuvre des communications soit la plus efficace possible, c'est-à-dire que le temps consacré au transfert d'informations soit le plus petit possible.

### 2.8.1 Conclusions et Perspectives

Au cours de cette thèse, nous avons développé un programme qui permet de modéliser des assemblages de particules sphériques élastiques 'interpénétrables' aux contacts en adoptant la Méthode des Eléments Discrets. Cette méthode a été implémentée en utilisant à la fois de la programmation en Fortran 95 [104] [71] [121] [122] et en C [123] permettant une structure modulaire (schémas d'intégration, modèle de forces, post-traitement) et une gestion dynamique de la mémoire (liste chaînée).

Ce programme nous a permis de modéliser des systèmes bi-dimensionnels et tri-dimensionnels de particules dont le nombre peut varier de quelques centaines à plusieurs dizaines de milliers (100000). Ce dernier chiffre correspond à une limite pratique pour les architectures séries actuelles. Aussi, afin de moyennner nos résultats sur un ensemble de réalisations différentes, nous avons par la suite adapté la version 'série' du programme pour le faire fonctionner sur des architectures parallèles ; dans cette version, un jeu de simulations (assemblages de particules ou paramètres différents) est lancé simultanément sur un ensemble d'unités de calculs communicant entre elles. Une unité maître se charge de coordonner les communications et les entrées/sorties fichier. Nous avons adopté l'interface de communication la plus répandue *MPI* [117] [145] [61] [72], et nous avons fait fonctionner le programme sur des architectures parallèles différentes (Cluster de PC sous Linux à l'*ENS* et à l'*IPGP*, et Cluster *SUN* au Levich Institute).

Enfin, une version purement parallèle a également fait l'objet d'un développement dans l'objectif de modéliser des systèmes de taille plus importante ou bien de modéliser plus rapidement un système de taille modérée en répartissant la tâche de calcul sur plusieurs unités par décomposition de Domaine. Cette version purement parallèle nécessite un volume de communications important. Cette version n'a pas été finalisée dans le cadre de cette thèse.

Pour chaque simulation, l'état du système, c'est-à-dire toute les informations contenues dans la structure de données de la liste chaînée (système, cellules, particules, contacts, ...), a été sauvegardé régulièrement dans la limite d'espace libre sur les disques de sauvegardes, sous forme de fichiers binaires. Ces fichiers binaires peuvent servir à la fois à l'analyse ultérieure des données mais ils sont également utilisés pour régénérer un système correspondant à l'état sauvegardé.

Nous avons également programmé un certain nombre de routines de traitement de données mais aussi de visualisation bidimensionnelle (génération d'image Post-Script [81]) ou tridimensionnelle (génération de structures de données compatibles avec le logiciel *IBM Open Data Visualisation Explorer*).

Les comportements observés numériquement ont pu, dans certains cas, être comparés à des mesures et observations expérimentales. Les protocoles de préparation d'assemblages granulaires, et les différentes conditions aux limites que nous avons implémentées seront exposés dans les chapitres suivants.

Deuxième partie

Propriétés Géométriques et Mécaniques  
d'Assemblages Granulaires Denses



# Effets des paramètres de mélange sur les propriétés des assemblages granulaires bidisperses

## Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>63</b>
<b>3.2</b>	<b>Simulations numériques</b>	<b>64</b>
3.2.1	Méthode des Eléments Discrets	64
3.2.2	Compaction et densification	65
<b>3.3</b>	<b>Les mélanges bidisperses</b>	<b>66</b>
3.3.1	La déviation de rayon	67
3.3.2	La concentration	67
<b>3.4</b>	<b>Propriétés Géométriques</b>	<b>67</b>
3.4.1	Coordinance et fraction solide	67
3.4.2	Fabrique du réseau des contacts	73
3.4.3	Paramètres de structure et d'ordre	74
<b>3.5</b>	<b>La réponse mécanique des mélanges bidisperses</b>	<b>82</b>
3.5.1	Modules élastiques effectifs	83
3.5.2	Transmission des forces	84
<b>3.6</b>	<b>Influence de la concentration</b>	<b>92</b>
<b>3.7</b>	<b>Fortes hétérogénéités de taille</b>	<b>95</b>
<b>3.8</b>	<b>Rapport de tailles critique</b>	<b>95</b>
3.8.1	Réseau de transmission des forces de contact	96
3.8.2	Coordinance moyenne et porosité	96
3.8.3	Modules élastiques effectifs	99
3.8.4	Distributions des forces et des longueurs de chaînes	99
<b>3.9</b>	<b>Conclusion</b>	<b>101</b>

---

## 3.1 Introduction

Ce chapitre se rapporte à un problème important concernant les assemblages granulaires, à savoir comment l'ordre (degré d'organisation des particules) et la réponse mécanique d'un



système composé de plusieurs espèces de particules, sont liés aux paramètres de mélange, à savoir les hétérogénéités de taille de particules et les concentrations des différentes espèces.

Dans cette étude, nous présentons des résultats numériques sur les propriétés géométriques et mécaniques d'assemblages denses de particules sphériques élastiques, distribuées selon un arrangement bidimensionnel. Nous nous sommes intéressés à l'étude de la plus simple configuration des assemblages "multi-composants" consistant en un mélange bidisperse (c'est-à-dire deux espèces de taille de particules différentes).

Dans l'intervalle d'hétérogénéité de tailles considéré, les propriétés géométriques moyennes telles que la coordinence moyenne des particules  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  ou la fraction volumique solide  $\phi_s$  (ou la fraction complémentaire, la porosité  $\phi$ ), mais également la réponse mécanique, dépendent fortement de la composition du mélange ; l'ordre dans l'assemblage est mesuré par des paramètres d'ordre locaux et globaux d'orientations de contacts  $\langle \Psi_6 \rangle$ .

L'étude systématique des assemblages de sphères par des simulations numériques a une longue histoire, qui trouvent ses racines dans la théorie des liquides et des verres [147] ; elles nous permettent d'étudier les propriétés géométriques en prenant en compte les contacts réels entre les particules, qui sont importantes pour les propriétés mécaniques et les propriétés de transport.

Au vu de la richesse du problème des assemblages de sphères et la grande variété des applications, il est important de connaître les réponses à des questions fondamentales, telles que la relation entre le degré d'ordre dans les assemblages de particules bidisperses et les paramètres caractérisant le mélange, les hétérogénéités de tailles et les concentrations des espèces.

D'autre part, l'étude des assemblages de particules distribuées dans une géométrie plane, c'est-à-dire des arrangements bidimensionnels, peut être un bon outil pour l'étude et la compréhension des propriétés des assemblages tri-dimensionnels. Il est en effet intéressant de trouver les moyens de décrire ces propriétés, soit à l'aide de la définition de paramètres scalaires moyennés sur l'assemblage (par exemple la coordinence  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ , la fraction solide  $\phi_s$ , soit en caractérisant des fonctions de distributions de certaines variables (intensité des forces d'interactions  $\mathcal{P}(f)$ ) ou en étudiant les propriétés de fonctions de corrélations (corrélation de paires des positions des particules  $g(r)$ , corrélations des intensités des interactions de contacts  $K(r)$ ).

Il est bien connu, que les assemblages denses constitués de sphères de taille identique montrent des domaines ordonnés ; c'est pourquoi dans le présent chapitre, nous étudions les effets de distribution de taille de particules sur les propriétés géométriques et les caractéristiques mécaniques d'assemblages bidimensionnels de sphères élastiques. Nous nous intéressons plus particulièrement au problème de l'homogénéisation de la texture des assemblages en fonction de leur paramètres de mélanges. Cette étude préliminaire aux autres travaux réalisés au cours de cette thèse est fondamentale, car elle permet de définir et caractériser des assemblages de particules qui nous serviront comme de référence, et qui seront par la suite utilisés pour l'étude d'autres problèmes concernant plus généralement les matériaux granulaires.

## 3.2 Simulations numériques

Pour modéliser les assemblages granulaires polydisperses, nous utilisons le programme développé au cours de cette thèse et basé sur la méthode des "Eléments Discrets" [26], dont nous avons présenté la mise en oeuvre dans le chapitre 2.

### 3.2.1 Méthode des Eléments Discrets

Nous rappelons qu'il s'agit d'un modèle discret de sphères élastiques interagissant selon une loi de contact de type Hertz-Mindlin (force de contact normale non-linéaire de Hertz  $\vec{f}_n$  et force

de contact frictionnelle transversale  $\vec{f}_t$ ) :

$$\begin{cases} f_n = \frac{2}{3}k_n\bar{R}^{1/2}w^{3/2} & ; \\ \Delta f_t = k_t(\bar{R}w)^{1/2}\Delta s & . \end{cases} \quad (3.1)$$

On se rapportera au chapitre 4 pour les données plus détaillées concernant ces lois de contact, de type *force-déplacement*; elles y sont discutées en relation avec les constantes élastiques effectives des assemblages; on notera ici que le terme  $\bar{R} = 2R_1R_2/(R_1 + R_2)$  (issu de la distance mutuelle des deux centres des particules par rapport au plan de contact dans la théorie de Hertz [149] [79]) prend en compte les tailles différentes des deux sphères  $R_1$  et  $R_2$ ; ces lois de contact permettent donc de modéliser les interactions dans des assemblages polydisperses.

L'étude menée et présentée dans ce chapitre restreint la modélisation à la géométrie d'arrangement bidimensionnelle, où les centres des sphères sont distribués sur un plan. Dans ces simulations, les constantes élastiques des particules sont choisies en accord avec les valeurs typiques pour des billes de verre (utilisées dans de nombreux travaux expérimentaux de milieux granulaires [91] [99] [97] [13] [108]), c'est-à-dire, un module de cisaillement  $\mu = 30 \text{ GPa}$  et un coefficient de Poisson  $\nu = 0.2$ .

### 3.2.2 Compaction et densification

Nos simulations de mélange débutent avec un protocole numérique élaboré pour mimer la procédure expérimentale de préparation des assemblages granulaires denses [99]; cette procédure commence avec un gaz de  $N$  particules placées à des positions aléatoires, dans une cellule cubique de volume  $V$  répétée périodiquement dans l'espace ("virtuellement", par les conditions de frontières périodiques, voir au chapitre 1).

Pendant l'étape de *compaction-densification*, la force transversale d'interaction entre les particules  $\vec{f}_t$  de l'équation 3.1 n'est pas considérée ( $k_t = 0$ ) mais elle sera restaurée dans une étape ultérieure, lors du calcul des modules élastiques de l'assemblage et pour le moment, seule la force d'interaction normale  $\vec{f}_n$  est présente au contact.

Le système de particules, un *gaz* à l'état initial, est lentement comprimé par une déformation affine de l'assemblage,  $u_i = \epsilon_{ij}x_j$  (en spécifiant un taux de déformation macroscopique  $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon$ ), jusqu'à ce qu'une valeur de fraction solide spécifiée  $\phi_s$  soit atteinte; la valeur choisie pour  $\phi_s$  lors de la phase de compaction correspond à la configuration de particules du *Random Close Packing*, défini comme l'état de compacité maximale d'un assemblage désordonné de particules (quasi identiques, c'est à dire pour une distribution de taille très serrée) [151], soit  $\phi_s^{RCP} \approx 0.84$  à  $2D$  [7].

A ce stade, de nombreux contacts sont déjà formés ( $\langle \mathcal{Z} \neq 0 \rangle$ ) et la pression est non nulle  $p \neq 0$ ; la compression est alors stoppée ( $\dot{\epsilon}=0$ ) et on continue à résoudre le mouvement de translation des particules; le système de particules n'est plus déformé et peut donc se relaxer sans forçage vers une coordinence nulle ( $\langle \mathcal{Z} = 0 \rangle$ ), et donc vers une pression nulle  $p = 0$  (voir le calcul des contraintes  $\sigma_{ij}$  en fonction des forces de contact  $\vec{f}^{(C)}$  au chapitre 2).

Un terme d'amortissement est inclus dans la résolution numérique de la trajectoire des particules, pour empêcher les oscillations continues des interactions purement élastiques; cet amortissement est de nature visqueuse ( $C_\eta \dot{x}$ ) (voir chapitre 2); il permet au système de se relaxer vers un état d'équilibre même lorsque la pression est nulle (c'est-à-dire qu'il n'y a pas de contact entre les particules). Une fois que l'énergie cinétique des particules ( $\langle E_c \rangle$ ) a été complètement dissipée par la viscosité numérique, la compression est poursuivie au-delà de la fraction solide critique du *Random Close Packing*, à l'aide d'un mécanisme numérique de *Servo-Control* qui ajuste continûment, à chaque cycle de calcul, le taux de déformation appliqué au système  $\dot{\epsilon}$  pour

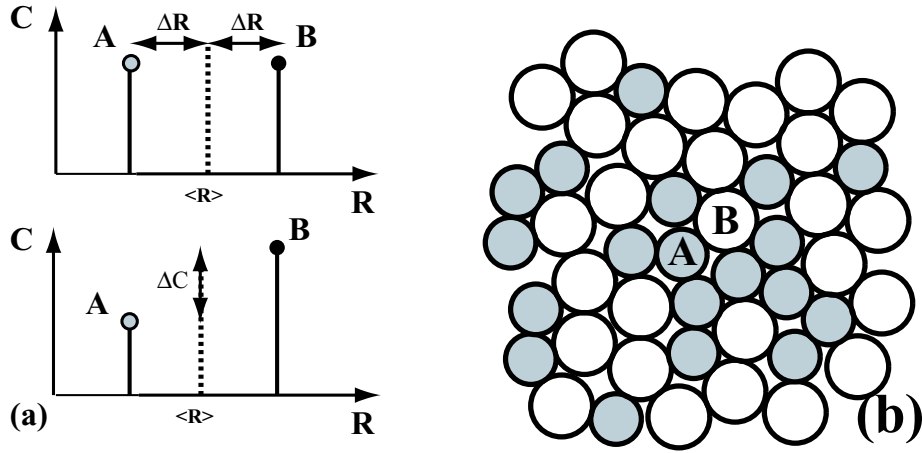


FIG. 3.1 – Mélange bidisperse : (a) paramètres caractérisant le mélange bidisperse de particules ( $A$ ) et ( $B$ ), respectivement de rayons  $R_A$  et  $R_B$  (avec  $R_A < R_B$ ) : la déviation de rayon  $\Delta_R$  par rapport au rayon moyen  $\langle R \rangle$ , ( $\delta_R = \Delta_R / \langle R \rangle$ ) et les concentrations des deux espèces  $C_A$  et  $C_B$  telles que  $C_A + C_B = 1$ ; (b) assemblage bidisperse de petites et grosses particules ( $A$ ) et ( $B$ ).

atteindre une pression  $p_0$  spécifiée, un état de contrainte  $\bar{\sigma}_0$  (si l'on veut obtenir un état de référence anisotrope), ou bien encore une fraction solide  $\phi_0$  dans un état d'équilibre statique ; ce protocole permet de densifier le système de façon très efficace, en réalisant une succession de cycles de *compression-dilatation* d'amplitude de plus en plus faibles censés reproduire l'agitation mécanique expérimentale imposée au système pour le densifier (sous forme de vibrations ou de légers chocs par exemple).

Comme les forces de frottement ne sont pas considérées aux contacts des particules, il n'y a pas de résistance transversale aux mouvements des particules au cours de la phase de *densification*, et de ce fait, le système de particules atteint des fractions solides maximales  $\phi_s$  pour la pression spécifiée  $p_0$ , telle que  $\phi_s(p_0) > \phi_s^{RCP}$ .

Pour l'étude présentée dans ce chapitre, tous les assemblages de particules modélisés ont été préparés de façon à atteindre un équilibre statique sous une pression de  $p_0 = 10 \text{ MPa}$  ; quelques simulations de mélange ont également été réalisées avec une pression inférieure  $p_0 = 1 \text{ MPa}$ , et qualitativement les résultats obtenus sont identiques à ceux présentés dans ce chapitre.

La coordinence moyenne obtenue pour ces assemblages confinés est toujours supérieure à  $Z > 4$  ; pour des assemblages de particules rigides (i.e. indéformables) et sans friction  $\mu_f = 0$ , on peut montrer qu'il existe une limite supérieure telle que  $\langle Z \rangle = 2D$ , où  $D$  est la dimension de la géométrie du problème. Pour des particules déformables (comme dans nos simulations au sens de l'interpénétration) et des pressions importantes, les particules sont comprimées, des contacts supplémentaires se forment, et la coordinence moyenne augmente.

### 3.3 Les mélanges bidisperses

Dans cette étude, nous nous intéressons aux effets de la polydispersité des particules sur les propriétés géométriques et mécaniques des assemblages ; le modèle le plus simple de polydispersité se résume à un mélange bidisperse, c'est-à-dire un mélange de deux espèces de particules ( $A$ ) (petites) et ( $B$ ) (grosses) (voir figure 3.1(b)) ayant les mêmes propriétés mécaniques (modules élastiques), mais (1) de rayons différents,  $R_A$  et  $R_B$ , et (2) de concentrations données,  $C_A$  et  $C_B$  (voir figure 3.1(a)).

### 3.3.1 La déviation de rayon

Pour définir l'écart de taille entre les deux espèces de particules, nous utilisons la déviation de rayon  $\Delta_R$  des deux espèces par rapport au rayon moyen  $\langle R \rangle$ ; on considère le paramètre  $\delta_{R_{A,B}}$  comme :

$$\delta_R = \frac{|\langle R \rangle - R_A|}{\langle R \rangle} = \frac{|R_B - \langle R \rangle|}{\langle R \rangle} = \frac{\Delta R_{A,B}}{\langle R \rangle}, \quad (3.2)$$

où  $\Delta R_{A,B}$  est l'écart de rayon des petites et grosses particules au rayon moyen  $\langle R \rangle = \frac{1}{2}(R_A + R_B)$ .

Dans un premier temps, les effets d'hétérogénéité de taille ont été étudiés sur un intervalle de déviation de rayon  $\delta_R$  allant de  $10^{-4}$  (soit 0.01% de  $\langle R \rangle$ ) à  $10^{-1}$  (soit 10% de  $\langle R \rangle$ ) pour une valeur de rayon moyen choisie à  $\langle R \rangle = 0.1 \text{ mm}$ . Dans un deuxième temps, la polydispersité a été étudiée pour des déviations de rayons plus importantes  $\delta_R$  allant de  $1.10^{-1}$  à  $7.10^{-1}$ ; au delà, pour un mélange à concentrations égales des deux espèces, l'écart de taille devient trop important; les petites particules sont de tailles inférieures à la taille des *pores* d'un arrangement *Hexagonal Compact* de grosses particules; elles peuvent alors se loger dans cette porosité; ceci fait apparaître un degré de complexité supplémentaire dans les arrangements binaires qui va au delà des ambitions de cette étude.

### 3.3.2 La concentration

La concentration  $C$  d'une espèce  $X$  dans l'assemblage est définie comme le rapport entre le nombre de particules qui compose cette population  $N_X$  au nombre total de particules dans le système  $N$  :

$$C_X = \frac{N_X}{N}, \quad (3.3)$$

et, on a naturellement  $\sum C_X = 1$ , puisque  $\sum N_X = N$ .

Dans une première partie de cette étude, nous considérons exclusivement les effets d'hétérogénéité de taille, et nous nous intéressons donc au cas d'un mélange binaire de particules, composé de deux populations ayant la même concentration, soit  $C_A = C_B = 0.5$  et nous faisons varier la déviation de rayon  $\delta_R$ ; dans une seconde partie en revanche, nous traiterons le cas où les deux populations sont de concentrations différentes telles que  $C_A = 1 - C_B = C$ , pour des déviations de rayons fixées; nous étudierons l'effet de la concentration sur un intervalle de  $C \in [0; 1]$ ; nous partirons donc d'un mélange monodisperse de petites particules ( $A$ ) et nous ferons croître la quantité de particules ( $B$ ) dans le mélange par rapport à la quantité de particules ( $A$ ); nous terminerons alors avec un assemblage monodisperse de particules ( $B$ ).

## 3.4 Propriétés Géométriques

### 3.4.1 Coordinence et fraction solide

#### Coordinence

La coordinence moyenne  $\langle Z \rangle$  d'un assemblage de particules correspond au nombre moyen de contacts que ces particules partagent entre elles; pour un matériau granulaire où les interactions sont *dures* (partie répulsive du potentiel très raide, partie attractive du potentiel nulle pour des

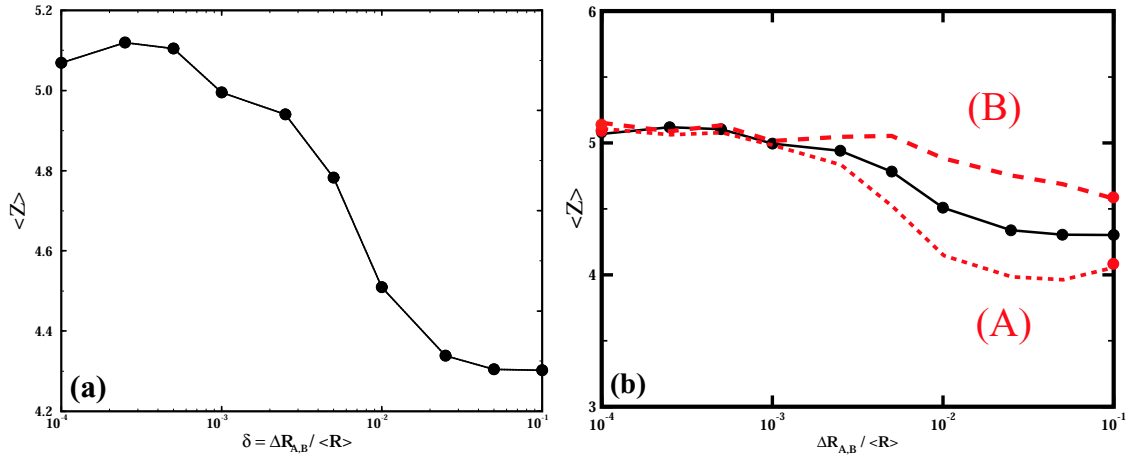


FIG. 3.2 – (a) évolution de la coordinnce moyenne des particules  $\langle Z \rangle$  dans l’assemblage en fonction de la déviation de rayon  $\Delta_R$  :  $\langle Z \rangle$  diminue approximativement d’une unité de 0.01% à 10% de déviation de rayon ; (b) évolution de la coordinnce partielle des deux espèces  $\langle Z_A \rangle$  et  $\langle Z_B \rangle$  sur le même intervalle de déviation : toutes les deux décroissent comme  $\langle Z \rangle$  (courbe noire) et on a :  $\langle Z_A \rangle < \langle Z \rangle < \langle Z_B \rangle$ .

particules non adhésives), dans la coordinnce de premier voisinage ( $r = R_B$ ), seules les paires de particules partageant une surface de contact  $S^{(C)}$  sont considérées.

Si  $n$  et  $N$  sont respectivement le nombre de contacts et le nombre de particules présents dans un assemblage de volume  $V$ , la coordinnce moyenne de l’assemblage  $\langle Z \rangle$  est définie comme :

$$\langle Z \rangle = \frac{2n}{N}. \quad (3.4)$$

Mais cette coordinnce pourrait être moyennée sur un volume quelconque  $\neq V$ , si on s’intéressait par exemple aux hétérogénéités de coordinnce dans l’assemblage.

On peut également définir les coordinnces moyennes partielles  $\langle Z_X \rangle$  pour chaque espèce ( $X$ ) ayant  $n_{X,X}$  contacts entre les particules qui la composent et partageant  $n_{X,Y}$  contacts avec l’autre espèce ( $Y$ ) :

$$\langle Z_X \rangle = \frac{2n_{X,X} + n_{X,Y}}{N}. \quad (3.5)$$

Ce paramètre peut servir à signer les phénomènes de ségrégation entre espèces par exemple, ou bien, peut servir à caractériser une organisation particulière des populations de particules.

De façon générale, la coordinnce va donner une mesure moyenne de la connectivité du réseau de contacts ; plus sa valeur est forte, plus l’assemblage est dense (*close packing*), et inversement, plus elle est faible, plus l’assemblage est lâche (*loose packing*).

Chaque particule a besoin d’un certain nombre de contacts pour restreindre ses degrés de liberté de mouvement, de telle sorte que le système puisse atteindre un état d’équilibre statique. Si on considère l’équilibre mécanique d’un ensemble  $N$  de particules formant  $n$  contacts, il est possible de calculer une limite inférieure et supérieure de la coordinnce moyenne  $\langle Z \rangle$  pour que le système ne soit pas surdéterminé [150]. Dans un assemblage  $2D$  à l’équilibre statique, il y a  $2n$  forces à déterminer à l’aide de  $3N$  équations d’équilibre.

Pour que le système ne soit pas hyperstatique, le nombre d’équations ne doit pas dépasser le nombre de variables ce qui implique :

$$2n \geq 3N \rightarrow \langle \mathcal{Z} \rangle \geq 3. \quad (3.6)$$

Par ailleurs, les contraintes géométriques donnent  $n$  relations entre les  $2N$  coordonnées des particules (par exemple  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = 2(R_1 + R_2)$ ) et le nombre d'équations ne doit pas dépasser le nombre de variables :

$$n \leq 2N \rightarrow \mathcal{Z} \leq 4 \quad (3.7)$$

Finalement, nous obtenons un encadrement pour la coordinence moyenne des particules,  $3 \leq \langle \mathcal{Z} \rangle \leq 4$ , pour un assemblage qui n'est pas dans un état hyperstatique ; Dans le cas des assemblages qui nous concerne et du type de modélisations numériques utilisées, les conditions de pressions imposent une déformation compressive de l'assemblage et la friction n'est pas considérée ; le système passe dans un état hyperstatique, et l'encadrement n'est pas vérifié dans sa limite supérieure  $\langle \mathcal{Z} \rangle > 4$ .

Dans le cas où les forces tangentielles seraient considérées lors de la préparation, l'encadrement peut être vérifié [100] ; si, en plus les forces de contact tangentielles parviennent au seuil de frottement de Coulomb, dans ce cas la relation entre la force normale  $f_n$  et la force tangentielle  $f_t$  est donnée par  $f_t = \mu f_n$  ; ceci, constitue une détermination supplémentaire du système, qui augmente la borne inférieure de l'encadrement de la coordinence  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ .

La figure 3.2(a) montre la dépendance de la coordinence moyenne des particules  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ , à la déviation de rayon  $\delta_R$  des deux espèces qui caractérise le degré d'hétérogénéité de taille du système. Nous constatons que la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  décroît régulièrement avec l'augmentation de l'hétérogénéité de taille  $\delta_R$  ; elle passe d'une valeur maximale de 5.2 à 0.01% de déviation de rayon à une valeur minimale de 4.3 pour 10% de déviation de rayon dans l'intervalle considéré. On rappelle que ces valeurs de coordinence correspondent à un état d'équilibre statique pour des assemblages de particules sphériques bidimensionnelles, sans friction, compressées sous une pression de 10 MPa. On sait que la pression est à l'origine de l'augmentation de la coordinence moyenne par rapport à la limite sphères rigides, cependant, tous les échantillons numériques ont été préparés à la même pression  $p_0$ , et les valeurs obtenues sont particulièrement fortes surtout aux faibles déviations de rayons.

### Porosité et fraction solide

La porosité  $\phi$  d'un assemblage de particules est la fraction du volume de vide  $V_v$  sur le volume  $V$  de l'assemblage considéré ; par opposition, la fraction solide  $\phi_s$  représente la fraction du volume solide  $V_s$  dans le volume  $V$  de l'assemblage. La porosité et la fraction solide sont liées par la relation  $\phi = 1 - \phi_s$ , comme  $V = V_v + V_s$ .

Si  $N$  est le nombre de particules dans un assemblage de volume  $V$ , le volume solide total des particules non déformées s'écrit  $NV_p$  ; dans le cas de particules *déformables* (interpénétrables), à ce volume, il faut soustraire le volume correspondant à l'interpénétration des  $N$  particules au niveau des  $n$  contacts, soit  $V_i = \sum_{k=1}^n V_i^k$  ; le volume solide devient donc  $V_s = NV^{(p)} - V_i$ .

la porosité  $\phi$  est donc définie comme :

$$\phi = 1 - \phi_s = 1 - \frac{NV^{(p)} - V_i}{V} \quad (3.8)$$

Pour calculer le volume  $V_i$  à soustraire au volume total des particules  $NV^{(p)}$  afin de calculer le volume de la phase solide  $V_s$  et donc de corriger la fraction solide  $\phi_s$ , il faut calculer le volume de

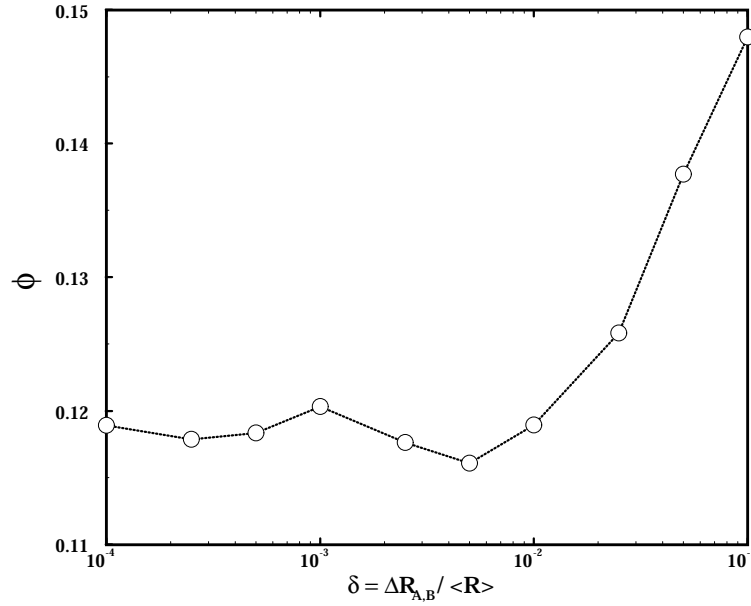


FIG. 3.3 – Evolution de la porosité  $\phi$  de l'assemblage en fonction de la déviation de rayon  $\Delta R$  : de 0.01% à 1% de déviation de rayon,  $\phi \approx cst \approx 0.115$  et au-delà jusque 10%,  $\phi$  augmente rapidement vers 0.15.

l'interpénétration mutuelle de deux particules ; à  $2D$ , on calcule la surface d'un segment de cercle, et à  $3D$  on calcule le volume d'un segment de sphère comme cela est illustré sur la figure 3.4.

On calcule la surface d'un segment de cercle  $S^{(c)}$  et le volume d'un segment de sphère (calotte sphérique)  $V^{(c)}$  comme :

$$\begin{cases} S_i \approx \frac{4}{3}w\sqrt{w(2R-w)}, & ; \\ V_i = \frac{1}{3}\pi w^2(3R-w), & . \end{cases} \quad (3.9)$$

La porosité d'un assemblage est à la fois un indicateur de son degré de déformation (voir au chapitre 4, l'évolution de la porosité avec la pression  $\phi(p)$  dans un agrégat granulaire tridimensionnel) mais peut également être une signature de l'arrangement des particules comme nous le montrons dans cette étude.

Dans cette étude, nous considérons la porosité *surfactive*, c'est-à-dire dans le plan de l'arrangement des sphères.

Nous observons sur la figure 3.3 que la porosité  $\phi$  croît globalement avec l'augmentation de l'hétérogénéité de taille  $\delta_R$ , mais que sur l'intervalle [0.01%; 1%] de déviation de rayon, la porosité reste constante à une valeur légèrement inférieure à 0.12 ; au-delà jusqu'à  $\delta_R = 10\%$ , la porosité croît rapidement pour atteindre la valeur de  $\approx 0.15$ .

La valeur maximum de la porosité à 10% de déviation de rayon est proche de la valeur de la porosité pour un assemblage bidimensionnel de type *Random Close Packing*, où  $\phi \approx 0.16$ . Comme tous les assemblages ont été préparés à la même pression  $p = 10 \text{ MPa}$ , les faibles valeurs de  $\phi$  aux petites hétérogénéités de taille doivent donc avoir pour origine une organisation particulière de l'assemblage de particules qui tend à densifier le système aux faibles déviations de rayons  $\delta_R$ .

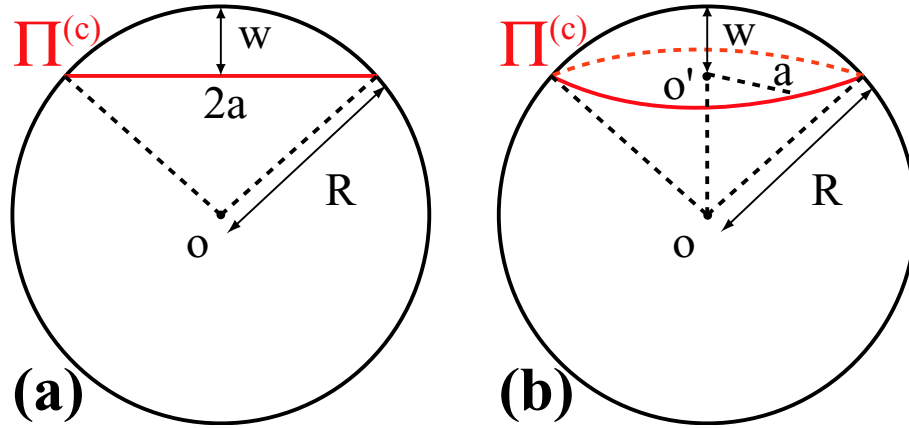


FIG. 3.4 – Calcul du *volume* d'interpénétration entre deux sphères partageant un contact défini par le plan  $\Pi^{(c)}$  contact ; Surface d'un segment de cercle et volume d'un segment de sphère en fonction de  $w/2$ .

### Carte de l'hétérogénéité de coordinnence

Les fortes valeurs de  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  aux faibles déviations de rayons s'expliquent, si on construit une carte de l'hétérogénéité de coordinnence dans les assemblages de particules ; on s'intéresse donc à la coordinnence de chaque particule  $\mathcal{Z}^{(p)}$  qui correspond au nombre de contacts que cette particule partage avec les particules dans son voisinage immédiat.

Sur la figure 3.5, pour chaque déviation de rayon  $\delta_R$ , on présente les assemblages de particules, où chaque particule est représentée par un cercle dont la couleur correspond à sa coordinnence ; ces cartes de coordinnence sont binaires : les particules de couleur rouge ont une coordinnence  $\mathcal{Z}^{(p)} < 6$  et celles de couleur noire  $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$ .

- (1) Aux faibles hétérogénéités de taille, on observe que les assemblages présentent des régions de tailles relativement importantes (plusieurs dizaines, voir quelques centaines de particules pour les plus grandes) où sont regroupées les particules de coordinnence  $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$  ; ces régions à forte coordinnence sont constituées à la fois de particules appartenant aux deux espèces (A) et (B). La fraction de ces particules sur le nombre total de particules dans l'assemblage, s'élève approximativement à 50%. Ces régions sont séparées par des *joints* d'épaisseur beaucoup plus faible, et composés de particules ayant des coordinnences  $\mathcal{Z}^{(p)} < 6$ .

On comprend maintenant l'origine des valeurs anormalement élevées de la coordinnence moyenne des assemblages aux faibles déviations de rayon  $\delta_R$ ,  $\langle \mathcal{Z} \rangle \approx 5$ , étant donné que une moitié des particules de l'assemblage ont une coordinnence  $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$ . Par ailleurs on constate, que les particules de forte coordinnence sont ordonnées les unes par rapport aux autres selon un arrangement de type *Hexagonal Compact* bidimensionnel.

- (2) Aux fortes hétérogénéités de taille, les assemblages sont très différents ; peu de particules ont une coordinnence  $\mathcal{Z} = 6$  (moins de 10%) et ces dernières sont relativement isolées les unes des autres. On ne retrouve pas de larges régions ordonnées *Hexagonal Compact* comme cela était le cas aux faibles hétérogénéités de taille.

Si on regarde la séquence complète des assemblages de  $\delta_R = 10^{-4}$  à  $\delta_R = 10^{-1}$ , on observe un *morcellement* progressif des régions ordonnées à forte coordinnence ; cette transition dans l'organisation des particules traduit bien la diminution régulière de la coordinnence moyenne de



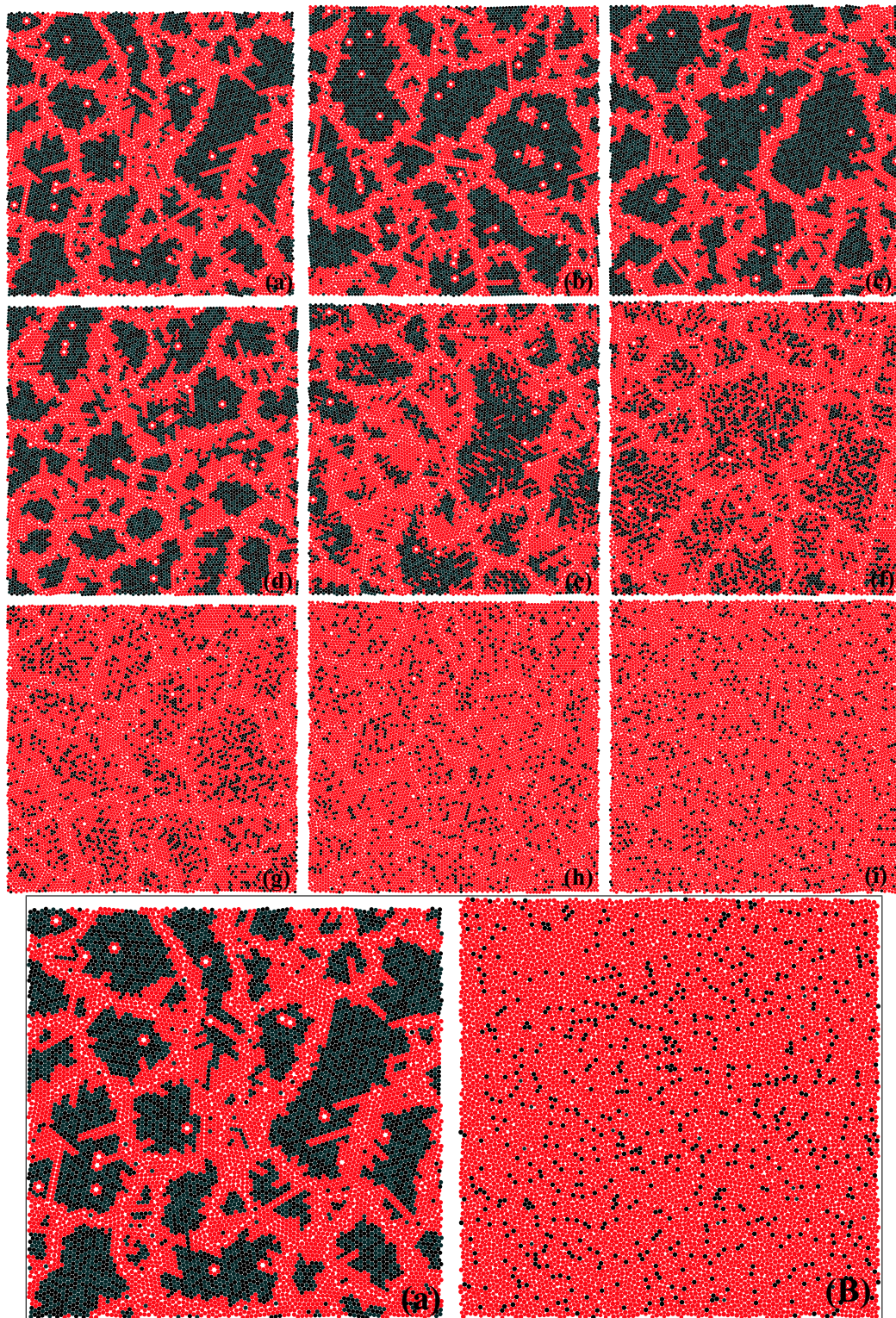


FIG. 3.5 – Carte "binaire" de la coordinnence des particules  $\mathcal{Z}^{(p)}$  : (en haut) pour des valeurs croissantes de déviation de rayon  $\delta_R$  : (a) 0.01%, (b) 0.025%, (c) 0.05%, (d) 0.1%, (e) 0.25%, (f) 0.5%, (g) 1%, (i) 2.5%, (j) 5%; (en bas), agrandissement pour les deux bornes de l'intervalle de déviation de rayon : (A) 0.01% et (B) 10%; sont représentées en noir les particules de  $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$  et en rouge celles de  $\mathcal{Z}^{(p)} < 6$ .

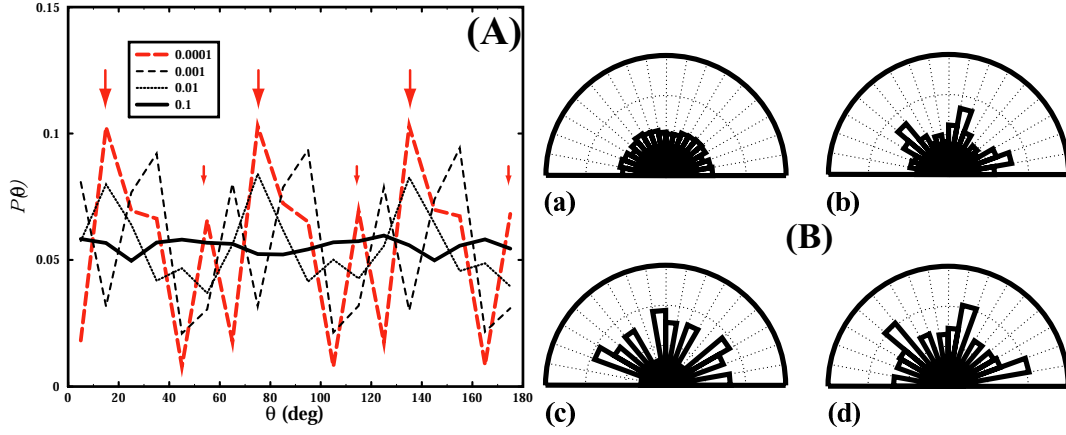


FIG. 3.6 – Distribution angulaire  $\mathcal{P}_\theta$  ( $\pi$ -périodique) des directions de contacts pour des  $\delta_R$  croissants : (a)  $10^{-1}$ , (b)  $10^{-2}$ , (c)  $10^{-3}$ , (d)  $10^{-4}$ ; (à gauche) représentation linéaire, (à droite) représentation polaire; pour les fortes déviations de rayons  $\delta_R$ , on observe une distribution relativement homogène et pour les faibles déviations, on observe plusieurs directions de contacts privilégiées  $\pi/3$ -périodiques qui sont la signature d'arrangements Hexagonaux Compacts locaux dans l'assemblage.

l'assemblage  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ , sur cet intervalle de déviation de rayon.

On sait que la porosité d'un assemblage de particules est fortement corrélée à l'arrangement des particules entre elles; plus le degré d'ordre est important, et plus la porosité diminue et globalement, nous avons vu que la porosité augmente avec la déviation de rayon mais qu'elle était constante sur l'intervalle  $\delta_R \in [10^{-4}; 10^{-2}]$ , contrairement à la coordinence moyenne de l'assemblage, qui elle diminue régulièrement.

A présent, nous allons caractériser de façon plus précise le degré d'ordre dans ces assemblages et pour ce faire, nous allons nous intéresser aux propriétés des réseaux de contacts.

### 3.4.2 Fabrique du réseau des contacts

#### Texture

Les caractéristiques géométriques du réseau des contacts sont quantifiables grâce à la définition du tenseur de fabrique  $\Phi_{ij}$  [134] [23] [114]; il s'agit d'un tenseur d'ordre 2 qui représente une statistique sur les directions de contact entre les particules. Il permet donc de rendre compte de la géométrie moyenne de l'arrangement des particules dans l'assemblage.

Le tenseur de fabrique est défini comme :

$$\bar{\Phi}_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n n_i^k n_j^k = \langle n_i n_j \rangle, \quad (3.10)$$

où  $\vec{n}$  est le vecteur de contact unitaire,  $n$  est le nombre total de contacts dans le volume  $V$  de l'assemblage.

Les valeurs propres  $\Phi_1$  et  $\Phi_2$  de ce tenseur nous permettent de calculer l'anisotropie  $a = \Phi_1 - \Phi_2$  du réseau, dont la valeur traduit l'existence d'une ou plusieurs directions de contact privilégiées. Les directions principales de ce tenseur nous donnent donc les directions privilégiées de contact, c'est-à-dire les directions d'anisotropies.



Nous avons calculé le tenseur de fabrique  $\bar{\Phi}$  pour l'ensemble de nos assemblages, pour s'assurer que l'anisotropie du réseau de contacts est faible, ce qui est effectivement le cas, étant donné le protocole de préparation numérique utilisé pour obtenir ces assemblages ; il permet en effet de réaliser une compression isotrope  $\dot{\epsilon}_{11} = \dot{\epsilon}_{22} = \dot{\epsilon}$  et assure un état final d'équilibre statique tel que  $p = \sigma_{11} = \sigma_{22}$  ; les valeurs des anisotropies  $a$  mesurées par le tenseur de fabrique sont de l'ordre de  $10^{-3} - 10^{-2}$ , ce qui est relativement faible en accord avec les valeurs d'anisotropie calculées à partir du tenseur des contraintes.

Contrairement à d'autres modes de préparation (par exemple de type *pluviation* [146], où bien de type *point source*), et compte tenu de la forme circulaire des particules, dans nos préparations aux fortes déviations de rayon, la direction des contacts est relativement uniforme d'un point de vue macroscopique, comme on peut le voir sur la figure 3.6. La fonction de distribution angulaire  $\mathcal{P}_\theta$  donne la probabilité d'avoir un contact dans une direction  $\theta$ .

En allant vers les faibles déviations de rayon, on constate que la distribution des directions de contact n'est plus uniforme ; en effet sur 180 degrés, on observe des groupes de directions de contact plus probables que les autres ( $\pi/3$  périodiques) ; on peut en observer plusieurs pour un même assemblage. C'est typiquement la signature d'arrangements locaux de type *Hexagonal Compact* dans les assemblages ; on a donc des directions privilégiées  $0 + \theta$ ,  $60 + \theta$  et  $120 + \theta$  ; le fait d'observer plus d'une direction privilégiée  $\pi/3$  périodique dans un assemblage laisse supposer que les différentes régions ne sont pas orientées de façon cohérentes entre elles.

## Réseaux de contacts

On représente sur la figure 3.7, le réseau de contacts des assemblages de différentes hétérogénéités de taille, qui nous fournit un aperçu de la répartition de la densité de contact dans l'échantillon.

- Aux faibles hétérogénéités de taille, on observe des domaines ayant des densités de contact élevées et d'autres régions où la densité de contact est plus faible. Cette répartition très hétérogène de la densité de contact correspond exactement aux régions identifiées par la carte de coordinence des particules (figure 3.5) ; les zones à forte densité de contact correspondent aux régions où l'on trouve les particules à coordinence élevée ( $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$ ), et on remarque clairement sur ces représentations du réseau de contacts la nature ordonnée *Hexagonal Compact* et dense de ces arrangements locaux. Les orientations de ces différents *clusters* présents dans un même assemblage ne semblent pas cohérentes les unes avec les autres, comme la distribution des orientations de contact  $\mathcal{P}(\theta)$  le laissait supposer. Par ailleurs, la nature lâche des *joints* est également évidente et on constate qu'ils ont une faible épaisseur par rapport à l'extension des régions ordonnées ; leur épaisseur est typiquement de l'ordre de quelques diamètres de particules.
- Aux hétérogénéités de taille plus importante, la densité de contact devient beaucoup plus homogène, avec localement la présence de défauts répartis également de façon homogène dans le réseau ; on remarque que ces *défauts* sont à la base de la structure des joints que l'on observe dans les assemblages à faibles déviations de rayon.

### 3.4.3 Paramètres de structure et d'ordre

Nous avons vu que les représentations visuelles de la coordinence  $\mathcal{Z}^{(p)}$  des particules et du réseau de contacts de l'assemblage  $\vec{n}^{(c)}$ , associées à l'étude de l'évolution de la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et de la porosité  $\phi$  de l'assemblage avec l'hétérogénéité de taille  $\delta_R$ , permettait de tirer un certain nombre d'informations sur les propriétés géométriques des arrangements

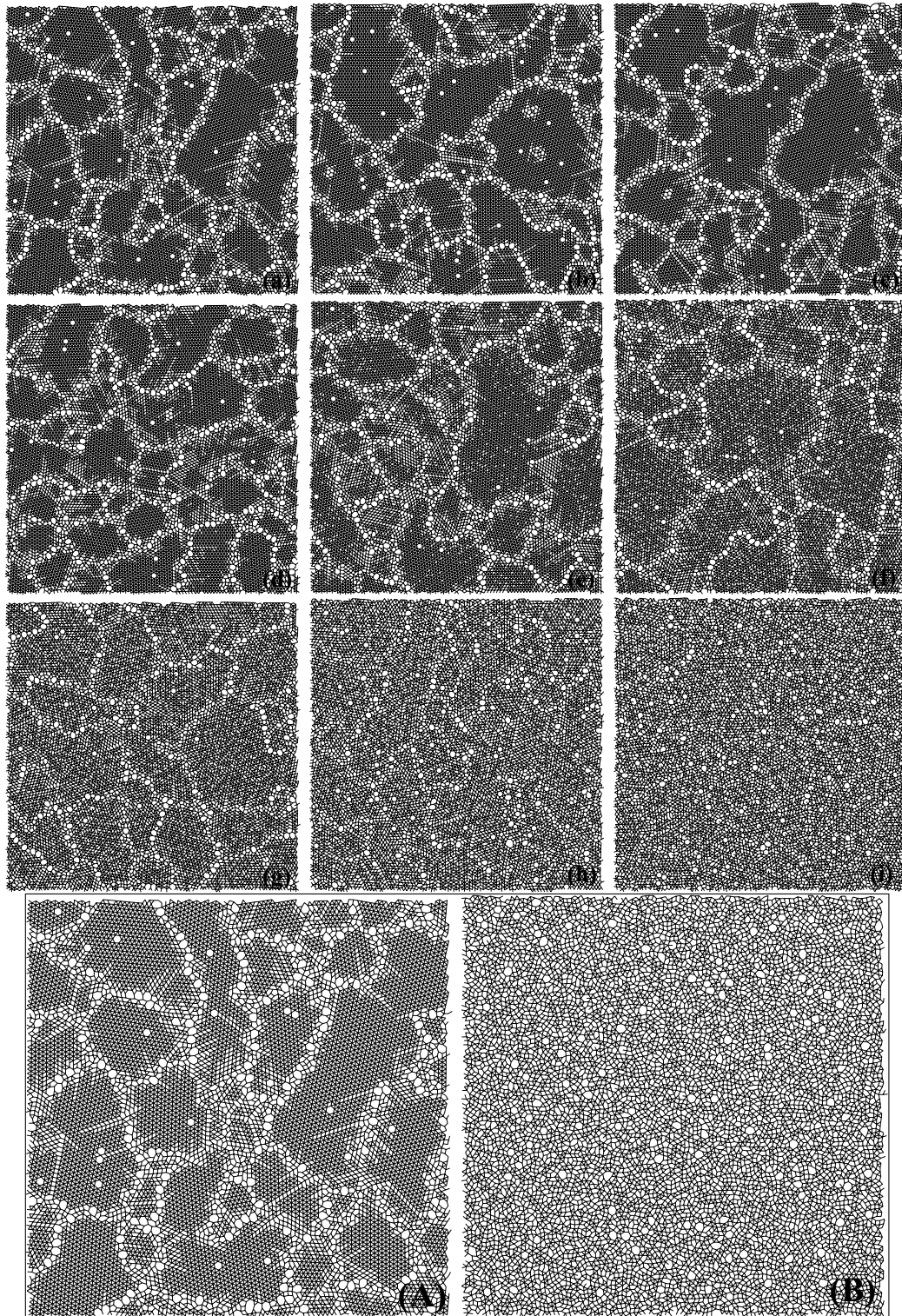


FIG. 3.7 – Représentation des réseaux de contacts pour des valeurs croissantes de la déviation de rayon  $\delta_R$  : (en haut) (a) 0.01%, (b) 0.025%, (c) 0.05%, (d) 0.1%, (e) 0.25%, (f) 0.5%, (g) 1%, (h) 2.5%, (i) 5% ; (en bas), agrandissement pour les deux bornes de l'intervalle de déviation de rayon : (A) 0.01% et (B) 10% ; les directions de contact sont données par les segments joignant les centres des particules.

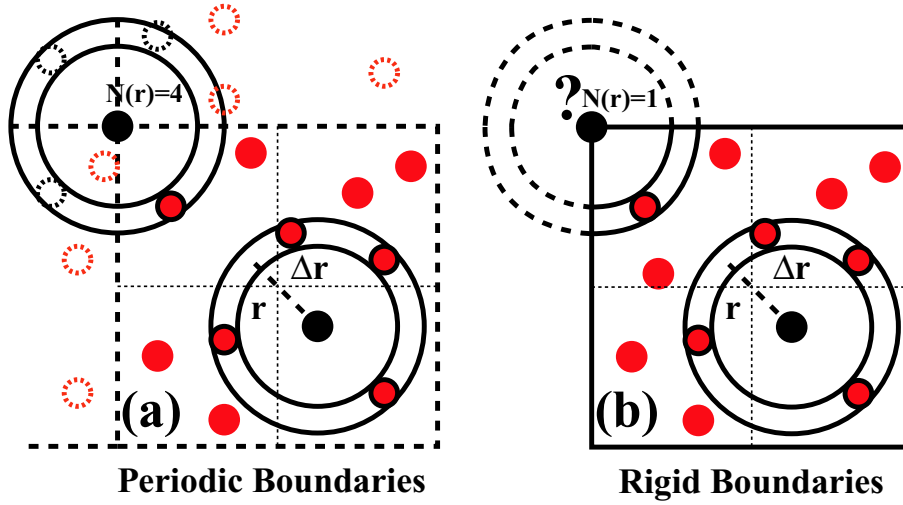


FIG. 3.8 – Normalisation de la fonction de distribution de paires  $g(r)$  : (a) en conditions de frontières périodiques, quelque soit la particule ( $p$ ) et la distance  $r < \frac{L}{M}$ ,  $N_\delta(r)$  est normalisé par  $S(r)$ ; (b) en conditions de frontières rigides, pour les particules proches des frontières et pour les distances  $r$  croissantes,  $N_\delta(r)$  doit être normalisé par  $S^{(p)}(r)$ .

granulaires.

Nous souhaiterions maintenant quantifier ces observations sur la structure des arrangements, et quantifier le degré d'organisation dans nos systèmes de particules. C'est ce que nous allons faire à présent, en calculant (1) la fonction de distribution de paires  $g(r)$  et (2) des paramètres d'ordre ( $\Phi_6$ ) basés sur la cohérence d'orientation des contacts dans les assemblages, par rapport à un assemblage de référence parfaitement ordonné (par exemple *Hexagonal Compacte* ou *Cubique* en 2D et *Cubique Faces Centrées* en 3D).

### Fonction de distribution de paires

La structure d'un assemblage de particules monodisperse ou légèrement polydisperse, peut être caractérisée par un jeu de fonctions de distribution des positions des particules  $r^{(p)}$ . La plus simple d'entre elles, est la fonction de distribution de paires  $g(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ , (où  $g(\vec{r})$  plus simplement) [2] [127].

Cette fonction fournit la probabilité de trouver une paire de particules séparées par la distance  $r$  par rapport à la probabilité que l'on aurait pour une distribution de positions de particules complètement aléatoire à la même densité. Une définition de  $g(r)$  qui réalise une moyenne d'ensemble sur les  $N^2$  paires de particules présentes dans un volume  $V$  est :

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle, \quad (3.11)$$

Pour l'évaluation numérique de  $g(r)$  (voir figure 3.8(a)), la  $\delta$ -fonction de la définition est remplacée par une fonction non nulle (de valeur unité) sur un très petit intervalle  $\Delta r$ .

- Dans le cas où les frontières du système sont périodiques, la fonction  $g(r)$  peut être calculée sur des distances  $r$  aussi grandes que  $r = \min\{L_1, L_2, L_3\}/2$  (où  $\vec{L}$  est la dimension du système) et on normalise la fonction comme cela est indiqué dans l'équation 3.11, c'est-à-dire selon :

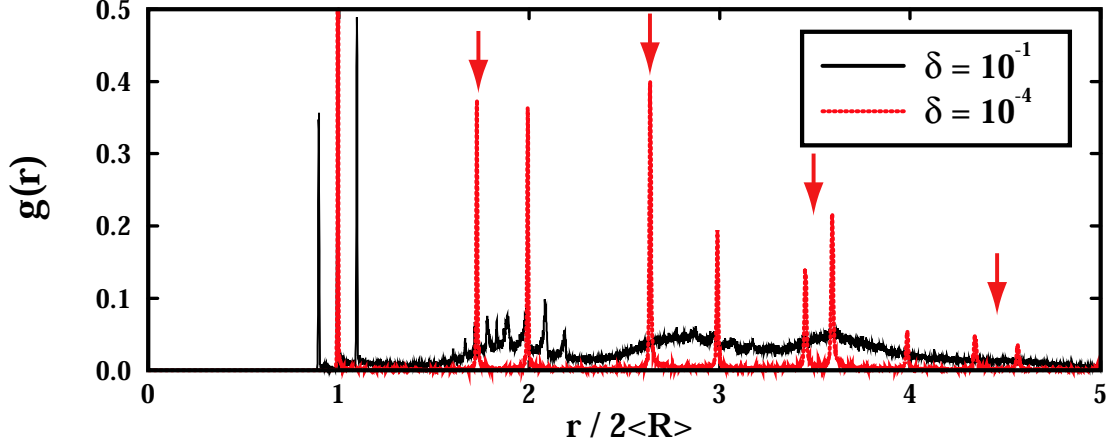


FIG. 3.9 – (a) fonctions de distribution de paires  $g(r)$  calculées pour deux systèmes préparés avec un mélange bidisperse de particules, de déviation de rayon  $\delta_R$  minimale ( $10^{-4}$ ) (en rouge) et maximale ( $10^{-1}$ ) (en noir) ; les distances  $r$  sont normalisées par le diamètre moyen des particules soit  $2\langle R \rangle$  ; à forte déviation, on observe des corrélations seulement à courtes distances, et à faible déviation, on observe des pics de corrélations aux distances multiples de  $\langle R \rangle$  et aux distances intermédiaires caractéristiques d'un réseau *Hexagonal Compact* ( $r = 2\sqrt{3}R$ ,  $r = 2\sqrt{7}R\dots$ ).

$$\begin{cases} g(r) = \frac{SN_\delta(r)}{\pi N^2 r \Delta r}, & \text{à 2D;} \\ g(r) = \frac{VN_\delta(r)}{2\pi N^2 r^2 \Delta r}, & \text{à 3D.} \end{cases} \quad (3.12)$$

où  $N_\delta(r)$  est le nombre total de particules interceptées par toutes les particules du système pour une distance  $r \pm \Delta r$  donnée. On normalise alors par la surface  $\Delta S(r)$  ou le volume  $\Delta V(r)$  de la tranche considérée.

- Dans le cas où les frontières ne seraient pas périodiques (frontières rigides par exemple, où positions de particules dans un volume  $V$  issues d'une mesure expérimentale), la normalisation de la fonction  $g(r)$  est plus délicate. Dans ce cas, pour chaque particule ( $p$ ) et pour chaque distance  $r \pm \Delta r$ , il faut calculer le volume d'intersection  $V_I^{(p)}(r)$  entre le volume de la tranche  $V_T(r)^{PBC}$  tel qu'il serait pour des conditions de frontières périodiques et le volume  $V$  du système de particules.

L'intégration analytique du volume  $V_I^{(p)}(r)$  peut se révéler fastidieuse ; il est alors préférable de réaliser une intégration numérique de ce volume par la méthode de Monte-Carlo : en tirant des positions aléatoires  $\vec{r}_{MC}$  dans le volume  $V$  du système, sur  $K$  tirages,  $K_I^{(p)}(r)$  points tomberont dans le Volume d'intersection  $V_I^{(p)}(r)$  et  $K$  points tomberont dans le volume  $V$  du système. Le volume de normalisation pour chaque particule ( $p$ ) et chaque distance  $r \pm \Delta r$  devient  $V_I^{(p)}(r) = \frac{K_I^{(p)}(r)}{K} V$ .

Nous avons calculé les fonctions de distribution de paires bidimensionnelles  $g(r)$  pour nos assemblages de différentes hétérogénéités de taille  $\delta_R$ , et nous présentons sur la figure 3.9 les résultats de ces calculs des fonctions de distribution de paires  $g(r)$  pour les bornes de l'intervalle de déviations de rayon  $\delta R$  (par souci de lisibilité).

Chaque fonction  $g(r)$  de ces différents systèmes présentent un ou plusieurs premiers pics autour de la distance  $r = 2\langle R \rangle$ . Aux faibles hétérogénéités de taille, on observe qu'un seul pic, alors qu'aux fortes hétérogénéités, on observe distinctement trois pics. En réalité, ces premiers pics

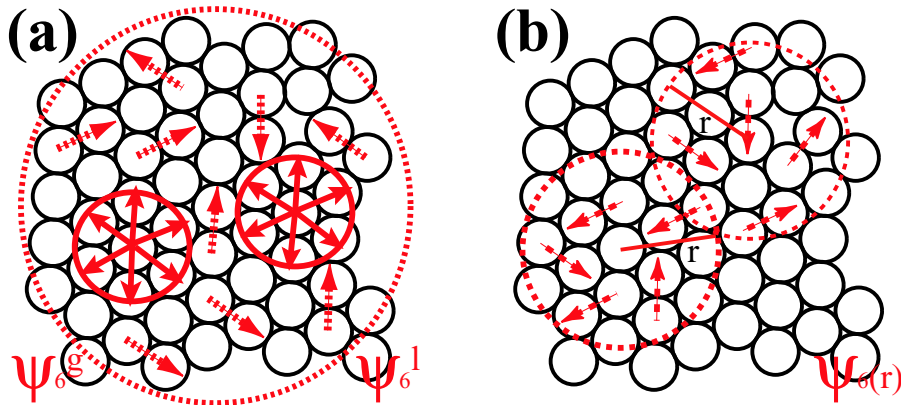


FIG. 3.10 – Paramètres et fonction d'ordre d'orientation des contacts : (à gauche) paramètres issus de la moyenne globale sur tous les contacts (en traits pointillés) et de la moyenne locale sur les voisins immédiats (en traits pleins) ; (à droite), fonction radiale issue de la moyenne sur une distance  $r$  (en traits pointillés).

de  $g(r)$  correspondent aux distances des premiers voisins de chaque particule. Lorsque  $\delta_R$  augmente, la résolution du calcul  $\Delta r$  permet d'observer les coordinences partielles  $Z_{X,Y}$  des espèces (voir équations 3.5) : petites particules entre elles ( $A, A$ ) pour le premier pic, grosses particules entre elles ( $B, B$ ) pour le dernier pic, et petites et grosses particules pour le pic intermédiaire ( $A, B$ ) (celui qui a la plus grande amplitude) ; si on augmentait la résolution (diminution de  $\Delta_R$ , on observerait également 3 premiers pics aux déviations de rayons plus importantes). On attire l'attention sur le fait, que les fonctions de distribution de paires  $g(r)$  présentées sur la figure 3.9 ne sont pas normalisées correctement, afin de pouvoir les comparer.

- Aux petites distances,  $g(r)$  pourrait servir à mettre en évidence un phénomène de ségrégation des espèces de particules dans les assemblages ; dans ce cas l'amplitude du pic intermédiaire deviendrait très faible par rapport aux amplitudes des deux autres pics. Ici ce n'est pas ce qu'on observe ; dans les régions ordonnées, on observe des particules issues des deux populations  $A$  et  $B$ .
- Alors que des pics d'amplitudes décroissantes sont encore observés aux grandes distances (sur quelques  $\langle D \rangle$ ) pour les assemblages à petit  $\delta_R$ , aucun pic n'est observé pour les assemblages à grand  $\delta_R$  ; on observe plutôt des bosses d'amplitudes décroissantes dont les sommets sont progressivement décalés, par rapport aux distances normalisées au diamètre moyen des particules.

Les pics de  $g(r)$  à grande distance traduisent une forte corrélation des positions des particules, alors que les bosses signifient la perte de cohérence des positions des particules entre elles sur des distances de quelques diamètres. La fonction de distribution de paires  $g(r)$  peut donc nous fournir des informations sur la présence d'une composante de réseau cristallin dans les assemblages, par le repérage des distances des pics de corrélation ; les distances à faible  $\delta_R$  sont caractéristiques d'un réseau *Hexagonal Compact* : on trouve les distances multiples du diamètre moyen ( $\langle D \rangle$   $2\langle D \rangle$   $3\langle D \rangle$  ...), mais également les distances caractéristiques intermédiaires d'un tel réseau ( $2\sqrt{3}R$   $2\sqrt{7}R$ ).

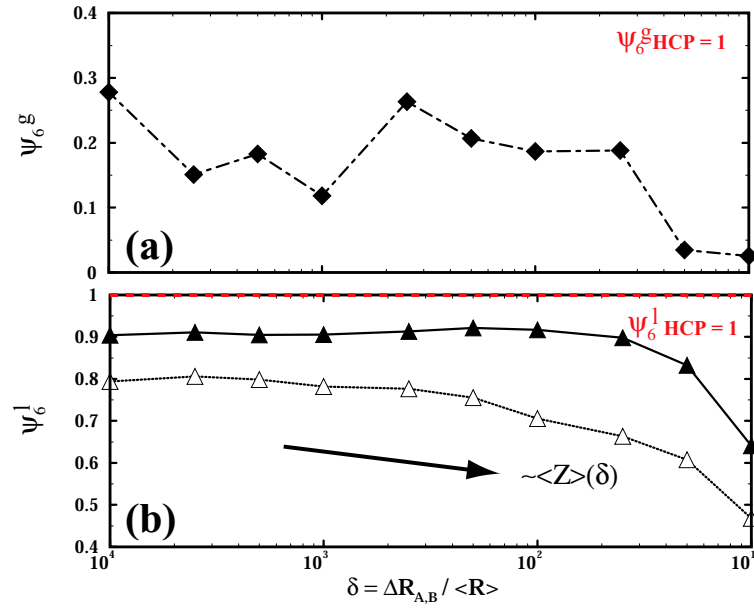


FIG. 3.11 – Evolution des paramètres d'ordre d'orientation de contact globaux  $\Psi_6^g$  (en haut) et locaux  $\Psi_6^l$  (en bas) en fonction de la déviation de rayon  $\delta_R$ ; le paramètre global est insatisfaisant dans la mesure où il n'est pas corrélé avec la déviation de rayon (c'est-à-dire, le degré d'ordre); le paramètre local lui, est bien corrélé avec  $\delta_R$ : on présente deux versions de ce paramètre avec des sensibilités différentes à l'hétérogénéité de taille  $\delta_R$ .

### Paramètres et Fonctions d'ordre d'orientation des contacts

Une fois qu'on a repéré la présence d'une composante de réseau cristallin dans un assemblage, il peut être intéressant d'avoir un paramètre pour quantifier le degré d'ordre correspondant et mesurer l'importance de cette composante cristalline; nous avons donc utilisé des paramètres scalaires d'ordre orientationnel, qui vont mesurer la cohérence des directions de contacts dans les assemblages, par rapport au réseau cristallin *Hexagonal Compact*, c'est-à-dire que nous allons mesurer le degré de symétrie d'ordre 6 [82] [151] [152].

**Paramètre global  $\Psi_6^g$**  Cette mesure du degré d'ordre peut être définie soit globalement, soit localement. Au niveau le plus simple, le paramètre d'ordre orientationnel global  $\Psi_6^g$  peut être défini comme :

$$\Psi_6^g = \frac{1}{n} \left| \sum_{j=1}^n e^{6i\theta_{ij}} \right|, \quad (3.13)$$

où  $j$  parcourt l'ensemble des  $n$  contacts du système, et  $\theta$  est l'angle que forme le vecteur unité de contact  $\vec{n}^{(c)}$  avec un axe de référence. La moyenne des directions de contact est donc réalisée sur les  $n$  contacts à travers la fonction  $e^{6i\theta}$  qui mesure la cohérence, et le module  $\Psi_6^g$  est ensuite calculé.

Ce paramètre d'ordre sert à quantifier la cohérence de la symétrie d'ordre 6 dans le système, et pour un réseau *Hexagonal Compact* parfait, on aurait  $\Psi_6^g = 1$ .

Cependant, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.11, le paramètre d'ordre orientationnel global  $\Psi_6^g$  n'est pas très bien corrélé avec la déviation de rayon  $\delta_R$ , même si on observe une



tendance générale, avec la plus forte valeur à faible  $\delta_r$  et les plus faibles valeurs aux grands  $\delta_R$ . Dans la figure 3.7 nous avons vu que le degré d'organisation des particules dans ces assemblages semble être bien corrélé avec  $\delta_R$ ; il y a donc un problème avec ce paramètre, qui ne quantifie pas correctement la composante de réseau *Hexagonal Compact* dans les assemblages.

En fait, dans un assemblage, même si la majorité des particules appartiennent à des régions ordonnées *Hexagonal Compact*, le paramètre d'ordre d'orientation de contact global  $\Psi_6^g$ , peut avoir une faible valeur; ceci est dû au fait que ces régions ordonnées ne sont pas forcément orientées de façon cohérente les unes par rapport aux autres, et comme la moyenne est réalisée de façon globale, la cohérence locale peut très bien ne plus apparaître dans la valeur finale de  $\Psi_6^g$ ; l'information est perdue lorsque l'on effectue la moyenne globalement (voir équation 3.13), d'où l'idée d'effectuer la moyenne uniquement sur le premier voisinage de chaque sphère; on définit alors le paramètre localement.

**Paramètre local** Afin de mesurer le degré d'ordre dans nos assemblages, nous allons utiliser le paramètre d'ordre d'orientation de contact dans sa version locale qui peut être défini selon :

$$\Psi_6^l = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{n_j} \left| \sum_{k=1}^{n_j} e^{6i\theta_{ij}} \right|, \quad (3.14)$$

où comme :

$$\Psi_6^l = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{n_{HCP}} \left| \sum_{k=1}^{n_j} e^{6i\theta_{ij}} \right|, \quad (3.15)$$

où  $j$  parcourt l'ensemble des  $N$  particules du système,  $k$  parcourt l'ensemble des  $n_j$  particules en contact avec la particule  $j$  et  $\theta$  est l'angle que forme le vecteur unité de contact  $\vec{n}_{jk}$  entre les particules  $j$  et  $k$  avec un axe de référence.

La moyenne des directions de contacts calculée à travers la fonction  $e^{6i\theta}$  est maintenant effectuée uniquement sur les particules immédiatement voisines (on moyenne alors soit sur les  $n_j$  contacts de la particule  $j$ , soit sur  $n_{HCP} = 6$  caractéristique d'un réseau *Hexagonal Compact*); un module est alors calculé pour chaque particule, puis on moyenne l'ensemble de ces  $N$  modules pour obtenir la valeur de  $\Psi_6^l$ .

L'évolution de ces deux nouveaux paramètres avec l'hétérogénéité de taille  $\delta_R$  est présentée en figure 3.11; les deux paramètres locaux sont relativement bien corrélés avec le degré d'ordre dans les assemblages. On constate que le second paramètre (celui défini avec  $n^{(p)} = n_{HCP} = 6$ ) est plus sensible que le premier à la déviation de rayon  $\delta_R$ , dans la mesure où il y est supposé un nombre de 6 contacts par particule ( $\langle \mathcal{Z}_{HCP} \rangle = 6$ ), et pas le nombre réel de contacts; par conséquent, ce deuxième paramètre ne prend pas uniquement en compte le phénomène de décohérence des directions des clusters, mais il inclut également la déviation de coordinence des particules  $\mathcal{Z}^{(p)}(\delta_R)$  par rapport au réseau *Hexagonal Compact*, ce qui tend à le rendre plus sensible. On a vu sur la figure 3.2 que  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  était une fonction décroissante monotone de  $\delta_R$ .

Le paramètre d'ordre local  $\Psi_6^l$  est donc bien adapté à la quantification du degré d'ordre, c'est-à-dire de la composante cristalline dans l'assemblage alors que le paramètre global  $\Psi_6^g$  lui ne l'est pas, du fait de la décohérence des orientations des régions ordonnées, et ce sont les *joints de clusters* qui absorbent cette décohérence des orientations.

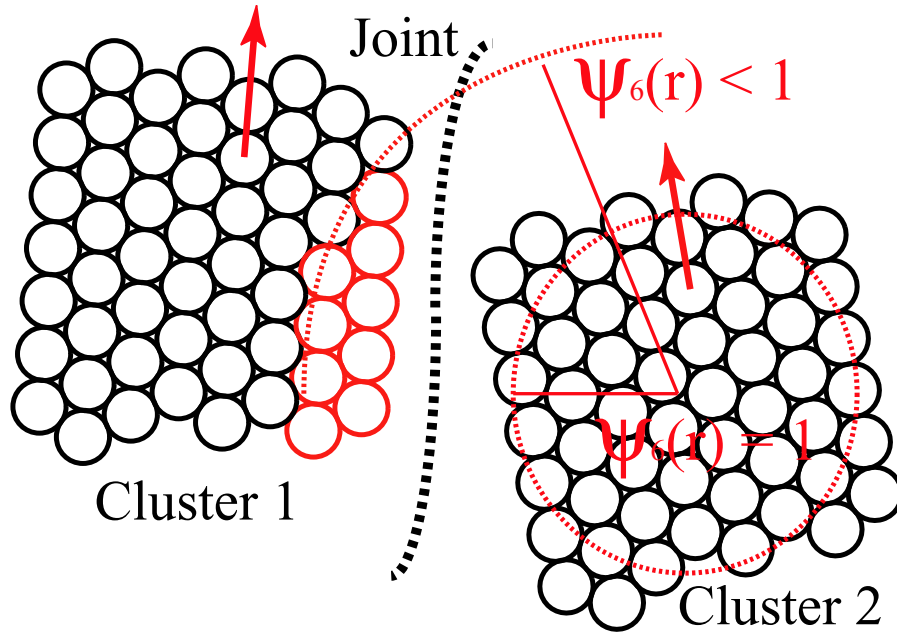


FIG. 3.12 – Mesure de l'ordre d'orientation des contacts par la fonction  $\Psi_6(r)$ ; aux faibles distances, la fonction vaut 1 car chaque *cluster* mesure sa propre cohérence; au delà d'une taille moyenne de ces régions ordonnées, la fonction décroît car elle mesure la décohérence des orientations des *clusters* entre eux.

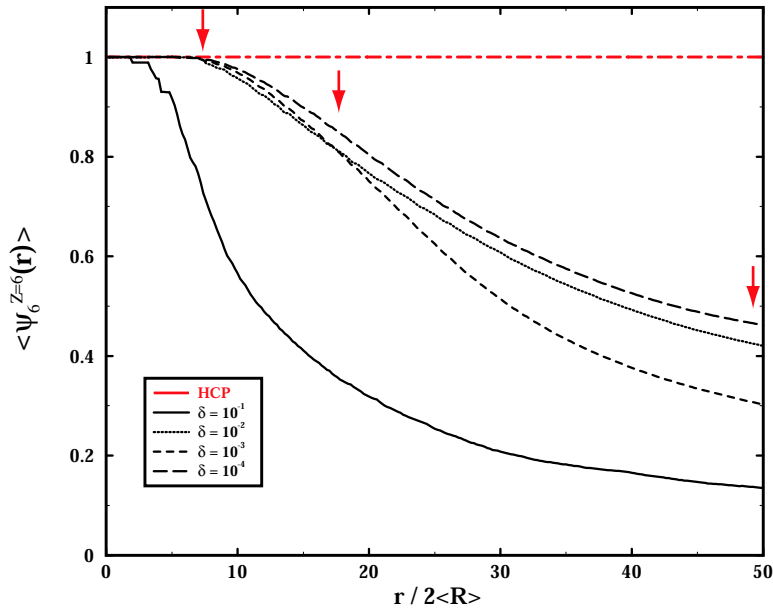


FIG. 3.13 – Fonctions d'ordre d'orientation des contacts  $\Psi_6(r)$  pour des déviations de rayon  $\delta_R$  croissantes; aux faibles  $\delta_R$ , la décroissance de la fonction mesure la taille moyenne des régions ordonnées *Hexagonal Compact*; un rayon moyen  $\langle R_{\delta_R} \rangle$  de ces régions peut être mesuré; il vaut de 6 à 8 tailles de particules aux faibles  $\delta_R$ ; à partir d'une distance de  $\approx 18$  tailles de particules, la décohérence l'emporte et la fonction de peut plus quantifier correctement le degré d'ordre par rapport à  $\delta_R$ ; c'est la transition entre  $\Psi_6^l$  et  $\Psi_6^g$ .

### Fonction d'ordre d'orientation des contacts radiale

Précédemment, nous avons quantifié le degré d'ordre dans les assemblages granulaires, résultant de la présence de régions ordonnées *Hexagonal Compact*. Nous souhaitons maintenant caractériser la géométrie de ces régions en calculant leur extension spatiale par un rayon moyen.

Nous avons donc défini une fonction  $\Psi_6(r)$  basée sur le paramètre d'ordre d'orientation de contact  $\Phi_6$ , et nous allons nous servir de la décohérence des orientations des régions ordonnées *Hexagonales Compactes*, pour calculer cette taille moyenne. Cette fonction prend exclusivement en considération les particules de coordinence  $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$ , c'est-à-dire les particules appartenant aux régions ordonnées ( $\Psi_6(r) = \Psi_6^{HCP}(r)$ ); les autres particules ne jouent aucun rôle dans la valeur de cette fonction.

Nous définissons la fonction  $\Psi_6(r)$  comme :

$$\Psi_6(r) = \frac{1}{N^{Z=6}} \sum_{j=1}^{N^{Z=6}} \left| \frac{1}{n_j(r)} \sum_{k=1}^{n_j(r)} e^{6i\theta_{jk}} \right|, \quad (3.16)$$

où  $N^{Z=6}$  est le nombre de particules de coordinence  $\mathcal{Z} = 6$  dans le système,  $j$  parcourt l'ensemble de ces particules,  $n_j(r)$  est le nombre de contacts présents dans un voisinage circulaire de distance  $r$  autour de la particule  $j$ .

Pour une distance  $r$  donnée, on réalise pour chaque particule ( $p$ ) la moyenne des directions de contacts à travers la fonction  $e^{6i\theta}$  sur une distance  $r$  de  $\vec{r}^{(p)}$  (voir figure 3.11), puis on en calcule le module; ensuite, on moyenne l'ensemble de ces modules sur les  $N^{Z=6}$  particules de l'assemblage.

Lorsque la distance  $r$  sur laquelle est réalisée la moyenne est inférieure à la taille d'une région *Hexagonal Compact*, alors la fonction d'ordre  $\Phi_6(r) = \Psi_6^{HCP}(r) = 1$ ; par contre lorsque la distance  $r$  devient plus importante que la taille moyenne d'une telle région, alors  $\Psi_6(r)$  commence à décroître.

Nous avons calculé cette fonction pour l'ensemble des assemblages de particules d'hétérogénéité de taille croissante et sur des distances n'excédant pas  $\max\{L_1, L_2\}/2$ , où  $\vec{L}$  est la dimension du système (les conditions de frontières périodiques imposent cette distance limite); les résultats pour  $\Phi_6(r)$  sont présentés sur la figure 3.13.

Aux faibles hétérogénéités de taille,  $\delta_R \in [10^{-4}; 10^{-2}]$ , la fonction  $\Psi_6(r)$  conserve une valeur très proche de 1 sur quelques tailles de particules,  $\approx 7$  à  $8 \langle D \rangle$ ; pour des distances supérieures, cette fonction décroît. Aux fortes hétérogénéités de taille, la fonction  $\Phi_6(r)$  commence à décroître aux très faibles distances,  $\approx 2 \langle D \rangle$ , car les régions ordonnées sont devenues quasiment inexistantes dans les assemblages.

La fonction d'ordre  $\Psi_6^{HCP}(r)$  que nous avons définie nous donne donc des informations sur la taille moyenne des régions *Hexagonales Compactes*; cette information était plus difficilement accessible par la fonction de distribution de paire  $g(r)$ , le repérage des pics de corrélations devenant plus difficile à mesure que leur amplitude décroît avec la distance; aux grandes distances, le signal de la composante cristalline devient comparable au signal moyen. La fonction  $\Psi_6(r)$  est donc beaucoup plus intéressante de ce point de vue, car l'initiation de sa décroissance permet d'avoir accès immédiatement à cette information.

### 3.5 La réponse mécanique des mélanges bidisperses

Précédemment, nous avons mené une étude sur l'évolution des propriétés géométriques des assemblages bidisperses de particules avec l'hétérogénéité de taille croissante; désormais, nous

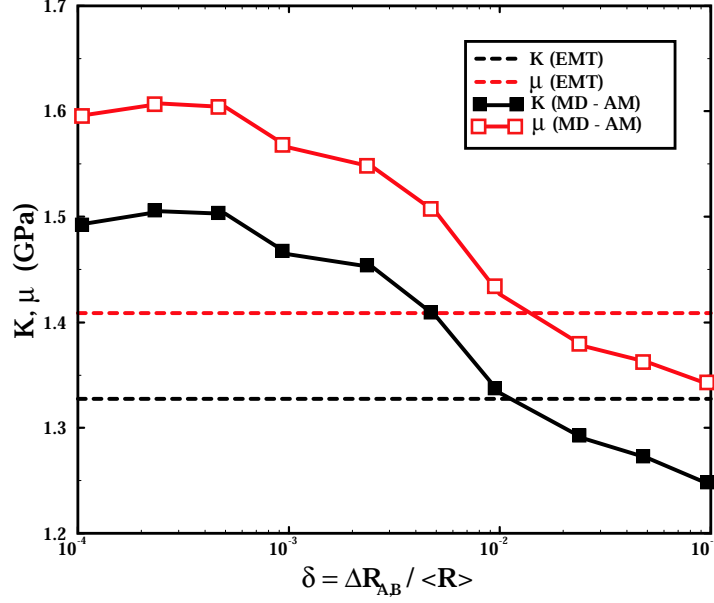


FIG. 3.14 – Evolution des modules élastiques  $K$  (module d'incompressibilité, en noir) et  $\mu$  (module de cisaillement, en rouge) en fonction de la déviation de rayon  $\delta_R$ ; pour le calcul des modules dans les simulations, l'approximation affine a été utilisée (et la relaxation consécutive a été interdite); pour le calcul des modules avec la Théorie de Milieu Effectif (voir Annexe A, chapitre 4), les valeurs  $\langle \mathcal{Z} \rangle = 4.3$  et  $\phi_s = 0.85$  ont été utilisées pour être constantes avec les valeurs correspondantes à  $\delta_R = 10^{-1}$ ; lorsque la déviation de rayon augmente, les modules élastiques diminuent ( $\approx 10\% - 15\%$  pour  $K$  et  $\mu$ ).

allons nous intéresser à l'évolution de leurs propriétés mécaniques. Si l'on considère des assemblages avec des textures aussi différentes que celles présentées en figure 3.7, il est légitime de penser que ces assemblages auront très probablement des réponses mécaniques différentes; c'est ce que nous allons montrer en calculant dans un premier temps les modules élastiques effectifs de ces différents assemblages.

### 3.5.1 Modules élastiques effectifs

Nous calculons numériquement les modules élastiques effectifs des assemblages : le module d'incompressibilité  $K$  et le module de cisaillement  $\mu$ . Dans un premier temps, il nous faut restaurer la composante transversale de la force de contact  $f_t$  car les assemblages ont été préparés sans friction  $k_t = 0$ ; comme les systèmes sont à un état d'équilibre statique, les vitesses relatives entre les particules sont quasi-nulles  $\dot{x}^{(c)} \approx 0$  (dans la limite de la précision numérique); de ce fait l'introduction des forces transversales ne modifie pas cet équilibre, puisque  $\Delta f_t^{(c)} \propto \Delta s$  et  $\Delta s = \dot{x}_t^{(c)} \Delta t$ .

Nous appliquons ensuite une déformation infinitésimale (aussi petite que la précision numérique le permet),  $\Delta \epsilon_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij} \Delta t$ , et sous l'hypothèse d'homogénéité du champ de déplacement à toutes les échelles, nous appliquons à chaque particule la déformation macroscopique, c'est-à-dire  $u_i = \epsilon_{ij} x_j$ ; nous faisons l'hypothèse de déformation affine de l'assemblage; nous mesurons alors la réponse de l'assemblage  $\Delta \bar{\sigma}$  dans le régime linéaire, sans permettre la relaxation des particules.

Le module de cisaillement  $\mu$  est calculé à partir d'un test biaxial ( $\Delta \epsilon_{11} = -\Delta \epsilon_{22} = \Delta \epsilon$ ) et le module d'incompressibilité  $K$  est obtenu à partir d'une compression isotrope ( $\Delta \epsilon_{11} = \Delta \epsilon_{22} =$

$\Delta\epsilon$ ), ou bien à partir d'un test uniaxial ( $\Delta\epsilon_{11} = \Delta\epsilon, \Delta\epsilon_{22} = 0$ ) connaissant préalablement  $\mu$ .

Les contraintes  $\bar{\sigma}$  sont déterminées à partir des forces de contact des particules (voir la formulation au Chapitre 2) et les déformations  $\bar{\epsilon}$  sont imposées aux systèmes (déformation affine en conditions de frontières périodiques) en définissant les taux de déformations  $\bar{\dot{\epsilon}}$ . On se référera au chapitre 4, pour le détail des relations permettant de calculer les modules élastiques  $K$  et  $\mu$  à partir des déformations  $\bar{\epsilon}$  imposées et des contraintes  $\bar{\sigma}$  mesurées.

Sur la figure 3.14, nous observons que les modules élastiques sont fortement dépendants de l'hétérogénéité de taille des assemblages  $\delta_R$ . Les modules les plus forts sont obtenus pour les systèmes de plus faibles déviations de rayon, ceux qui présentent les régions ordonnées *Hexagonales Compactes*; à l'inverse, les modules de plus faibles amplitudes sont obtenus pour les systèmes de plus fortes déviations de rayon, ceux qui présentent une texture homogène. La diminution des valeurs des modules avec l'hétérogénéité de taille croissante est relativement régulière, comme l'était la décroissance de la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ . Les écarts entre les modules les plus grands et les modules les plus petits sont de l'ordre de 15% pour le module d'incompressibilité  $K$  et pour le module de cisaillement  $\mu$ . On constate donc que la réponse mécanique macroscopique des assemblages est très sensible à l'hétérogénéité de taille des assemblages de particules et donc au degré d'ordre.

Comme nous l'expliquons dans le chapitre 4, dans le cadre de la Théorie de Milieu Effectif d'assemblages de sphères élastiques, les modules sont des fonctions croissantes non linéaires de la pression  $p$ , mais aussi de la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et de la fraction solide  $\phi_s$ ; nous avons justement observé que  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et  $\phi_s$  étaient bien corrélés avec la déviation de rayon  $\delta_R$ ; sur l'intervalle d'hétérogénéité de taille considérée, lorsque  $\delta_R$  augmente,  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et  $\phi_s$  diminue, ce qui est cohérent avec la diminution des modules élastiques.

La réponse mécanique du système se calcule, on vient de le voir, à partir des contraintes dans l'assemblage, qui trouvent leurs origines au niveau des forces de contact entre les particules; par conséquent, pour comprendre l'origine des différences de réponses des systèmes à une même perturbation identique, nous allons maintenant caractériser les propriétés des forces de contact de nos assemblages.

### 3.5.2 Transmission des forces

#### Distribution des Forces

La caractérisation des intensités des forces transmises entre les particules est une composante importante de la texture d'un assemblage granulaire. Leur grande hétérogénéité (voir figure 3.15) est une propriété majeure qui est à l'origine de bien des aspects particuliers de leur comportement [124] [134] [70] [104]. La distribution statistique des modules des forces de contact (composante normale)  $f_n$  illustre la grande variabilité de leur intensité.

Pour relier la réponse mécanique macroscopique des assemblages granulaires au niveau mésoscopique des forces de contact, nous avons réalisé l'étude des réseaux de forces de contact en fonction de l'hétérogénéité de taille, présentée en figure 3.17, et nous avons calculé les fonctions de distribution des intensités des forces correspondantes présentées en figure 3.16.

En observant ces distributions, nous observons des changements importants en fonction de l'hétérogénéité de taille; nous remarquons que les assemblages présentant les régions ordonnées ont des forces "fortes" dont les intensités sont très hétérogènes et obéissent à une loi ressemblant à une exponentielle :

$$\mathcal{P}(f/\langle f \rangle) = \mathcal{P}(1) \exp[\beta(1 - f/\langle f \rangle)], \quad (3.17)$$

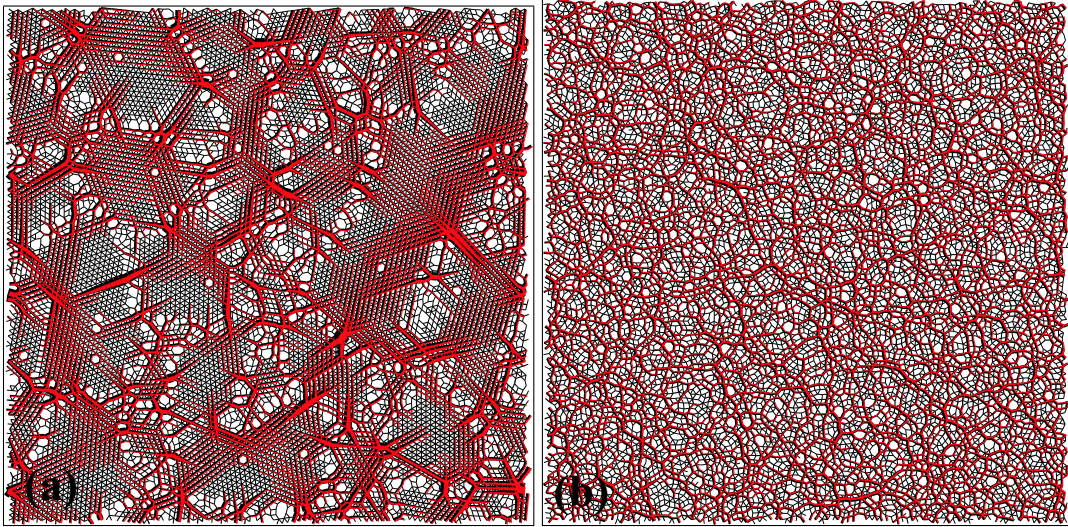


FIG. 3.15 – Représentation de la transmission des forces de contact (composante normale  $f_n$ ) dans deux systèmes (a) à faible déviation de rayon  $\delta_R = 10^{-4}$  et (b) à forte déviation de rayon  $\delta_R = 10^{-1}$ . L'épaisseur des traits est proportionnelle au module de la force transmise. Les forces appartenant au réseau 'faible' ( $f/\langle f \rangle < 1$ ) sont de couleur noire alors que les forces appartenant au réseau 'fort' ( $f/\langle f \rangle > 1$ ) sont de couleur rouge.

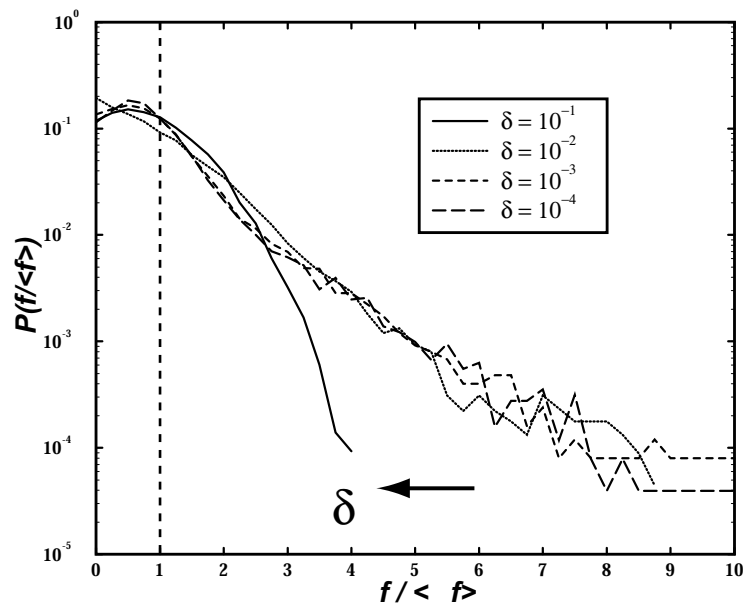


FIG. 3.16 – Distribution des intensités des forces de contact (composante normale  $f_n$ ) pour des systèmes de différentes déviations de rayons  $\delta_R$ ; les systèmes à "fort"  $\delta_R$  (c'est-à-dire  $> 10^{-2}$ ) présentent des distributions gaussiennes, tandis que les systèmes à faible  $\delta_R$  ont des distributions exponentielles; en augmentant l'hétérogénéité de taille, on homogénéise la distribution des forces.

En réalité, aux fortes déviations de rayon, il est difficile d'ajuster ces distributions sur une loi exponentielle et nous retiendrons essentiellement le caractère fortement hétérogène de ces distributions ; on peut trouver des forces ayant une intensité de  $\approx 10$  fois plus grande que la force moyenne  $\langle f \rangle$ .

Les forces "fortes" présentes dans les assemblages de faibles déviations de rayon, obéissent plutôt à une loi de type gaussienne :

$$\mathcal{P}(f/\langle f \rangle) \propto \exp[-k^2(f - f_0)^2], \quad (3.18)$$

et à 10% de déviation de rayon, en ajustant les données on trouve  $k^2 \approx 0.8$  et  $f_0 \approx 0.5$ .

Les systèmes de faibles déviations de rayon, qui présentent les régions ordonnées *Hexagonales Compactes*, ont des distributions de forces exponentielles pour les contacts forts ( $f > \langle f \rangle$ ), alors que les systèmes ayant des déviations de rayon plus grandes, possédant une structure amorphe de contact, présentent eux des distributions gaussiennes. Il a été montré par Makse et coll. [100] qu'on pouvait, dans des assemblages tridimensionnels de particules, obtenir une transition de la forme des distributions des intensités de forces de contact  $\mathcal{P}(f)$  d'une forme exponentielle vers une forme gaussienne, en augmentant le chargement extérieur et donc la pression interne  $p$ . Pour le cas de nos assemblages, la transition observée pour les distributions des forces de contact a une autre origine ; la distribution exponentielle est due à l'arrangement très particulier des particules dans ces assemblages. Comme nous travaillons avec des pressions relativement élevées  $p = 10 \text{ MPa}$ , les assemblages amorphes montrent des distributions gaussiennes. Avec des pressions plus faibles, on aurait également obtenu des distributions exponentielles comme on le montre au chapitre 4 sur des assemblages tri-dimensionnels.

On constate, que les plus fortes intensités de forces observées, le sont dans les systèmes à faible  $\delta_R$  ; on y trouve des forces dont le module est  $\approx 10$  fois supérieur à la force moyenne alors que dans les systèmes à fort  $\delta_R$ , la plus forte force a une intensité seulement  $\approx 4$  fois supérieure à la force moyenne. Par ailleurs, on remarque que la valeur moyenne des forces  $\langle f \rangle = 1$  sépare deux types de distributions ; ceci est lié à la structure complexe des milieux granulaires, où deux populations de contacts vont pouvoir être distinguées par l'intensité des forces qu'elles transmettent. Suivant qu'ils transmettent des forces de module supérieur ou inférieur à la force moyenne  $\langle f \rangle$ , les contacts peuvent être groupés en deux sous-populations caractérisées par des fonctions de distribution différentes.

Il a été proposé que les faibles forces suivent une loi puissance [124] [97] [104] du type :

$$\mathcal{P}(f/\langle f \rangle) = \mathcal{P}(1)(f/\langle f \rangle)^\alpha, \quad (3.19)$$

Cependant, nous n'observons pas ce type de distribution pour le réseau de faibles forces dans ces simulations.

En figure 3.15, on montre en rouge les contacts transmettant des forces de module supérieur au module moyen  $\langle f \rangle$  ; ils appartiennent au *réseau fort*. A l'inverse, les contacts représentés en noir qui transmettent des forces de module inférieur au module moyen appartiennent au *réseau faible*. En représentant distinctement ces deux sous-réseaux, on met en évidence dans les systèmes à forte hétérogénéité de taille *un squelette* de forces de fortes intensités formant des structures de *cages* où l'on trouve quelques particules et où les intensités des forces de contact sont beaucoup plus faibles. L'existence de ces sous-réseaux va nous permettre de calculer des longueurs de corrélation de forces.

Aux faibles déviations de rayon, la structure du réseau est très différente ; nous constatons que les forces de fortes intensités semblent se concentrer plutôt dans les *joints* des régions ordonnées, et selon une direction perpendiculaire à leur direction d'extension. Ces forces forment des *ponts*

qui connectent les régions ordonnées entre elles ; ces *ponts* de forces pourraient transmettre les contraintes d'une région à l'autre ; on peut supposer, que cette structure très particulière du réseau de forces, doit avoir une influence importante sur la réponse mécanique de tels assemblages. Nous étudierons par la suite la répartition des forces de fortes intensités, par rapport aux régions ordonnées et aux *joints*.

### Longueurs de corrélation

Les corrélations spatiales entre les forces de contact peuvent être quantifiées grâce à la fonction de corrélation des intensités de forces de contact  $K(r)$ . Si l'on considère un assemblage de  $N$  particules formant  $n$  contacts, cette fonction de corrélation des forces est donnée par l'expression :

$$K(r) = \frac{1}{\langle f \rangle^2} \frac{\sum_i \sum_{j \neq i} \Delta(r_{ij} - r) f_i f_j}{\sum_i \sum_{j \neq i} \Delta(r_{ij} - r)}, \quad (3.20)$$

où  $r_{ij}$  désigne la distance séparant deux contacts  $i$  et  $j$  transmettant respectivement les forces d'intensité  $f_i$  et  $f_j$  ; la fonction est normalisée par  $\frac{1}{\langle f \rangle^2}$  si bien que si il n'y a pas de corrélation, la fonction vaut 1.

Les fonctions de corrélation  $K(r)$  calculées pour tous les systèmes de différents  $\delta_R$  sont présentées en figure 3.18.

- Aux fortes hétérogénéités de taille, la fonction  $K(r)$  montre des fluctuations dont les intensités sont décroissantes sur quelques diamètres de particules. Nous mettons donc en évidence, l'existence d'une échelle intermédiaire entre la taille des particules  $\langle D \rangle$  et la taille du système  $L$  ; c'est l'échelle mésoscopique qui caractérise la longueur de transmission des forces dans le milieu.
- Aux faibles hétérogénéités, des pics de corrélations d'amplitudes décroissantes sont observés pour les distances correspondantes, notamment aux multiples des diamètres des particules  $\langle D \rangle$ , mais aussi pour des distances intermédiaires caractéristiques d'un réseau *Hexagonal Compact*.

La répartition spatiale des forces de contact et leur intensité, nous permet de mettre en évidence une longueur de corrélation qui caractérise l'extension de la transmission des forces dans l'assemblage.

### Partitionnement des forces

Pour quantifier la relation entre les régions ordonnées *Hexagonales Compactes*, les *joints* désordonnés et la distribution spatiale des forces de contact, que l'on peut observer sur la figure 3.20(b), nous définissons une fonction de répartition  $\Pi^{\mathcal{Z}=6}(f/\langle f \rangle)$  des forces appartenant au réseau de contacts faible et au réseau de contacts fort dans les régions ordonnées (où  $\mathcal{Z} = 6$ ).

$$\Pi^{\mathcal{Z}=6} = \frac{N_{\mathcal{Z}=6}^{f/\langle f \rangle}}{N f/\langle f \rangle} \quad (3.21)$$

Il s'agit donc de calculer la fraction de contacts transmettant une force d'une intensité  $f/\langle f \rangle \in [k; k + 1]$  entre des particules de coordinence  $\mathcal{Z} = 6$  ; la figure 3.19 montre que les contacts transmettant des forces de faibles intensités sont localisés préférentiellement dans les *clusters* ordonnés ( $\approx 60\%$ ), alors que les contacts transmettant des forces de fortes intensités sont concentrés majoritairement dans les *joints* désordonnés ( $> 90\%$ ). Aux fortes hétérogénéités de taille, la transition de la répartition des forces de contact a lieu sur l'intervalle  $[2\langle f \rangle; 3\langle f \rangle]$  des intensités de forces.



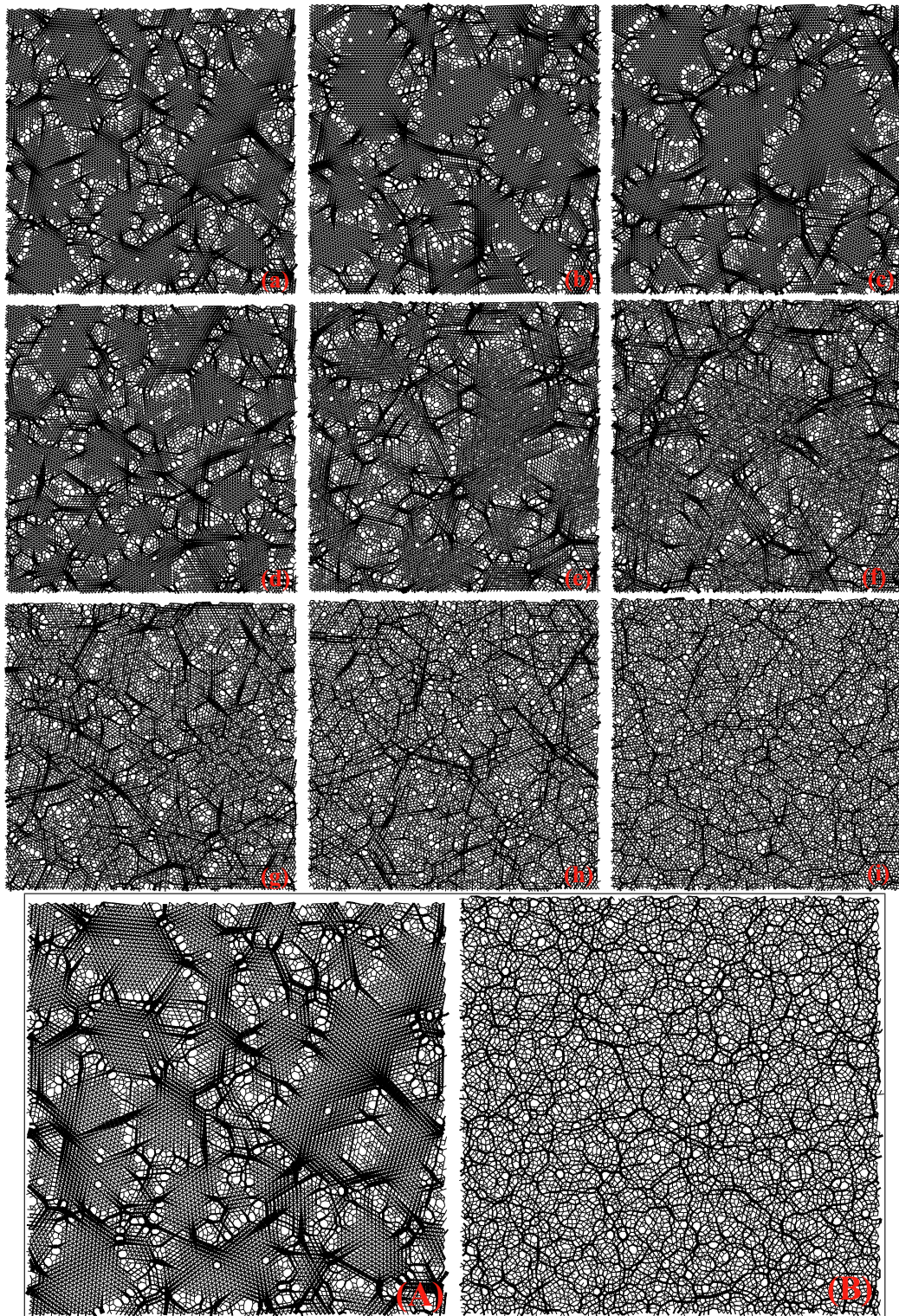


FIG. 3.17 – Représentation du réseau de transmission des forces de contact : (En haut) pour des systèmes de valeurs croissantes de déviation de rayon  $\delta_R$  : (a) 0.01%, (b) 0.025%, (c) 0.05%, (d) 0.1%, (e) 0.025%, (f) 0.5%, (g) 1%, (i) 2.5%, (j) 5%; (en bas), agrandissement pour les deux bornes de déviation (A) 0.01% et (B) 10%; les intensités des forces sont proportionnelles à l'épaisseur des segments joignant les centres des particules en contact.



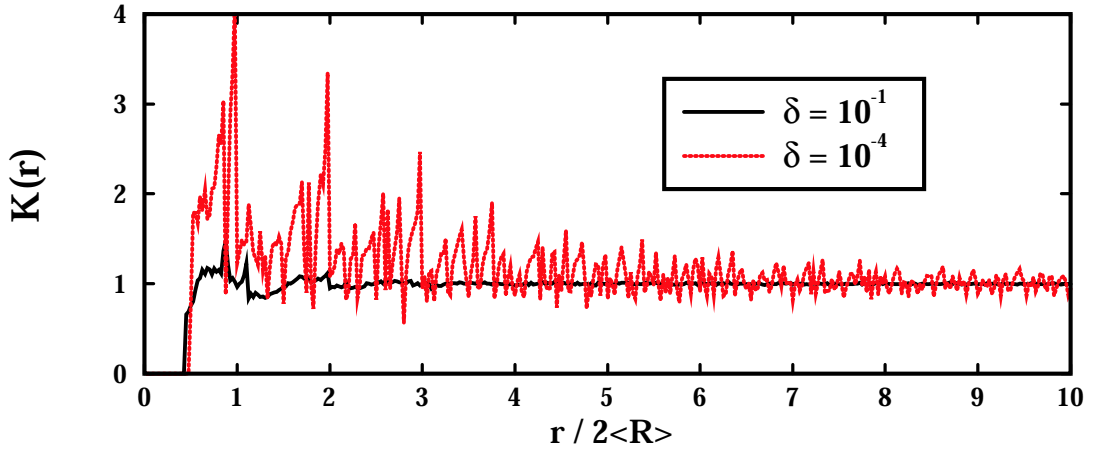


FIG. 3.18 – (a) fonctions de corrélation des intensités des forces  $K(r)$  calculées pour deux systèmes préparés avec un mélange bidisperse de particules, de déviation de rayon  $\delta_R$  minimale  $10^{-4}$  et maximale  $10^{-1}$ ; les distances  $r$  sont normalisées par le diamètre moyen des particules soit  $2\langle R \rangle$ ; à forte déviation, on observe des corrélations seulement à courtes distances, et à faible déviation, on observe des pics de corrélations aux distances multiples de  $\langle R \rangle$  notamment.

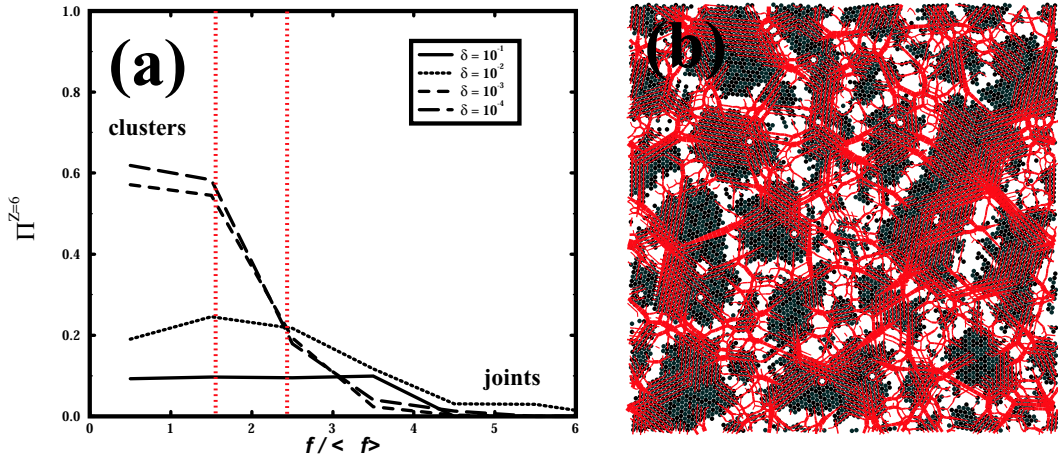


FIG. 3.19 – Relations entre le réseau de forces et les régions ordonnées *Hexagonales Compactes* : (a) participation des sous-réseaux de forces ( $f/\langle f \rangle \in [k; k + 1]$ ) aux *clusters* ( $\mathcal{Z} = 6$ ) pour des systèmes de déviation de rayons différents  $\delta_R$ ; les faibles forces ( $k=0, k=1$ ) sont plutôt concentrées dans les *clusters*, alors que les fortes forces ( $k>1$ ) sont concentrées essentiellement dans les *joints*; la concentration des très fortes forces dans les *joints* a lieu entre  $k = 1$  et  $k = 2$ ; (b) représentation du réseau de forces "fort" en rouge et des clusters de particules ayant une coordinnance ( $\mathcal{Z}^{(p)} = 6$ ).



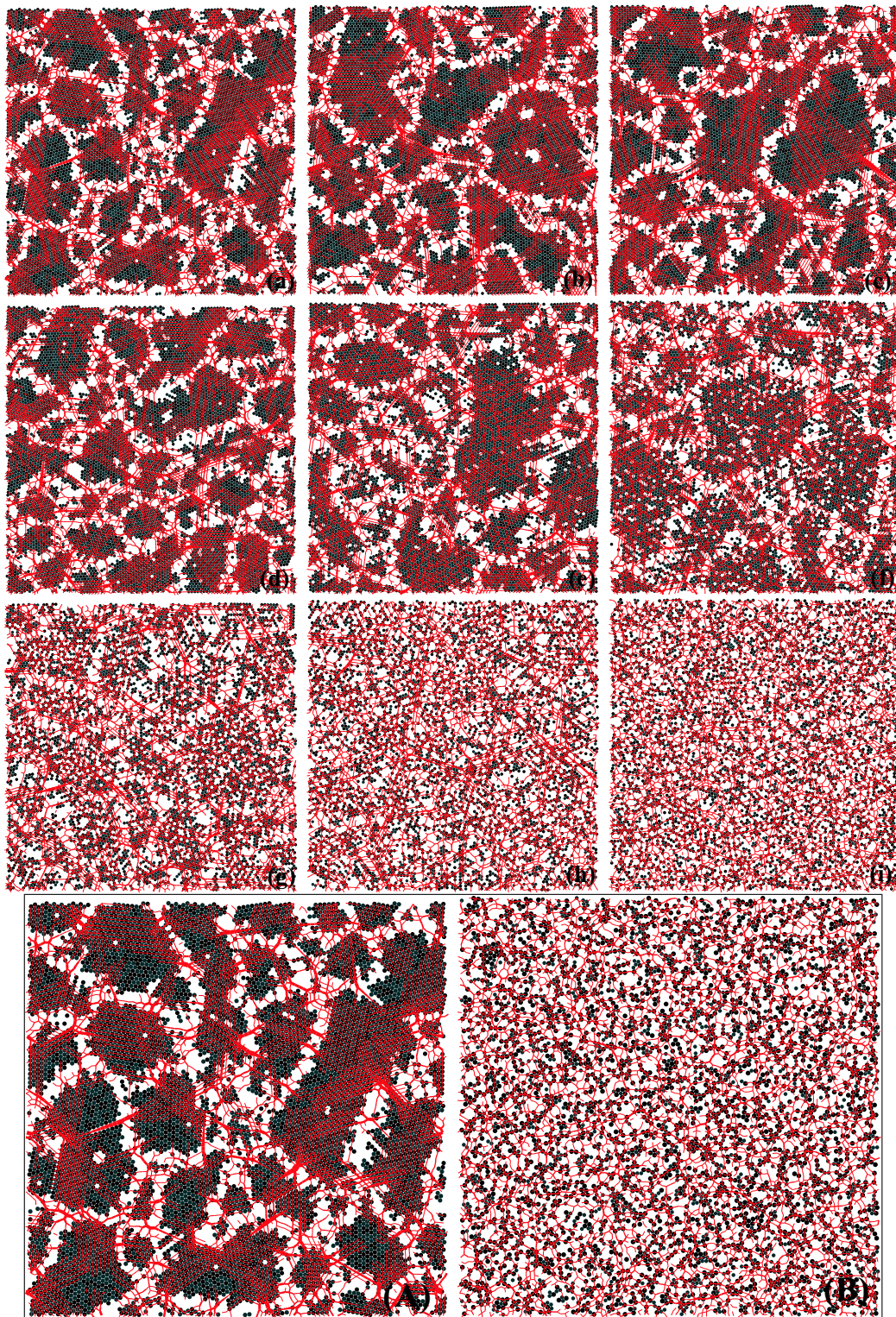


FIG. 3.20 – Représentation superposée du réseau de transmission des forces de contact 'fort' (segments rouges) et des particules appartenant aux régions ordonnées (cercles noirs) : (en haut) pour des systèmes de valeurs croissantes de déviation de rayon  $\delta_R$  : (a) 0.01%, (b) 0.025%, (c) 0.05%, (d) 0.1%, (e) 0.025%, (f) 0.5%, (g) 1%, (i) 2.5%, (j) 5% ; (en bas), agrandissement pour les deux bornes de déviation (A) 0.01% et (B) 10% ; on remarque que les forces de plus forte intensité sont concentrées dans les *joints* et ont une direction perpendiculaire à ces *joints*, formant des *ponts* entre les régions ordonnées.

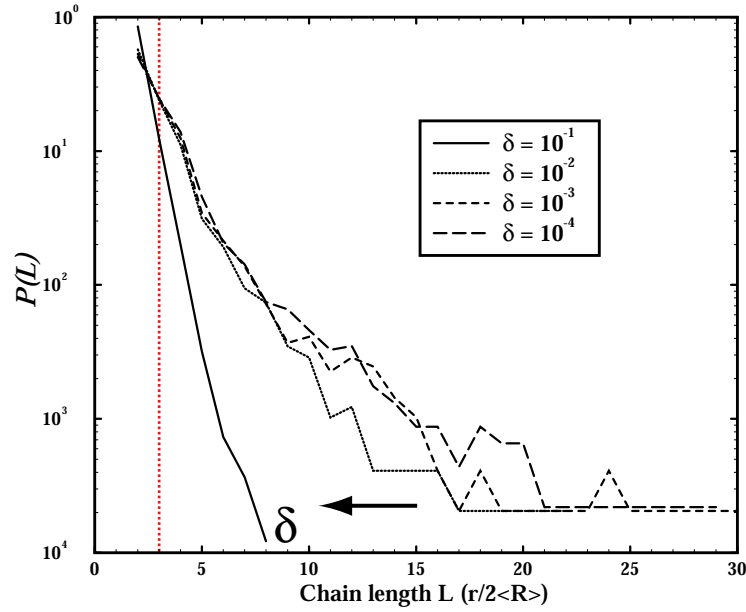


FIG. 3.21 – Distribution des longueurs des chaînes de forces  $\mathcal{P}(L)$  (en unité de taille de particule moyenne  $2\langle R \rangle$ ) pour des valeurs croissantes de la déviation de rayon  $\delta_R$ ; on constate que les chaînes définies par ( $L \geq 3$ ), quelque soit leur extension, sont plus nombreuses dans les systèmes à faible déviation de rayon; la chaîne la plus longue est de 8 tailles de particules pour  $\delta_R = 10^{-1}$  et  $\approx 30$  tailles de particules pour  $\delta_R = 10^{-4}$ .

### Extension spatiale des chaînes de forces

Afin de comprendre la relation entre la réponse mécanique des assemblages granulaires et les propriétés des réseaux de forces de contact, on peut également s'intéresser à la transmission des forces le long des "chaînes de forces"; nous allons donc étudier l'évolution de la distribution des longueurs de chaînes de forces avec l'hétérogénéité de taille des assemblages. Il faut tout d'abord définir ce que l'on entend par extension (ou longueur) d'une chaîne de forces; il s'agit de repérer les chaînes de vecteurs de contacts qui sont quasi-colinéaires à une déviation d'angle près  $\Delta\theta$ ; on calcule alors la longueur des chaînes  $L$  de la façon suivante :

- On choisit tout d'abord une particule ( $p$ ) et un contact ( $c$ ) de cette particule avec une particule voisine ( $p'$ ); on détermine la direction de contact  $\theta^{(c)}$  par rapport à un axe de référence, et on définit la déviation d'angle maximale autorisée  $\Delta\theta_c$ .
- On parcourt alors les particules voisines de ( $p'$ ) en contact ( $c'$ ) et on calcule les angles des directions de contact  $\theta^{(c')}$ ; si la direction d'un de ces contacts  $\theta^{(c')}$  fait un angle inférieur à  $\Delta\theta_c$  avec le contact d'origine ( $c$ ) d'angle  $\theta^{(c)}$ , alors on considère que ces deux contacts ( $c$ ) et ( $c'$ ) forment un segment de chaîne de forces et on continue la procédure à partir de la particule ( $p'$ ) et du contact ( $c'$ ).
- Si on ne peut pas trouver de contact ayant une direction telle que  $|\theta^{(c')} - \theta^{(c)}| < \Delta\theta_c$ , alors on arrête la procédure et la longueur de chaîne est définie comme le nombre de contacts trouvés à partir du contact d'origine ( $c$ ).
- On réalise cette procédure pour l'ensemble des paires de particules dans le système, et on obtient alors un histogramme de toutes les longueurs de chaînes répertoriées.
- Il faut ensuite corriger cet histogramme en supprimant les segments de chaînes comptabilisés plusieurs fois (pour une même chaîne) au cours de la procédure de recherche; par



exemple, si une chaîne de 4 contacts a été répertoriée, alors il faudra supprimer de l'histogramme : une chaîne de 4 contacts (la chaîne "opposée"), et tous les segments, c'est-à-dire deux chaînes de 3 contacts et deux chaînes de 2 contacts. On opère cette procédure de correction à partir de la chaîne de longueur maximale  $L_M$  répertoriée dans le système et on poursuit vers les chaînes de longueurs inférieures.

- On obtient alors la distribution des longueurs de chaînes de forces  $\mathcal{P}(L)$  présentée en figure 3.21 pour les assemblages de différentes hétérogénéités de taille.

Dans les systèmes présentant des régions ordonnées, le réseau de forces est constitué par de longues chaînes ininterrompues ( $|\theta_{k+1}^{(c)} - \theta_k^{(c)}| < \Delta\theta_c$ ). Sur la figure 3.22, on voit qu'elles s'étendent depuis une région ordonnée vers une autre et s'orientent perpendiculairement aux frontières de ces *clusters*, (les *joints*). Dans ces assemblages, l'extension maximale des chaînes de forces peut atteindre des longueurs de l'ordre de  $L \approx 30$  tailles de particule. Lorsque la déviation de rayon augmente, l'extension maximale des chaînes de forces diminue fortement ; dans les assemblages à texture amorphe, la longueur maximale répertoriée est de  $\approx 8$  tailles de particule.

### 3.6 Influence de la concentration

Dans la première partie de cette étude, nous nous sommes intéressés aux effets des hétérogénéités de taille dans des mélanges bidisperses, dont les deux populations de particules étaient présentes en concentrations égales  $C_{(A)} = C_{(B)} = 0.5$ . Nous nous sommes également intéressés aux effets de la concentration sur les arrangements pour les déviations de rayon suivantes :  $\delta_R = 10^{-4}$ ,  $\delta_R = 10^{-3}$ ,  $\delta_R = 10^{-2}$  et  $\delta_R = 10^{-1}$ .

Nous avons préparé des assemblages de particules bidisperses avec des concentrations variables en utilisant le même protocole de *compaction-densification* qu'utilisé précédemment, afin d'obtenir des assemblages à l'équilibre statique sous une pression  $p = 10 \text{ MPa}$ . Nous avons fait évoluer la concentration de la population (A) par rapport à la population (B) en partant d'un mélange monodisperse de ((B)  $C_{(B)} = 1, C_{(A)} = 0$ ), pour terminer avec un mélange monodisperse de (A) ( $C_{(A)} = 1, C_{(B)} = 0$ ) ; les assemblages intermédiaires sont définis par les concentrations  $C_{(A)} = C, C_{(B)} = 1 - C = 0$ .

Nous présentons, sur la figure 3.23, les résultats de cette étude en terme d'évolution de la coordinence moyenne des assemblages  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  en fonction de la concentration des espèces  $C$  pour différentes déviations de rayon  $\delta_R$ . Aux vues des résultats obtenus dans la partie précédente de cette étude, et des corrélations mises en évidence entre la coordinence moyenne ( $\langle \mathcal{Z} \rangle$ ), la degré d'ordre ( $\Psi_6$ ), et la réponse mécanique ( $K$  et  $\mu$ ), cette figure suffit à résumer les effets de la concentration sur les propriétés des assemblages.

- Dans les assemblages à faible hétérogénéité de taille, l'effet de la concentration sur la coordinence moyenne est quasi inexistant ; quelques soient les concentrations relatives des deux espèces, la coordinence moyenne reste à une valeur élevée  $\langle \mathcal{Z} \rangle \in [5.1; 5.3]$  ce qui laisse supposer l'existence de régions ordonnées *Hexagonale Compact* dans ces assemblages, ce que nous avons vérifié en visualisant les réseaux de contacts.
- Lorsque l'on augmente l'hétérogénéité de taille, l'effet de la concentration commence à se faire sentir ; pour des valeurs de  $\delta_R$  modérées, on peut observer une diminution régulière de la coordinence moyenne à des valeurs intermédiaires  $\approx 4.5$  à mesure que les concentrations des deux espèces de particules s'homogénéisent ( $C_{(A)} = C_{(B)} = 0.5$ ).
- Aux fortes hétérogénéités de taille, l'effet de la concentration est très important lorsque les concentrations des deux espèces sont très hétérogènes ; en effet, c'est sur les premiers pour-cent d'ajout d'une espèce dans le mélange, que l'on observe la diminution la plus



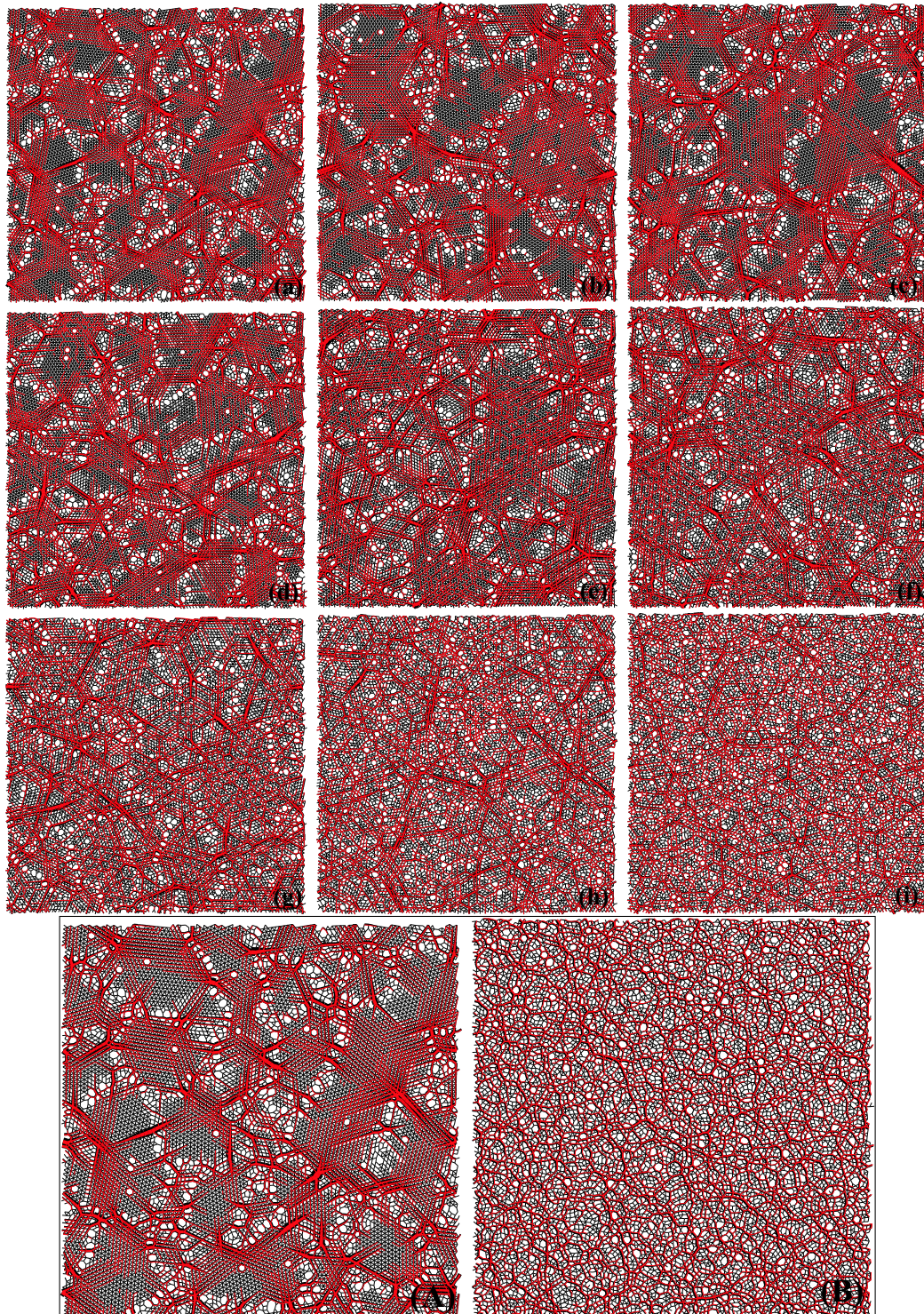


FIG. 3.22 – Représentation superposée du réseau de transmission des forces de contact 'fort' (segments rouges) et des chaînes de forces de plus grande extension (segments noirs) : (En haut) pour des systèmes de valeurs croissantes de déviation de rayon  $\delta_R$  : (a) 0.01%, (b) 0.025%, (c) 0.05%, (d) 0.1%, (e) 0.025%, (f) 0.5%, (g) 1%, (i) 2.5%, (j) 5% ; (en bas), agrandissement pour les deux bornes d'hétérogénéités de taille : (A) 0.01% et (B) 10%.

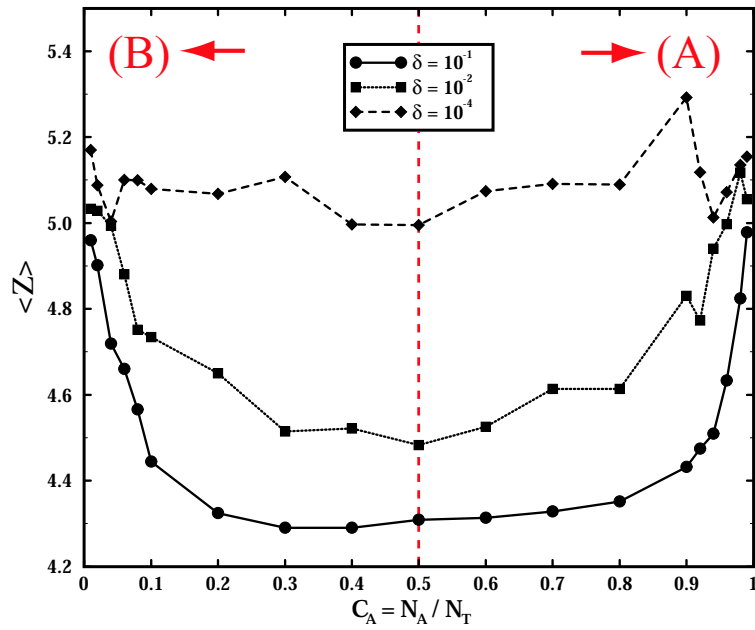


FIG. 3.23 – Evolution de la coordinnce moyenne des particules  $\langle Z \rangle$  dans des systèmes bidisperses, en fonction de la concentration des deux espèces de particules  $C = C_{(A)} = 1 - C_{(B)}$  et de la déviation de rayon  $\delta_R$ ; on observe une symétrie du diagramme telle que  $\langle Z \rangle(C) \approx \langle Z \rangle(1 - C)$  pour tous les  $\delta_R$ ; aux faibles déviations, la valeur de la coordinnce moyenne est indifférente aux concentrations des deux espèces (dispersion des valeurs entre [5.1 – 5.3]), par contre aux fortes déviations de rayon, ajouter 10% de concentration d’une espèce suffit à faire chuter  $\langle Z \rangle$ , de pratiquement une unité, par rapport à un mélange monodisperse.



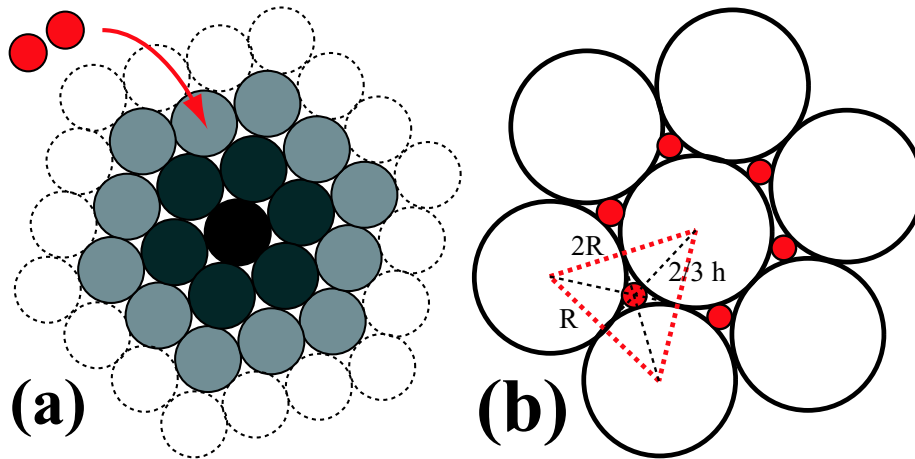


FIG. 3.24 – Crystallisation type *Hexagonal Compact* : (b) rapport de taille critique dans un mélange bidisperse : pour un rapport de taille  $k_c \approx 6.5$  (ou une déviation de rayon  $\delta_c \approx 0.73$ ) ; les petites particules peuvent se loger dans les interstices d'un assemblage ordonné *Hexagonal Compact* de grosses particules ; (a) si l'écart de taille n'est pas trop important ( $k < k_c$ ), une faible quantité de petites particules réparties de façon homogène permet de désorganiser sur une certaine distance l'arrangement ordonné des grosses particules.

importante de la coordinence moyenne ; ainsi la présence de 10% – 15% de particules ( $A$ ) dans un mélange composé majoritairement de particules ( $B$ ) (et inversement) suffit à faire chuter la coordinence moyenne de ses plus fortes valeurs  $\langle \mathcal{Z} \rangle > 5$  pour un mélange monodisperse vers une valeur minimale de  $\langle \mathcal{Z} \rangle \approx 4.3$ . pour un mélange bidisperse .

On constate donc, que pour une déviation de rayon suffisante, 10% d'une espèce de particule répartie de façon homogène dans l'assemblage permet de gêner l'organisation collective des particules de l'autre espèce, selon des arrangements *Hexagonaux Compacts* ; il suffit de considérer un arrangement local *Hexagonal Compact* de 18 particules centrées autour d'une particule comme sur la figure 3.24(a), pour s'en rendre compte ; on peut comprendre que l'ajout localement de 2 particules (soit  $\approx 10\%$  du nombre total), plus grosses ou plus petites doit suffire à empêcher toute cristallisation locale.

### 3.7 Fortes hétérogénéités de taille

### 3.8 Rapport de tailles critique

Pour terminer cette étude, nous avons simulés des assemblages de particules en prenant des mélanges bidisperses homogènes en concentrations ( $C_{(A)} = C_{(B)} = 0.5$ ), de forte hétérogénéité de tailles, allant de  $\delta_R = 0.1$  à  $\delta_R = 0.7$ . Au-delà de cette déviation de rayon maximale, les particules de plus faible taille ( $A$ ), deviennent suffisamment petites pour pouvoir se loger dans les espaces vides de l'assemblage laissés par l'arrangement des plus grosses particules ( $B$ ) (voir figure 3.24(b)) ; elles se logent dans la porosité de l'arrangement *Hexagonal Compact* des particules.

Pour définir des hétérogénéités de tailles de cet ordre, il est plus facile de travailler avec un nouveau paramètre, le rapport des rayons des petites et grosses particules :



$$k_R = \frac{R^{(B)}}{R^{(A)}}. \quad (3.22)$$

La relation qui relie le nouveau paramètre de rapport de rayons  $k_R$  à l'ancien, la déviation de rayon  $\delta_R$  pour un rayon moyen  $\langle R \rangle$  identique est :

$$(k_R + 1)(1 - \delta_R) = 2 \quad (3.23)$$

On peut calculer le rayon critique pour qu'une petite particule ( $A$ ) se loge dans l'espace laissé vide par un arrangement *Hexagonal Compact* de grosses particules ( $B$ ) (voir figure 3.24(b)) : à partir de  $\delta_R = \sqrt{3} - 1 \approx 0.73$ , soit  $k_R = \sqrt{3}/(2 - \sqrt{3}) \approx 6.5$ , les particules de plus faible taille prises *individuellement* sont trop petites pour désorganiser l'arrangement des grosses particules ; cependant si elles sont "côte à côte", leur taille effective devient suffisante pour pouvoir gêner cette organisation.

### 3.8.1 Réseau de transmission des forces de contact

Sur la figure 3.25, on a représenté l'évolution du réseau des forces de contact, en fonction de l'hétérogénéité de taille.

Lorsque  $k_R$  approche la valeur critique  $k_c = 6.5$  soit  $\delta_R = 0.73$ , un certain ordre dans la structure du réseau de forces commence à réapparaître, mais il reste difficile à caractériser ; les structures *Hexagonales Compacts* ne sont pas encore marquées, car premièrement l'écart de taille n'est pas encore suffisant et deuxièmement, localement, comme on vient de le voir, des groupes de petites particules "côte à côte" (deux suffisent) peuvent gêner la formation de tels arrangements ; on observe plutôt des configurations de forces *en quadrilatères* comme sur la figure 3.26.

Sur le reste de l'intervalle, de  $\delta_R = 0.1$  à  $\delta_R = 0.6$ , la texture granulaire et le réseau de forces n'évoluent pratiquement pas ; ceci est confirmé comme nous allons le voir par l'étude de l'évolution des propriétés géométriques comme la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et la porosité  $\phi$  (figure 3.27), mais également l'évolution des propriétés mécaniques, c'est-à-dire les modules élastiques (figure 3.28), la distribution des amplitudes de forces de contact et la distribution des longueurs de chaînes de forces ( figure 3.29).

### 3.8.2 Coordinence moyenne et porosité

Tout d'abord, on regarde en figure 3.27 (a) l'évolution de la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  de l'assemblage et des coordinences partielles moyennes des deux espèces  $\langle \mathcal{Z}_{(A)} \rangle$  et  $\langle \mathcal{Z}_{(B)} \rangle$  ; on constate que  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  reste pratiquement constant autour de la valeur  $\approx 4$  sur l'intervalle d'hétérogénéité de taille  $\delta_R \in [0.1 - 0.7]$  ; ce n'est pas le cas pour les coordinences moyennes partielles ; sur cet intervalle,  $\langle \mathcal{Z}^{(A)} \rangle$  diminue  $\rightarrow 2,5$ , alors que  $\langle \mathcal{Z}^{(B)} \rangle$  augmente  $\rightarrow 5.5$  ; comme l'évolution de la taille des populations ( $A$ ) et ( $B$ ) va en sens opposé, les surfaces de contact *possibles* des grosses particules augmentent alors que celle des petites particules diminuent, d'où l'évolution inverse des coordinences partielles ; mais la surface de contact moyenne de l'assemblage reste la même et, c'est pourquoi la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  n'évolue pratiquement pas.

En ce qui concerne la porosité de l'assemblage sur l'intervalle de rapports de taille considérés (figure 3.27 (b)), elle diminue fortement en passant de  $\phi \approx 0.15$  à pratiquement  $\phi \approx 0.10$  ; en effet, plus les particules de la population ( $A$ ) deviennent petites, et plus elles commencent à sentir la porosité créée par les arrangements des grosses particules. On rappelle que la porosité d'un arrangement *Hexagonal Compact* parfait vaut  $\phi_{HCP} \approx 0.094$ .

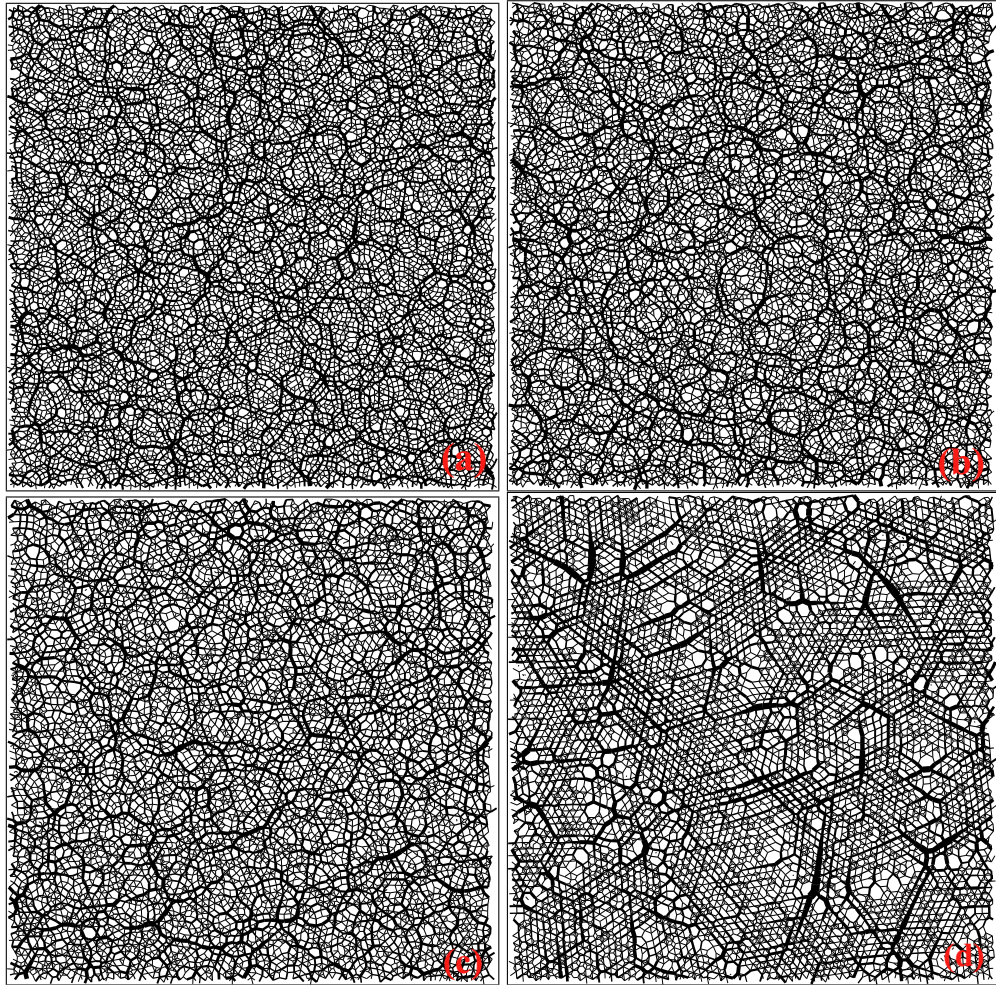


FIG. 3.25 – Réseaux des forces de contact normales pour des échantillons à forte hétérogénéité de taille et à concentrations égales des deux populations ( $C_A = C_B = 0.5$ ) : (a)  $\delta_R = 0.1$ , (b)  $\delta_R = 0.3$ , (c)  $\delta_R = 0.5$ , (d)  $\delta_R = 0.7$ ; on observe une réorganisation du réseau à la plus forte déviation,  $\delta_R = 0.7$ .

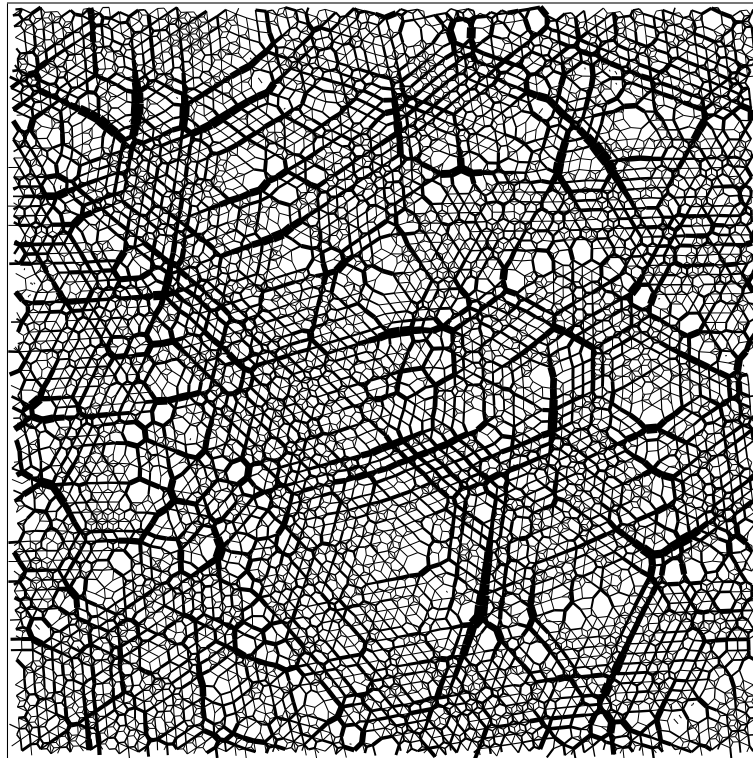
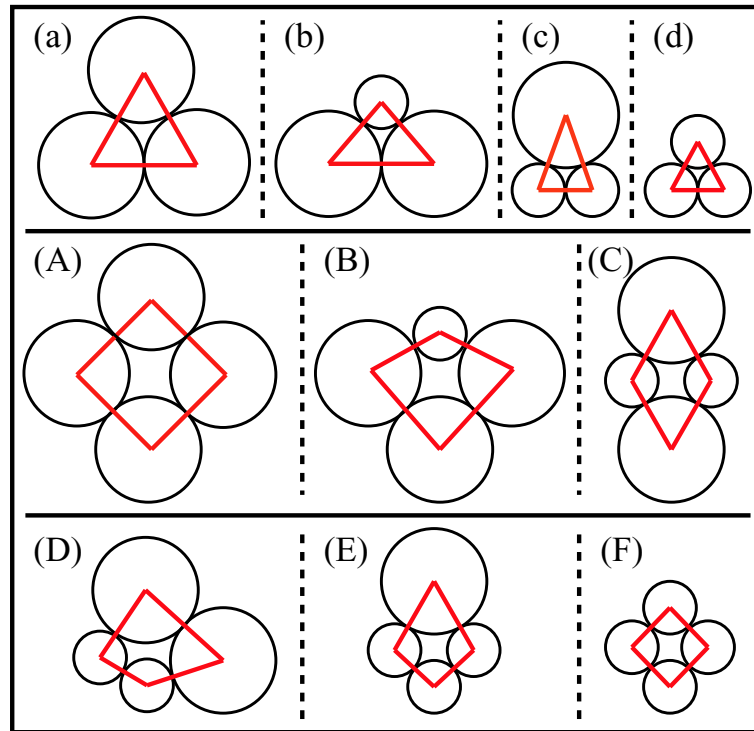


FIG. 3.26 – Mélange bidisperse à forte hétérogénéité de taille : (a) les différents types possibles de triangles et quadrilatères de contacts en combinant les deux espèces de particules (d’après Bideau) ; (b) comparaison avec le réseau de forces du mélanges possédant la plus forte hétérogénéité de taille  $\delta_R = 0.7$  ; comme  $0.7 < \delta_{R,c} = 0.74$ , les arrangements *Hexagonaux Compact* de grosses particules n’apparaissent pas encore mais on retrouve dans le réseau de forces, les combinaisons de particules proposées par Bideau.

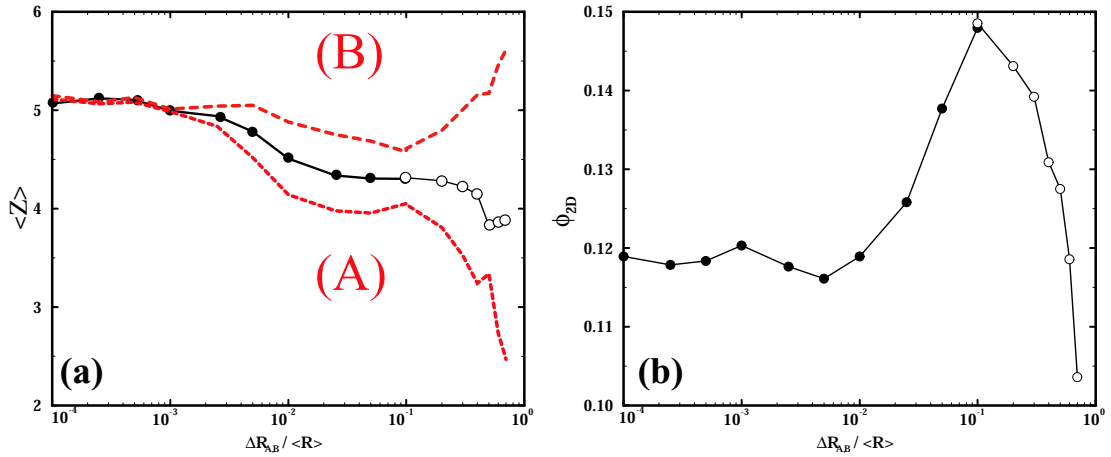


FIG. 3.27 – Evolution de la coordinnce moyenne  $\langle Z \rangle$  et des coordinnces partielles moyennes  $\langle Z_{[A,B]} \rangle$  (a) et de la porosité  $\phi$  (b) en fonction de l’hétérogénéité de taille des assemblages aux fortes déviations de rayon  $\delta_R = [0.1 - 0.7]$ ; la coordinnce moyenne  $\langle Z \rangle$  reste à peu près constante sur cet intervalle (par compensation :  $Z_B \nearrow$  et  $Z_A \searrow$ ) alors que la porosité chute de façon importante (la valeur de la porosité d’un assemblage plan Hexagonal Compact est  $\phi_{HCP} = 1 - \pi/2\sqrt{3} \approx 0.094$ ).

### 3.8.3 Modules élastiques effectifs

Les modules élastiques effectifs des assemblages  $K$  et  $\mu$ , restent pratiquement inchangés sur l’intervalle  $\delta_R = [0.1 - 0.7]$  :  $K(\delta_R) \approx 1200 \text{MPa}$  et  $\mu(\delta_R) \approx 1300 \text{MPa}$ . Ceci est consistant avec la valeur constante de la coordinnce moyenne, mais pas avec la décroissance de la porosité. Dans la Théorie élastique de Milieu Effectif, c’est surtout toute la valeur de la coordinnce moyenne qui joue sur les valeurs des modules élastiques ( $\propto Z^{2/3}$ ) et la porosité a un effet beaucoup plus faible ( $\propto \phi^{2/3}$ ), ce qui expliquerait que les valeurs des modules évoluent peu. Cependant pour des hétérogénéités de rayons trop importantes  $\delta_R > 10\%$ , cette Théorie de Milieu Effectif (présentée au chapitre suivant) ne peut plus être utilisée car elle décrit le comportement mécanique d’un assemblage de sphères élastiques identiques, c’est-à-dire ayant toutes le même rayon. Il faudrait construire une nouvelle Théorie de Milieu Effectif qui puisse décrire le comportement mécanique des mélanges polydispersés désordonnés. Les travaux théoriques de Dodds [37] [40] et Bideau et coll. [12] [11] sont basés sur des modèles statistiques géométriques permettant d’obtenir des expressions analytiques pour les propriétés moyennes (coordinnce, compacité) d’assemblages désordonnés de disques polydispersés; les travaux plus récents de Troadec [153] et Richard [134] [151] sont une extension de ces modèles, et utilisent des méthodes de triangulations sur des assemblages désordonnés de sphères bidisperses, pour obtenir des expressions analytiques des propriétés moyenne comparables. Sur la base de ces travaux, on pourrait imaginer calculer les modules élastiques de ces assemblages bidisperses en y incorporant les expressions des forces de contact et en réalisant le passage ”micro-macro” pour remonter aux contraintes.

### 3.8.4 Distributions des forces et des longueurs de chaînes

Toujours sur le même intervalle d’hétérogénéité de taille, on constate que les distributions des amplitudes des forces de contact  $P(f_n/\langle f_n \rangle)$  et les distributions des longueurs de chaînes de forces  $P(L)$  sont pratiquement identiques quelque soit la valeur de  $\delta_R$ , excepté pour la plus forte déviation de rayon  $\delta_R = 0.7$ , lorsque l’ordre réapparaît; en effet, nous l’avons vu, lorsque la taille

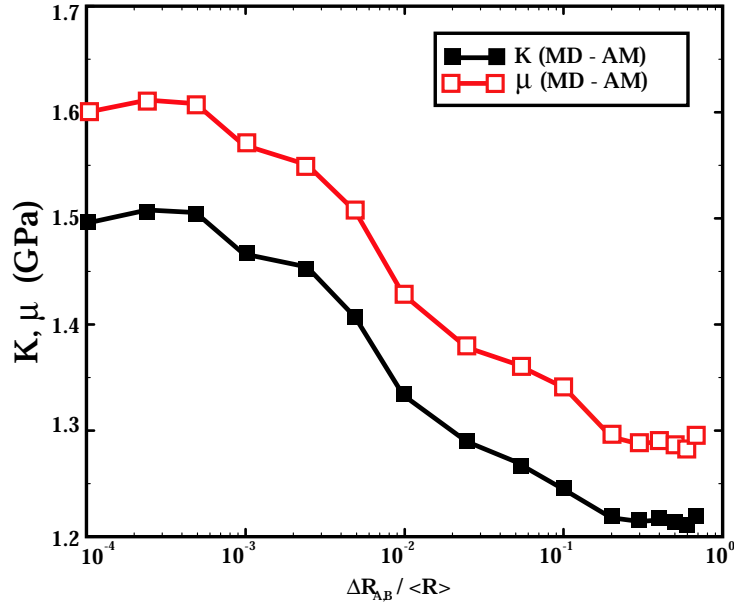


FIG. 3.28 – Evolution des modules élastiques  $K$  (module d'incompressibilité, en noir) et  $\mu$  (module de cisaillement, en rouge) en fonction de la déviation de rayon  $\delta_R$  aux fortes hétérogénéités de taille ; pour le calcul des modules dans les simulations, l'approximation affine a été utilisée (et la relaxation conséquente a été interdite) ; la valeur des modules reste approximativement constante sur cet intervalle  $\delta_R = [0.1 - 0.7]$ .

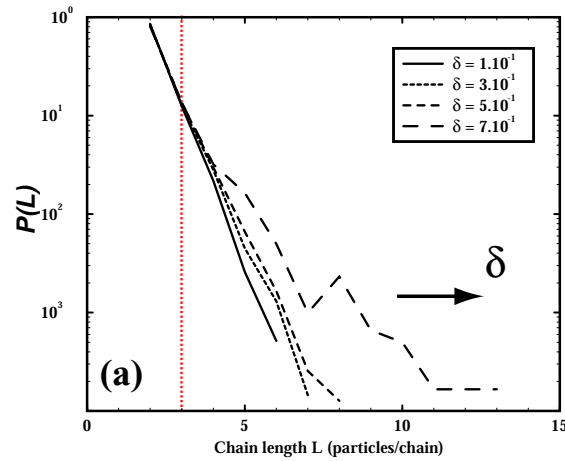


FIG. 3.29 – (a) Distribution des intensités des forces de contact normales  $\mathcal{P}(f_n / \langle f_n \rangle)$  (a) et distribution des longueurs de chaînes de forces  $\mathcal{P}(L)$  en fonction de la déviation de rayon  $\delta_R$  aux fortes hétérogénéités de tailles ; pour  $\delta_R \in [0.1; 0.6]$ , les distributions sont globalement identiques ( $\mathcal{P}(f_n / \langle f_n \rangle)$  à une forme gaussienne), par contre à  $\delta_R = 0.7$ , les distributions changent,  $\mathcal{P}(f_n / \langle f_n \rangle)$  devient exponentielle et  $\mathcal{P}(L)$  devient plus hétérogène,  $L_M$  passe de 8 à 13.



de 'pores' devient comparable à la taille des petites particules, on peut obtenir une réorganisation des grosses particules, avec une réapparition du degré d'ordre, ce qui va influencer la forme de ces distributions  $P(f_n/\langle f_n \rangle)$  et  $P(L)$ ; toutes les deux deviennent plus hétérogènes à l'approche du rapport de taille critique.

### 3.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats d'une étude numérique sur les effets des paramètres de mélange (hétérogénéités de taille et de concentration) sur les propriétés géométriques (au sens de la texture) et mécaniques des mélanges bidisperses de particules sphériques élastiques. Nous avons utilisé le programme de Dynamique Moléculaire, développé au cours de cette thèse et présenté au chapitre précédent, pour simuler ces mélanges.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'évolution des propriétés géométriques moyennes, comme la coordinence ou bien la porosité; nous avons également suivi l'évolution de la texture du réseau de contacts et du réseau de forces dans les assemblages. Nous avons quantifié ces changements et le degré d'organisation du système, à l'aide de paramètres d'ordre et de fonction de corrélations. Nous avons montré, que le paramètre d'ordre d'orientations de contact global était inadapté pour quantifier le degré d'organisation des particules, alors que la version locale était bien corrélée avec la transition de la texture granulaire. La fonction d'ordre radiale nous a permis de déterminer la taille moyenne des régions ordonnées de l'ordre de  $r = 7 - 8$  tailles de particules pour les systèmes de faible hétérogénéité de taille.

Par la suite, nous avons étudié la dépendance de la réponse mécanique des assemblages granulaires en fonction des paramètres de mélange. Cette réponse mécanique est sensible au degré d'hétérogénéité de tailles de particules et à leur concentration respectives. On observe une diminution significative des modules élastiques effectifs, de l'ordre de 10% pour le module d'incompressibilité  $K$  et de l'ordre de 15% pour le module de cisaillement  $\mu$ . Nous avons pu mettre en relation, l'évolution de la réponse mécanique aux propriétés des forces de contact : distribution de leurs intensités et distribution de leur extension spatiale. La transition texturale observée implique une transition de la distribution des intensités des forces de contact depuis une distribution exponentielle, hétérogène, vers une distribution gaussienne, plus homogène; cette homogénéisation s'accompagne d'une diminution de l'amplitude maximale des forces. Nous avons également montré que cette transition texturale correspond à une décroissance importante de l'extension des chaînes de forces, la taille maximale passant d'une trentaine de tailles de particules pour les assemblages présentant un haut degré d'organisation, à seulement 8 tailles de particules pour les assemblages à texture homogène. Ceci pourrait être corrélé avec la diminution significative des modules élastiques.

De façon plus générale, cette étude préliminaire des assemblages granulaires bidisperses, nous a permis de déterminer des valeurs spécifiques à utiliser en terme de concentration  $C_{(A)}, C_{(B)}$  et rapport de taille  $\delta_R$ , pour la préparation numérique d'assemblages granulaires bidimensionnels (au voisinage de la gamme de pression utilisée,  $p = 10 \text{ MPa}$ ) qui soient exempts de phénomènes de cristallisation Hexagonale Compacte, ce qui est important pour les études ultérieures présentées dans ce mémoire. Ainsi, de faibles déviations de rayons, de l'ordre de 10% se sont révélées suffisantes pour supprimer le phénomène d'organisation collective des particules; pour une telle hétérogénéité de taille, même un mélange relativement hétérogène en concentration supprime toute possibilité de cristallisation; la présence de 10% de particules d'une espèce de taille différente de l'espèce majoritaire suffit à éliminer ce problème.

Par la suite, que ce soit pour des simulations en géométrie  $2D$  ou bien  $3D$ , nous utiliserons

des mélanges bidisperses en rapport de concentrations  $C = 50\% - 50\%$  et de déviation de rayon  $\delta_R = 10\%$  par rapport au rayon moyen, dont la valeur sera  $\langle R \rangle = 0.1mm$ .

# Elasticité non-linéaire et propriétés acoustiques des agrégats granulaires

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction et objectifs</b>	<b>103</b>
<b>4.2</b>	<b>Les prérequis</b>	<b>108</b>
4.2.1	Mécanique du contact	108
4.2.2	Théorie de Milieu Effectif de l'élasticité granulaire	109
4.2.3	Désaccords entre la théorie et les expériences	112
4.2.4	Modèle visco-élastique linéaire constitutif	114
4.2.5	Dynamique Moléculaire	114
<b>4.3</b>	<b>Expériences acoustiques</b>	<b>116</b>
4.3.1	Montage expérimental	116
<b>4.4</b>	<b>Simulations numériques</b>	<b>119</b>
4.4.1	L'état de référence - protocole numérique	119
4.4.2	Coordinance	120
4.4.3	Fraction volumique	121
4.4.4	Limite de sphères dures	121
4.4.5	Autre protocole de préparation	122
4.4.6	Distribution des Forces	122
4.4.7	Paramètre d'ordre	124
4.4.8	Calcul des modules élastiques	124
4.4.9	Comparaisons : Théorie de Milieu Effectif, expériences, et simulations	126
4.4.10	Rôle des forces transversales et des rotations	130
4.4.11	Rôle de la relaxation et du désordre	132
4.4.12	Modules purement élastiques	133
<b>4.5</b>	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>135</b>

---

## 4.1 Introduction et objectifs

Les propriétés acoustiques et mécaniques des matériaux granulaires confinés par des contraintes extérieures peuvent être extrêmement non-linéaires comparées aux solides élastiques continus [60] [63] [75].



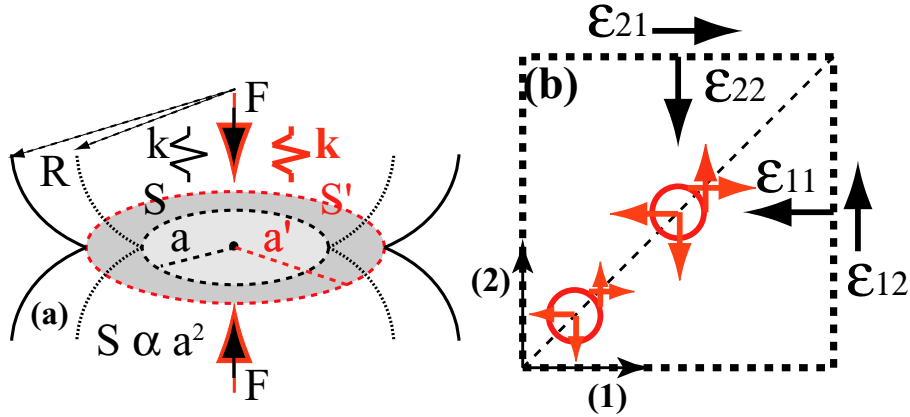


FIG. 4.1 – Augmentation de la surface de contact entre les deux grains avec la contrainte extérieure, à l’origine de la non-linéarité dans la théorie de contact de Hertz-Mindlin.

De nombreuses applications industrielles telles que l’optimisation de l’emplacement des puits pétroliers dans les réservoirs d’hydrocarbures, dépendent de façon critique de l’interprétation correcte des mesures acoustiques non-linéaires dans les matériaux granulaires [67], comme illustré par les larges variations des vitesses ultrasonores ou des constantes élastiques des formations géologiques de nature granulaire en fonction des contraintes externes. Dans cette étude, les effets non-linéaires, font référence au fait que les modules élastiques, calculés à partir de déformations de très faibles amplitudes, dépendent de façon non linéaire de contrainte externe (ou de la pression interne) ; on ne s’intéresse pas à la réponse mécanique non-linéaire dans le cas de grandes déformations.

A l’origine de la compréhension de ce problème vient en premier lieu la théorie de contact de Hertz-Mindlin (1) pour modéliser les forces inter-granulaires [79] [86] ; dans ce cas, la non-linéarité est issue de l’augmentation avec la contrainte extérieure de la surface de contact entre les deux grains (voir figure 4.1(a)). Les théories conventionnelles décrivant ce problème dans le cadre de l’élasticité des milieux continus [86] considèrent une déformation uniforme à toutes les échelles (c’est-à-dire que le tenseur de déformation à l’échelle macroscopique de l’échantillon est applicable au niveau microscopique des grains) et le champ de déplacement des grains est linéaire avec la déformation macroscopique (c’est ”l’approximation de déformation affine” (2), voir figure 4.1(b)). On calcule ensuite les contraintes en terme de déformation en considérant le milieu désordonné comme un milieu effectif qui exerce une force moyenne sur un grain représentatif ; cette approximation définit plus généralement la Théorie de Milieu Effectif (Effective Medium Theory) (3) [43] [36] [159] [113] [156].

Comme il a été montré dans des travaux récents [60] [104], la théorie de l’élasticité n’explique pas de façon satisfaisante les propriétés mécaniques des assemblages de grains non-cohésifs. La principale prédiction de la Théorie de Milieu Effectif est la dépendance du module d’incompressibilité  $K$  et du module de cisaillement  $\mu$  avec la pression  $p$  :  $K$  et  $\mu$  varient comme  $\sim p^{1/3}$ . Cependant un nombre important d’expériences réalisées sur des grains de sable (de forme irrégulière par nature) ou bien sur des billes de verre sphériques (modèle simplifié, mieux contrôlable expérimentalement) montrent une dépendance ”anormale” (par rapport à la théorie) avec la pression caractérisée par des puissances de  $p$  variant entre  $1/3$  et  $1/2$  [60]. Des études ont montré qu’une dépendance en  $p^{1/2}$  était plus appropriée pour décrire la variation non-linéaire des modules élastiques  $K$  et  $\mu$  [60] ; dans ce cas, les modules augmentent plus rapidement avec la

pression par rapport à la prédiction élastique.

Dans cette étude, nous cherchons à comprendre l'origine du désaccord entre la prédiction de la Théorie élastique de Milieu Effectif, les résultats expérimentaux et les simulations numériques. Nous avons conduit dans un premier temps, une série d'expériences acoustiques pour caractériser la non-linéarité du comportement élastique des matériaux granulaires non-cohésifs en environnement, sec sous une large gamme de pression (de quelques  $MPa$  à plus d'une centaine de  $MPa$  ( $p \sim 150MPa$ )). A partir de ce travail expérimental, nous réalisons qu'une étude microscopique est nécessaire afin de comprendre l'origine des désaccords avec les théories existantes pour les matériaux granulaires.

Dans cet objectif, nous avons conduit des simulations de type Dynamique Moléculaire (ou Eléments Discrets) en géométrie bidimensionnelle et tridimensionnelle, pour avoir accès aux mécanismes microscopiques de relaxation des matériaux granulaires.

Les modélisations numériques nous permettent de calculer les modules élastiques d'un assemblage désordonné de grains sphériques élastiques en contact frottant les uns avec les autres [79] et vont nous donner des indications importantes sur l'origine du désaccord : (1) traitement des contacts intergranulaires (c'est-à-dire, la loi de contact utilisée) ou bien (2) les hypothèses sous-jacentes à la Théorie des Milieux Effectifs (l'approximation de déformation affine et le concept de milieu effectif). Nous montrons qu'il existe un bon accord entre les résultats des simulations et les expériences acoustiques, ce qui tend à confirmer la validité de la théorie du contact de Hertz-Mindlin pour des agrégats de billes de verre composés de particules frottantes.

La dépendance en pression "anormale" des modules, nous montre tout d'abord qu'il existe plusieurs non-linéarités importantes (autres que la loi de contact) qui ne permettent pas de définir de manière simple le comportement mécanique du matériau granulaire en fonction de la pression. Nous trouvons qu'il existe un régime à basse pression où la coordinence  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et la fraction volumique de la phase solide  $\phi_s$  évoluent très peu, par rapport aux valeurs minimales obtenues par les simulations (aux pressions les plus basses accessibles numériquement, c'est-à-dire quelques dizaines de  $KPa$ ); dans ce régime, la dépendance des modules  $M(p)$  en  $p^{1/3}$  est approximativement valide (cela correspond à une dépendance en  $p^{1/6}$  pour les vitesses). Par contre aux pressions plus importantes  $p > 10MPa$ , l'augmentation de la coordinence  $\langle \mathcal{Z} \rangle(p)$  et de la fraction solide  $\phi_s(p)$  suggèrent d'autres non-linéarités et par conséquent, il n'est pas possible de mettre à l'échelle le comportement observé de manière simple.

En fait nous observons qu'autour de la pression  $p = 10MPa$ , il existe une transition en terme de puissance de  $p$  depuis une dépendance en  $p^{1/3}$  aux faibles pressions, vers une dépendance en  $p^{1/2}$  aux grandes pressions (plus précisément, l'ajustement donne  $p^{5/9}$ ). Nous pouvons donc penser que les dispersions observées dans les valeurs expérimentales, pourraient s'expliquer par l'existence d'un changement continu d'exposant de  $1/3$  à  $5/9$ . Cette transition a lieu justement dans le régime où les expériences sont généralement réalisées, c'est-à-dire au voisinage de la région de transition à  $p \approx 10MPa$ .

Le résultat le plus important de cette étude, relie l'effet de la friction inter-granulaire et de la relaxation des contraintes, au comportement à la fois élastique non-linéaire et inélastique des matériaux granulaires, selon le type de déformations imposées; ceci est mis en évidence par le calcul des constantes élastiques  $K$  (module d'incompressibilité) et  $\mu$  (module de cisaillement). Tout d'abord, nous trouvons que la formulation élastique donne une description raisonnable de la réponse d'un système granulaire à des chargements en compression hydrostatique : le comportement du module d'incompressibilité  $K$  est raisonnablement bien décrit par la Théorie de Milieu Effectif; par contre, nos expériences et nos simulations montrent que la théorie élastique n'est pas adaptée à la description de la réponse de ce matériau à des déformations en cisaillement, puisqu'elle ne peut prédire les valeurs correctes pour le module de cisaillement  $\mu$ .

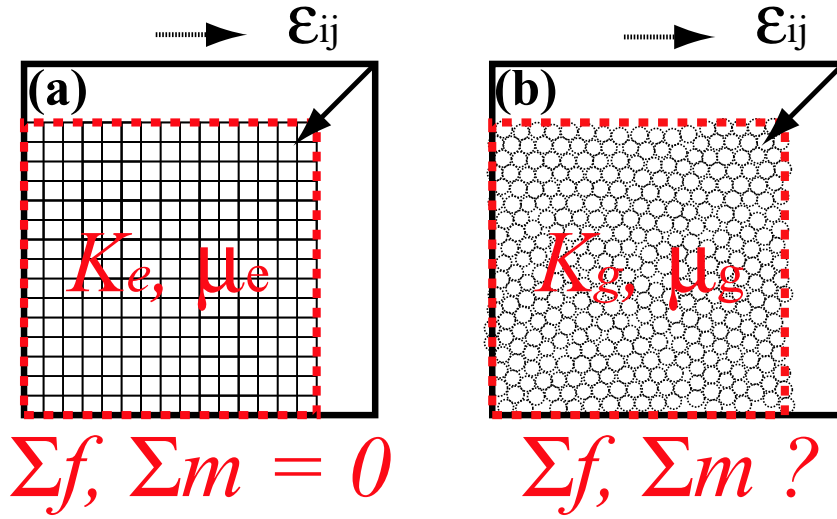


FIG. 4.2 – (a) pour un milieu élastique continu, ou bien un milieu particulaire ordonné, hypothèse de déformation "affine", aucune relaxation n'est nécessaire car les forces et les moments se compensent localement ; (b) pour un matériau granulaire désordonné, le champ de déformation homogène n'est pas consistant avec l'équilibre local des forces de contact ; les grains subissent une force non compensée du fait qu'ils ne sont pas dans un environnement local symétrique. En conséquence, ces grains ne sont pas à l'équilibre.

Les simulations numériques indiquent que la Théorie de Milieu Effectif ne fonctionne pas car elle ne prend pas en compte la relaxation consécutive à la déformation affine macroscopique [1]. En effet, cette théorie fait l'hypothèse "affine", c'est-à-dire que soumis à une déformation macroscopique infinitésimale, chaque grain se déplace en accord avec la direction de déformation macroscopique et sa position (exactement selon le champ de déplacement résultant d'un milieu élastique continu), et le mouvement de rotation n'est pas considéré ; de plus, aucune relaxation consécutive n'est permise et ainsi, la réponse est purement élastique (voir figure 4.2(a)).

Pour un matériau granulaire, le champ de déformation homogène que l'on vient de décrire, n'est consistant avec l'équilibre local des forces de contact agissant sur les grains uniquement dans le cas d'un système parfaitement ordonné ; en revanche, dans un système désordonné, (l'état le plus probable d'un milieu granulaire), une déformation inhomogène se développe au niveau local. Suite à l'application d'une déformation affine, les grains subissent une force non compensée du fait qu'ils ne sont pas dans un environnement local symétrique. En conséquence, ces grains ne sont pas à l'équilibre et se déplacent vers des positions  $\vec{x}$  différentes de celles supposées par l'approximation affine  $\vec{x}_e$ , de telle sorte que les forces  $\vec{f}$  sur chaque grain se compensent exactement (voir figure 4.2(b)). Numériquement, on observe le même comportement pour les mouvements de rotation  $\vec{\theta}$  et les moments  $\vec{M}$  se compensent.

Nous montrons, que l'hypothèse de l'affinité est approximativement valide pour le module d'incompressibilité  $K$ , mais sérieusement mise à défaut pour le module de cisaillement  $\mu$  ; pour cette raison, les prédictions de la Théorie de Milieu Effectif diffèrent de façon importante des valeurs obtenues expérimentalement et numériquement. Ainsi la principale source de déviation à l'élasticité est l'inadéquation du champ de déformation uniforme  $\bar{\epsilon}_{ij}$  à toutes les échelles (échelle microscopique des grains et mésoscopique des chaînes de forces).

Afin de quantifier l'écart des prédictions de la Théorie de Milieu Effectif pour le module de

cisaillement  $\mu$ , dans cette étude, nous regarderons deux cas distincts : (1) le cas où les grains ne sont pas frottants ( $\mu_f = 0 \rightarrow f_t = 0$ ) et interagissent uniquement avec des forces normales (l'état du système n'est pas fonction de l'histoire du chargement) et, le cas où les grains sont frottants ( $\mu_f \neq 0$ ) et interagissent en plus avec des forces tangentielles élastiques avec un seuil de frottement (l'état du système est alors explicitement fonction de l'histoire du chargement).

On montrera que le plus grand désaccord entre la théorie et les simulations est obtenu pour les systèmes où la friction de contact est nulle; d'autre part, la différence est plus prononcée aux faibles pressions lorsque le système se rapproche d'un état marginal de rigidité (coordinence critique sans friction : 4 en  $2D$  et 6 en  $3D$ ). A la suite d'une sollicitation externe du système en déformation cisailante (cisaillement pur, ou bien déformation uniaxiale), la relaxation du système est pratiquement complète. Par conséquent, ce comportement ne peut pas être capturé par l'approche classique de l'élasticité.

Lorsque la friction et l'élasticité tangentielles sont prises en compte aux contacts intergranulaires, l'accord entre la théorie et les simulations est meilleure par rapport au cas non frottant, mais néanmoins un désaccord important persiste. La friction et les forces tangentielles empêchent en fait le déplacement des grains par rapport au déplacement de champ moyen de l'approximation affine. De ce fait, la théorie élastique fournit un meilleur accord avec les simulations et les expériences pour des grains frottants que pour des grains non frottants.

Dans l'objectif de développer une meilleure compréhension du comportement des assemblages granulaires sous pression, il faudrait donc abandonner l'approche de l'élasticité et considérer le milieu granulaire comme un matériau "visco-élastique". Les effets de relaxation collective peuvent expliquer les désaccords des modules de cisaillement, avec les prédictions élastiques. Les corrections à apporter augmentent de façon dramatique dans le cas de matériaux peu denses, et pour des assemblages à faible friction inter-particulaire.

Une base à l'origine de ces travaux est que les méthodes de logging acoustique et d'interprétation, dans le cadre de l'élasticité non-linéaire, sont au premier plan pour l'évolution des technologies aidant à améliorer et optimiser le positionnement des puits dans la production pétrolière. Les vitesses et l'atténuation des ondes sonores dans les roches sont fonction de nombreux paramètres comme la densité, la porosité, la saturation en fluides et le degré d'endommagement ou de fracturation; par conséquent, l'utilisation de cette méthode pour sonder les propriétés des formations géologiques est des plus intéressante; cependant les propriétés de ces ondes qui les rendent justement si utiles pour l'exploration, donnent lieu à des formes d'ondes très complexes lorsqu'elles parcourent une formation géologique, par exemple lorsque l'on place transmetteurs et récepteurs au coeur d'un puits. D'autre part, pour placer idéalement un puits, la connaissance de la distribution des contraintes préexistantes est essentielle. Les propriétés mécaniques de la formation géologique granulaire obtenues par les mesures de logging peuvent aider à prédire la résistance de la formation. La magnitude des contraintes dérivée des mesures acoustiques peut également aider à la prédiction des problèmes de "sanding" dans les formations non consolidées (production de sable par désolidarisation des grains de la formation à la circonférence d'un puits). Ces mesures acoustiques sont donc également très utilisées pour comprendre la distribution des contraintes autour d'un puits.

Ce travail représente un essai pour comprendre certains des mécanismes d'atténuation, mais aussi la dépendance des vitesses des ondes avec les contraintes dans les matériaux granulaires. Dans une première partie, nous présenterons les prédictions de la Théorie de Milieu Effectif ainsi que l'approche numérique; ensuite nous décrirons les expériences de propagation des ondes ultrasonores dans les agrégats de billes de verre; dans une dernière partie, nous présenterons les résultats de cette étude.

## 4.2 Les prérequis

Le problème des propriétés élastiques des matériaux granulaires, a beaucoup été traité depuis les travaux précurseurs de Mindlin [40] [165] [160] [90] [91] [77] [34]. Cependant, une solution générale à ce problème est toujours manquante.

Dans une expérience type, un assemblage de billes de verre sans cohésion est confiné sous une pression hydrostatique  $p$ , et la vitesse de propagation des ondes de compression  $v_p$ , et la vitesse de propagation des ondes de cisaillement  $v_s$  sont mesurées en fonction de l'état de contrainte (voir Domenico [40], Yin [165] et [60] [160] [77]). Les vitesses des ondes  $P$  et des ondes  $S$  sont reliées aux constantes élastiques du matériau dans la limite des grandes longueurs d'ondes par [101] :

$$\begin{cases} v_p = \sqrt{\frac{K+4/3\mu}{\rho}}, & \text{à 3D;} \\ v_p = \sqrt{\frac{K+\mu}{\rho}}, & \text{à 2D;} \\ v_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}, & . \end{cases} \quad (4.1)$$

où  $K$  est le module élastique d'incompressibilité du matériau,  $\mu$  son module de cisaillement et  $\rho$  est sa densité volumique de l'assemblage.

### 4.2.1 Mécanique du contact

Hertz utilisa l'élasticité linéaire des milieux continus, pour calculer la force normale de deux sphères élastiques pressées en contact, en ne considérant pas d'adhésion [79] [86], il montra que deux grains sphériques en contact avec les rayons  $R1$  et  $R2$  interagissent avec une force normale répulsive :

$$f_n = \frac{2}{3}k_n\bar{R}^{1/2}w^{3/2}, \quad (4.2)$$

où  $\bar{R} = 2R1R2/(R1 + R2)$ ; l'interpénétration est  $w = (1/2)[(R1 + R2) - |\vec{x}_2 - \vec{x}_1|]$  où  $\vec{x}_1$  et  $\vec{x}_2$  sont les positions des centres des grains. Cette force normale agit uniquement en compression :  $f_n=0$  lorsque  $w < 0$ . La raideur effective du contact  $k_n = 4\mu_g/(1 - \nu_g)$  est définie en terme du module de cisaillement  $\mu_g$  et du coefficient de Poisson  $\nu_g$  du matériau des grains. Typiquement,  $\mu_g = 30GPa$  et  $\nu_g = 0.2$  pour des billes de verre sphériques.

La situation en présence d'une force tangentielle  $f_t$  est nettement plus complexe. Dans le cas de sphères pressées sous un chargement oblique, la force tangentielle de contact a tout d'abord été calculée par Mindlin [105]; l'histoire générale du chargement peut être décrite par un incrément de la force tangentielle  $\Delta f_t$  et dans la force normale  $\Delta f_n$ .

Pour le cas particulier où les incréments de chargement n'entraînent pas de micro-glissement à la surface de contact (c'est-à-dire, lorsque  $\Delta F_t < \mu_f \Delta F_n$ ), où  $\mu_f$  est le coefficient de friction entre les sphères (typiquement  $\mu_f = 0.3$ ), Mindlin a montré [105] que l'incrément de force tangentielle est :

$$\Delta f_t = k_t(\bar{R}w)^{1/2}\Delta s, \quad (4.3)$$

où la raideur  $k_t = 8\mu_f/(2 - \nu_g)$  et l'incrément de déplacement  $\Delta s$  est défini de telle sorte que le déplacement relatif transversal entre les deux grains soit  $2\Delta s$ ; C'est la condition de Mindlin en condition de non glissement. La forme incrémentale de la relation est nécessaire, car la valeur de la force tangentielle (et plus généralement, l'état de contrainte dans le matériau) dépend de la trajectoire du chargement local  $\tau$  dans l'espace  $(w, s)$  [113]. La force tangentielle finale est

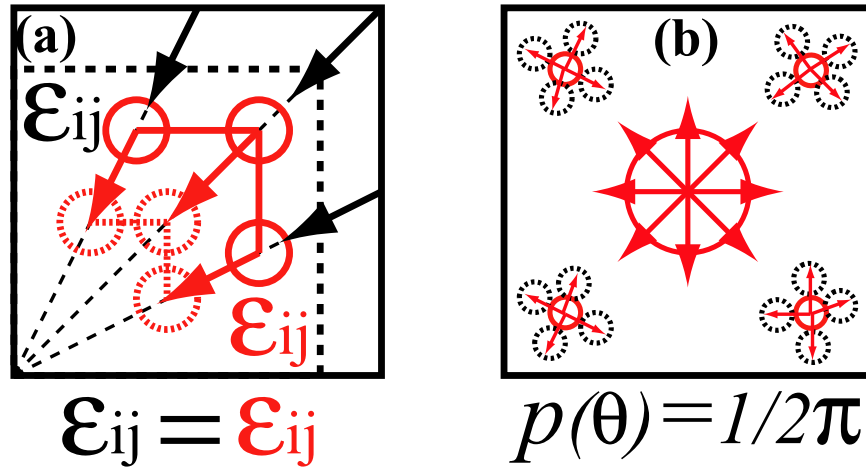


FIG. 4.3 – Hypothèses sous-jacentes à la Théorie de Milieu Effectif; (a) l'approximation de déformation affine, (b) toutes les particules sont statistiquement identiques du point de vue de leur coordonnée, et toutes les directions de contacts sont équiprobables.

obtenue par l'intégration sur le chemin pris par les sphères en contact avec les conditions initiales  $f_n = 0, f_t = 0$  et  $w = 0, s = 0$  donnant :

$$\Delta f_t = \int_{\tau} k_t (\bar{R}w)^{1/2} \Delta s, \quad (4.4)$$

Ainsi, l'état de contrainte d'un système granulaire avec des forces élastiques tangentielles dépendant du chemin de chargement  $\tau(w, s)$  (il est dit "path-dependant"), c'est-à-dire que le travail produit lors de la déformation du système dépend de l'histoire du chargement, on peut comprimer en premier et cisailer ensuite, ou bien l'inverse, on peut cisailer en premier et comprimer ensuite. Le résultat dépend du "chemin" suivi (succession de compressions et de cisaillements) et non, de l'état final instantané (les positions des centres des deux sphères).

D'un autre côté, l'état de contrainte d'un système de sphères interagissant uniquement par des forces normales est indépendant du chemin de chargement suivi  $\tau(w, s)$  (il est dit "path-independent"); le travail réalisé ne dépend pas de la façon dont on a appliqué la déformation, mais de l'état final de déformation.

Lorsque le déplacement transversal augmente, la force tangentielle élastique atteint sa valeur seuil, donnée par la friction de Coulomb :

$$f_t = \mu_f f_n + C \quad (4.5)$$

Cette loi dégénère vers la loi d'Amontons lorsqu'il n'existe pas d'adhésion  $C = 0$ . Remarquons que la loi de frottement de Coulomb, ajoute une source supplémentaire de dépendance au chemin de chargement suivi.

## 4.2.2 Théorie de Milieu Effectif de l'élasticité granulaire

### Energie élastique

L'idée à la base des théories élastiques, et qui est fondamentale pour notre étude, est que le travail macroscopique réalisé en déformant le milieu granulaire doit être égal à la somme des

travaux au niveau de chaque contact inter-granulaire, et que ce dernier est remplacé par une moyenne adaptée [36] [159] [113]. Ces théories de milieu effectif sont basées sur la mécanique du contact de Hertz-Mindlin.

Dans le cas d'un solide isotrope déformable, la densité d'énergie de déformation par unité de volume  $U$  est une fonction de la déformation  $\epsilon_{ij}$  (au second ordre en  $\epsilon_{ij}$ , un solide élastique est décrit uniquement par deux constantes [86]) :

$$U(\epsilon_{ij}) = U_0 - p\epsilon_{kk} + \mu_e(\epsilon_{ij} - 1/3\delta_{ij}\epsilon_{kk})^2 + 1/2K_e(\epsilon_{kk})^2, \quad (4.6)$$

où,  $\epsilon_{ij} = 1/2(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i})$  et les déviations  $u_i = x_i - R_i$  des positions des  $N$  particules dans le système  $\{x_1, \dots, x_N\}$  sont mesurées à partir d'un état de référence rigide adapté  $\{R\} = \{R_1, \dots, R_N\}$ . Cet état de référence est habituellement choisi périodique, mais on peut également le définir pour des solides amorphes pour lesquels l'état de référence est désordonné (par exemple des assemblages granulaires [1]).

Les indices de  $K_e$  et  $\mu_e$  dénotent que les valeurs des modules élastiques sont calculées en considérant les matériaux granulaires comme des solides purement élastiques.

Il y a deux hypothèses sous-jacentes à la théorie des milieux effectifs :

- (1) Toutes les particules sont statistiquement identiques, et il est supposé qu'il existe une distribution isotrope des contacts pour une particule donnée.
- (2) Une approximation de déformation affine est utilisée, c'est-à-dire que des sphères à la position  $x_j$  seront déplacées d'une distance  $\Delta u_i$  dans un intervalle de temps  $\Delta t$  en accord avec le taux de déformation macroscopique  $\dot{\epsilon}_{ij}$  par :

$$\Delta u_i = \dot{\epsilon}_{ij} x_j \Delta t, \quad (4.7)$$

Les grains sont toujours à l'équilibre, du fait de la première hypothèse de distribution isotrope des contacts, et aucune relaxation n'est par conséquent nécessaire ; ce type de Théorie de Milieu Effectif, revient donc à effectuer une simple moyenne des rigidités non-linéaires de tous les contacts sur un volume  $V$  donné.

La définition d'un champ de déformation uniforme n'est possible que sous l'approximation de milieux effectifs. Cette hypothèse est également correcte pour les assemblages ordonnés. Par contre, dans le cas des assemblages non ordonnés, l'approximation affine est inconsistante avec l'équilibre local des forces et donc des grains.

En reprenant les deux hypothèses évoquées précédemment, l'énergie élastique est remplacée par une moyenne adaptée sur les  $n$  contacts présents dans le volume  $V$  :

$$dU = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^n \int \vec{f} \cdot \vec{d}u \approx \frac{\langle \mathcal{Z} \rangle \phi_s}{V_g} \langle \int \vec{f} \cdot \vec{d}u \rangle, \quad (4.8)$$

où  $\vec{f} \cdot \vec{d}u = f_n dw + \vec{f}_t \cdot \vec{d}s$ ,  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  est la coordinence moyenne,  $\phi_s$  est la fraction volumique solide, et  $V_g$  est le volume d'un grain.

Finalement, nous présentons la prédiction de la Théorie des Milieux Effectifs pour le module d'incompressibilité  $K$ , et le module de cisaillement  $\mu$  pour un système isotrope confiné sous une pression  $p$ .

### Module élastique "Path indépendant"

Les modules élastiques issus de modèle "Path indépendant" (c'est-à-dire que leur valeur est indépendante du chemin de chargement suivi, et donc du travail effectué), correspondent au cas où

$k_t = 0$ , les grains ne sont pas frottants. On considère qu'il y a glissement parfait au contact inter-granulaire  $\mu_f = 0$ , ce qui correspond à prendre  $f_t = 0$  et on considère donc uniquement les forces normales entre les grains. Ce cas correspond à des forces dont les modules sont indépendants du chemin suivi; on peut utiliser une fonction de densité d'énergie, qui dépend uniquement de la position instantanée des particules (équation 4.6). Ce cas pourrait être considéré comme conservatif dans la mesure où le travail total réalisé sur un chemin fermé est nul.

Pour le cas de grains sans friction, nous avons à  $3D$  :

$$\begin{cases} K_e(p) = \frac{k_n}{12\pi} (\phi_s \langle \mathcal{Z} \rangle)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{k_n} \right)^{(1/3)}, & ; \\ \mu_e(p) = \frac{k_n}{20\pi} (\phi_s \langle \mathcal{Z} \rangle)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{k_n} \right)^{(1/3)}, & . \end{cases} \quad (4.9)$$

La théorie des milieux effectifs, prédit donc un module de cisaillement non nul, malgré le fait que la friction de contact entre les grains ne soit pas considérée. C'est la raideur normale  $k_n$  qui apparaît dans l'expression du module de cisaillement  $\mu_e$ , et c'est donc uniquement l'état compressif du système et la "frustration" des réarrangements des grains liés à cet état de contrainte, qui donne une résistance au cisaillement pour un tel système.

### Modules élastiques "Path dependant"

Les modules élastiques issus de modèle "Path dependant", correspondent au cas où  $k_t \neq 0$ , les grains sont frottants.

Dans ce cas les forces élastiques tangentielles sont prises en considération, En principe l'énergie dépend maintenant du chemin; cependant il a été montré que les constantes élastiques de second ordre, sont toutes indépendantes du chemin suivi dans le cadre de la Théorie de Milieu Effectif, alors que la dépendance de chemin apparaît pour les constantes élastiques de troisième ordre [113].

Le module d'incompressibilité  $K_e$  n'est pas affecté par l'introduction de forces tangentielles et l'équation précédente reste valide; le module de cisaillement  $\mu_e$  lui est modifié. A  $3D$ , nous avons donc :

$$\begin{cases} K_e(p) = \frac{k_n}{12\pi} (\phi_s \langle \mathcal{Z} \rangle)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{k_n} \right)^{(1/3)}, & ; \\ \mu_e(p) = \frac{k_n + 3/2k_t}{20\pi} (\phi_s \langle \mathcal{Z} \rangle)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{k_n} \right)^{(1/3)}, & . \end{cases} \quad (4.10)$$

Les résultats précédents ont été obtenus par plusieurs auteurs en utilisant différentes méthodes [36] [159] [113] et sont valides pour des systèmes de sphères infiniment rugueuses (le glissement est interdit, soit  $\mu_f \rightarrow \infty$ ). Par conséquent, le seuil de friction de Coulomb ne peut pas être atteint malgré qu'il y ait une force tangentielle élastique.

La dépendance en  $p^{1/3}$  des modules élastiques est une conséquence directe de loi de contact normale de Hertz, en effet :

$$p \sim f_n \sim w^{3/2} \sim \epsilon^{3/2} \rightarrow \mu_e \sim K_e \sim \frac{dp}{d\epsilon} \sim \epsilon^{1/2} \sim p^{1/3} \quad (4.11)$$

Remarquons qu'un système de ressorts linéaires tels que  $f_n \propto w$  donnerait des constantes élastiques indépendantes de la pression (cadre de la théorie de l'élasticité linéaire).

On a vu que le modèle de contact inter-granulaire est basé sur deux hypothèses, premièrement, c'est la solution de Mindlin où le glissement est interdit pour la force tangentielle (*no slip*) et le glissement total de la surface de contact est considérée uniquement, lorsque la force tangentielle devient supérieure au produit de l'intensité de la force normale, par le coefficient de friction de contact  $\mu_f f_n$ . Mais en réalité, une partie du contact peut glisser, alors que l'autre partie ne glisse



pas ; le glissement intervient selon une surface annulaire depuis la périphérie de la zone de contact ; ce glissement partiel peut intervenir pour n'importe quelle valeur finie de la force tangentielle ; une étude considérant différents chemins de chargement  $\tau$ , considérant cette possibilité de micro-glissement, c'est-à-dire que  $|\Delta f_t| > \mu_f \Delta f_n$  a été réalisé par Mindlin et Deresiewicz [106]. Il y est montré que la force tangentielle incrémentale peut être obtenue comme :

$$\Delta f_t = \alpha k_t (\bar{R}w)^{1/2} \Delta s \pm \mu_f (1 - \alpha) \Delta f_n, \quad (4.12)$$

où  $\alpha = 1$  lorsque le micro-glissement n'a pas lieu, sinon  $\alpha$  prend différentes valeurs en fonction de l'histoire du chemin de chargement ; Etant donné que le calcul de la Théorie des Milieu Effectif est réalisé en considérant uniquement les forces de Hertz-Mindlin (c'est-à-dire que le glissement partiel de Mindlin-Deresiewicz n'est pas considéré), nous utilisons également ces lois de contact dans les simulations numériques, pour pouvoir comparer correctement les prédictions de la théorie et nos résultats numériques.

### 4.2.3 Désaccords entre la théorie et les expériences

Il a été montré expérimentalement, que le module d'incompressibilité  $K$  et le module de cisaillement  $\mu$  d'un assemblage de grains élastiques sphériques varient avec la pression plus rapidement que la dépendance en  $p^{1/3}$  prédite par les équations 4.9 et 4.10 de la Théorie de Milieu Effectif [60].

#### Rapport des modules élastiques

On peut également s'intéresser au rapport des modules élastiques  $K/\mu$  pour mettre en évidence le désaccord entre la théorie et les expériences ; en reprenant les équations 4.10 de la théorie élastique pour des grains frottants, le rapport des modules s'écrit :

$$\frac{K_e}{\mu_e} = \frac{5(2 - \nu_g)}{3(5 - 4\nu_g)} \quad (4.13)$$

Ce rapport est indépendant de la pression, et dépend uniquement du coefficient de Poisson des grains  $\nu_g$ . Les expériences donnent des valeurs de rapport  $K/\mu$  comprises entre 1.1 – 1.3. La théorie élastique prédit elle, un rapport de 0.71 si l'on choisit  $\nu_g = 0.2$  ; en fait, cette prédiction est peu sensible aux variations de  $\nu_g$  : le rapport des modules varie comme  $\frac{K_e}{\mu_e} = 0.71 + -0.04$  pour un coefficient de Poisson de  $\nu_g = 0.2 + -0.1$ . Par conséquent, il faudrait avoir un coefficient de Poisson  $\nu_e \approx 1.2$ , pour ajuster la théorie aux valeurs expérimentales  $K/\mu$ , violant évidemment la limite supérieure thermodynamique de  $\nu_g < 0.5$  [86].

#### Coefficient de Poisson de l'assemblage

Le coefficient de Poisson effectif de l'assemblage  $\nu$  est une autre quantité intéressante qui met en évidence le désaccord sérieux. La valeur prédite par la Théorie de Milieu Effectif  $\nu_e$  est elle aussi indépendante de la pression et, est donnée uniquement en terme du coefficient de Poisson des grains  $\nu_g$  selon :

$$\nu_e = \frac{K_e - 2/3\mu_e}{2(K_e - 1/3\mu_e)} = \frac{\nu_g}{2(5 - 3\nu_g)}. \quad (4.14)$$

Pour des billes de verre typiques, le coefficient de Poisson des grains vaut  $\nu_g = 0.2$  et la valeur prédite par la théorie élastique est alors  $\nu_e = 0.02$  ce qui est un ordre de magnitude plus petit

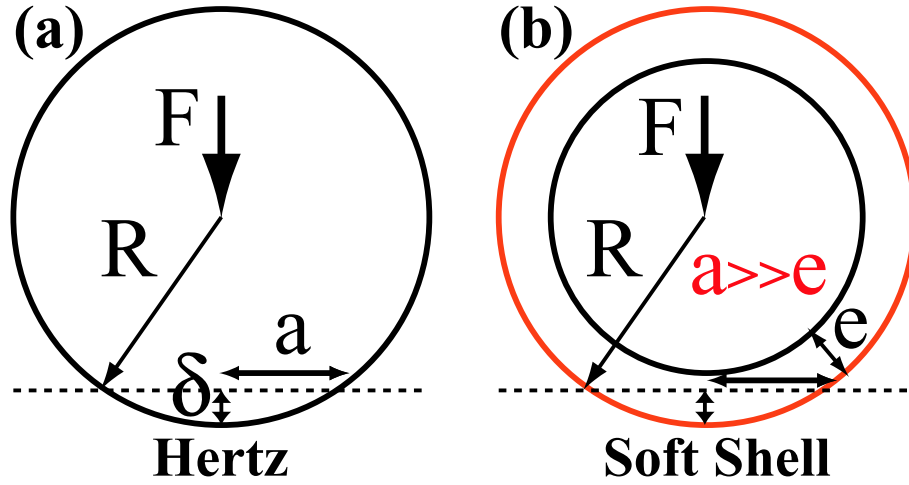


FIG. 4.4 – Modèle de couche molle de De Gennes pour expliquer la dépendance en pression "anormale" des modules élastiques avec la pression (a)  $\propto p^{1/3}$ , (b)  $\propto p^{1/2}$

que les valeurs expérimentales typiques  $\nu = 0.28$  [40]. Le coefficient de Poisson d'un matériau granulaire est donc incroyablement élevé, par rapport à un solide élastique ordinaire.

### Hypothèses sur l'origine du désaccord

Les origines des désaccords ne sont pas clairement identifiées ; cela pourrait être dû (1) à la loi de contact de Hertz-Mindlin utilisée dans la théorie élastique , ou bien, (2) l'origine du désaccord pourrait être associée aux hypothèses de la Théorie de Milieu Effectif, qui pourraient être violées dans les milieux granulaires.

De Gennes [34] a exploré le problème en ce qui concerne la loi de contact (voir figure 4.4) ; il a proposé qu'une fine couche (d'épaisseur  $e$  très petite par rapport au rayon de la surface de contact  $a$ ) oxydée en surface des grains (donc de module beaucoup plus faible), aurait pour effet une augmentation plus rapide avec la pression des modules élastiques des assemblages, ce qui pourrait expliquer les comportements des assemblages de billes métalliques. En effet, dans ces conditions la compression est concentrée dans la couche "molle" et l'expression de la pression locale au contact est modifiée ; la dépendance en pression des modules effectifs passe alors à  $p^{1/2}$ .

$$p \sim f_n \sim w^{3/2} \sim \epsilon^2 \rightarrow \mu_e \sim K_e \sim \frac{dp}{d\epsilon} \sim \epsilon^2 \sim p^{1/2} \quad (4.15)$$

Goddard [60] a proposé en revanche, que l'angularité des grains (typiquement des grains de sable) pourrait modifier la loi de contact, donnant lieu à différentes dépendances avec la pression.

D'autres auteurs [60] [29] ont également proposé que l'augmentation du nombre de contacts entre les grains avec la contrainte ( $\langle \mathcal{Z} \rangle$ ) pourrait être une origine du désaccord. Ainsi, Jenkins [29] mesura des modules élastiques en utilisant des simulations numériques pour une unique pression, et conclut que la Théorie de Milieu Effectif ne décrit pas correctement le module de cisaillement  $\mu$ , mais décrit de façon satisfaisante le module d'incompressibilité  $K$ .

Enfin des travaux expérimentaux réalisés par Liu and Nagel [90] et Jia et coll. [77] se sont concentrés sur le rôle joué par les chaînes de forces, dans la propagation des ondes, dans de tels milieux.

#### 4.2.4 Modèle visco-élastique linéaire constitutif

Pour comprendre nos résultats, il est important de généraliser les concepts élastiques introduits précédemment à la réponse visco-élastique ; dans la visco-élasticité linéaire [15] [135] [62], l'état de contrainte spécifié par le tenseur des contraintes  $\bar{\sigma}$  est déterminé par l'équation linéaire constitutive, qui fait intervenir l'historique du système ( $\infty \rightarrow t$ ) :

$$\sigma_{ij}(t) = \int_{-\infty}^t G_{ijkl}(t-t') \dot{\epsilon}_{kl}(t') dt', \quad (4.16)$$

où  $\dot{\epsilon}_{kl} = d\epsilon_{kl}/dt$  est le taux de déformation et  $G_{ijkl}(t)$  est le tenseur des modules de relaxation ; ce sont des modules complexes, où la partie réelle est liée à la réponse instantanée, et la partie imaginaire caractérise la dissipation du modèle visco-élastique.

Pour des matériaux viscoélastiques linéaires, le tenseur des modules de relaxation  $G_{ijkl}$  ne possède que deux constantes indépendantes qui sont, le module de relaxation d'incompressibilité  $K(t)$  et le module de relaxation de cisaillement  $\mu(t)$ . Ces modules caractérisent respectivement la réponse à une déformation compressive isotrope  $\epsilon_{kk}$  et à une déformation cisailante  $\epsilon_{ij}$ . Ces modules sont vus comme des analogues dépendant du temps des modules élastiques  $K_e$  et  $\mu_e$ .

Dans ce travail, nous nous intéressons à la relaxation des contraintes, après avoir imposé des déformations infinitésimales de type, compression hydrostatique (pour obtenir  $K$ ), cisaillement pur et compression biaxiale (pour obtenir  $\mu$ ), et compression uniaxiale (combinaison linéaire de  $K$  et  $\mu$ , selon la géométrie modélisée  $2D$  ou  $3D$ ).

Par exemple, une déformation cisailante est appliquée instantanément au temps  $t = 0$ , d'intensité  $\Delta\epsilon_{12}$ . Nous avons  $\epsilon_{12} = \epsilon_{12}/\delta(t)$ . L'équation 4.16 se réduit donc à  $\sigma_{12}(t) = G(t)\epsilon_{12}$ . De cette façon, ce protocole de déformation donne immédiatement une information complète sur la fonction réponse  $G(t)$  simplement en mesurant  $\sigma(t)$  ; ce protocole de déformation est d'autant plus particulièrement simple à implémenter dans nos simulations de dynamique moléculaire. La réponse instantanée du matériau granulaire visco-élastique  $G(t = 0)$  représente le module de cisaillement "à l'équilibre"  $\mu_e$  calculé par la Théorie élastique de Milieu Effectif.

- Pour un solide parfaitement élastique, le module de relaxation est indépendant du temps  $G(t) = G = cste$  et on peut donc définir le module de cisaillement du matériau comme :

$$\mu_e = \sigma_{12}/\epsilon_{12} = G(t = 0) \quad (4.17)$$

- Pour un liquide Newtonien  $G(t) = \eta\delta(t)$ , où  $\eta$  est la viscosité. Pour un liquide visco-élastique,  $G(t)$  approche zéro quand  $t \rightarrow \infty$ . Pour un solide viscoélastique, la relaxation donne un module fini :

$$\mu = G(t \rightarrow \infty) \quad (4.18)$$

Une analyse similaire peut être réalisée pour le module de relaxation d'incompressibilité  $K(t)$  pour obtenir  $K(t = 0) = K_e$  et  $K(t \rightarrow \infty) = K$ .

#### 4.2.5 Dynamique Moléculaire

##### Equations du mouvement

Dans les simulations de dynamique moléculaire de la matière granulaire, la force et le moment sur chaque grain dépendent du choix de la loi de contact inter-granulaire [26] [139]. Nous utilisons la méthode des Eléments Discrets présentée au chapitre 2, développée à l'origine par Cundall [26] ; les équations du mouvement :

$$\begin{cases} m\vec{\ddot{x}} = \sum \vec{f}, & (\text{translation}); \\ I\vec{\ddot{\theta}} = \sum \vec{M}, & (\text{rotation}). \end{cases} \quad (4.19)$$

sont résolues pour un assemblage composé de sphères élastiques interagissant avec des lois de contact de Hertz-Mindlin et un seuil de frottement de Coulomb (c'est-à-dire glissement global de toute la surface de contact).  $\vec{f}$  et  $\vec{M}$  sont les forces et les moments agissant sur un grain,  $m$  et  $I$  sont sa masse et son moment d'inertie, et enfin,  $\vec{\ddot{x}}$  et  $\vec{\ddot{\theta}}$  sont ses accélérations linéaires et angulaires.

### Méthode d'intégration

Les solutions numériques de ces équations 4.19 sont obtenues par intégration en différences finies, en assumant des vitesses  $(\dot{x}, \omega)$  et accélérations constantes  $(\ddot{x}, \dot{\omega})$  au cours des pas de temps  $\Delta t$ . Les taux de déformation  $\dot{\epsilon}$  sont supposés être faibles, et les pas de temps  $\Delta t$  sont choisis suffisamment petits, pour s'assurer que la perturbation d'un grain ne se propage pas plus loin que ses voisins immédiats (voir chapitre 2).

### Amortissement numérique

L'amortissement du mouvement des grains est incluse dans les calculs, pour prévenir les oscillations continues d'un système purement élastique. Physiquement, l'amortissement provient de la perte d'énergie du système (génération de chaleur et déformations inélastiques). La dissipation a lieu à l'échelle microscopique des grains et des contacts; elle dépend du taux de déformation  $\dot{w}$  (le taux d'interpénétration des grains) et également de la friction de Coulomb (glissement).

Plusieurs méthodes d'amortissement sont envisageables numériquement :

- (1) L'amortissement global agit comme si les particules étaient immergées dans un fluide visqueux, par l'introduction de termes de dissipations visqueuses dans les équations du mouvement de translation et de rotation 4.19; ces termes  $\sim -C_{\eta T}\dot{x}$  et  $\sim -C_{\eta R}\omega$  (où  $C_{\eta T}$  et  $C_{\eta R}$  sont les coefficients d'amortissement globaux liés à la viscosité du fluide), sont proportionnels respectivement, à la vitesse absolue, et à la vitesse angulaire des particules. Ce type d'amortissement global permet de garantir, que le système puisse atteindre un état d'équilibre statique à énergie cinétique nulle à une pression donnée ou bien à une pression nulle; cet amortissement est utile notamment pour dissiper l'énergie cinétique durant la préparation initiale de l'échantillon (compression-équilibration), mais n'est pas vraiment réaliste pour décrire la dissipation dans les matériaux granulaires secs en général.
- (2) Un amortissement plus réaliste implique un terme de force de contact proportionnel aux vitesses relatives des grains. En effet, l'amortissement à l'échelle microscopique du contact a lieu par dissipation visqueuse d'énergie dans le corps des particules, lorsque celles-ci sont déformées. Une force d'amortissement est donc ajoutée à chaque force de contact, normale et tangentielle; elle est proportionnelle aux vitesses normales et tangentielles,  $C_{\epsilon_n}\dot{w}$  et  $C_{\epsilon_t}\dot{s}$  respectivement, où  $C_{\epsilon_n}$  et  $C_{\epsilon_t}$  sont les coefficients d'amortissement visco-élastiques.

Cependant, le modèle d'amortissement de contact, bien que plus réaliste que l'amortissement globale, n'est pas en accord avec des résultats expérimentaux sur des coefficients de restitution normaux de sphères subissant une collision [17] [55]

Il a été montré que, pour incorporer la loi de dissipation menant à l'inélasticité du contact inter-granulaire de façon consistante avec la loi de contact de Hertz, une force non linéaire dépendante de la vitesse relative des grains devait être incorporée dans la loi de contact. Le terme dissipatif de la force normale a été déterminé par Brilliantov et coll. [17] :

$$f_n^{diss} = \frac{2}{3} A k_n \bar{R}^{1/2} w^{1/2} \dot{w}, \quad (4.20)$$

où  $A$  est un temps de relaxation qui dépend des propriétés visco-élastiques des grains, qui ne peut être déterminé qu'à partir des expériences de collision de particules et de mesure des coefficients de restitution.

Dans cette étude, nous ne sommes pas intéressé par la façon dont le système approche l'état d'équilibre, mais seulement par l'état final qui est censé être indépendant du type d'amortissement utilisé ; nous utilisons donc les amortissements plus efficaces numériquement : l'amortissement global pour la préparation des échantillons, et l'amortissement de contact pour le calcul des constantes élastiques. Cependant, pour des études dynamiques, un terme dissipatif de la forme de l'équation 4.20 devrait être considéré.

### 4.3 Expériences acoustiques

Dans la plus classique des expériences, un assemblage de billes de verre est confiné sous des conditions hydrostatiques, et les vitesses de propagation des ondes ultrasonores de compression  $v_p$  et de cisaillement  $v_s$  sont mesurées en fonction de la pression  $p$  [40] [165] [160].

Dans la limite des grandes longueurs d'ondes, la vitesse de propagation est reliée aux constantes élastiques de l'agrégat par les équations 4.1.

#### 4.3.1 Montage expérimental

Nous avons réalisé nos propres expériences, en utilisant un jeu de billes de verre de haute qualité (sphéricité, homogénéité de taille), et de diamètre suffisamment petit pour mesurer un signal appréciable à faible pression (permet de multiplier les surfaces de contact au niveau du transmetteur et du récepteur).

A partir des mesures expérimentales de Domenico [40], nous nous attendons à obtenir des vitesses de compression  $v_p \approx 1000 \text{ m/s}$  et des vitesses de cisaillement  $v_s \approx 500 \text{ m/s}$ . Nous réalisons nos mesures ultrasonores avec des "pulses" de fréquence  $f = 500 \text{ kHz}$ .

Par conséquent, la taille des billes de verre doit être telle que  $R \ll v_s/2f$ . Nous avons alors choisi un jeu de billes de verre de diamètre  $R = 45 \mu\text{m} \pm 5\%$ .

Les billes de verre sont nettoyées et séchées pour éviter les agglomérations (forces électrostatiques ou humidité). Les billes de verre sont ensuite déposées dans un récipient flexible de  $3 \text{ cm}$  de hauteur et de  $2.5 \text{ cm}$  de rayon.

Un émetteur et un récepteur ainsi qu'une paire de LVDT sont placés au sommet et à la base de l'échantillon ; la paire de LVDT (Linear Variable Differential Transducers) permet de mesurer les déplacements lors de la compaction de l'échantillon pour corriger les vitesses (voir figure 4.6).

Avant de commencer les mesures, une série de coups légers et de vibrations est appliquée sur les côtés de récipient dans le but d'obtenir le meilleur assemblage aussi dense que possible. Le système entier est ensuite placé dans une cellule haute pression remplie d'huile. Nous avons alors appliqué des pressions de confinement croissantes allant de  $0$  à  $140 \text{ MPa}$  ; cette pression a été appliquée de façon cyclique plusieurs fois jusqu'à ce que le système développe une hystérésis minimale. A ce stade, les ondes de compression et les ondes de cisaillement ont été propagées dans l'assemblage granulaire en appliquant des pulses. Les vitesses ultrasonores (et les modules élastiques correspondants) ont été obtenues en mesurant les temps d'arrivées des ondes en soustrayant le temps de propagation des embases bord à bord.

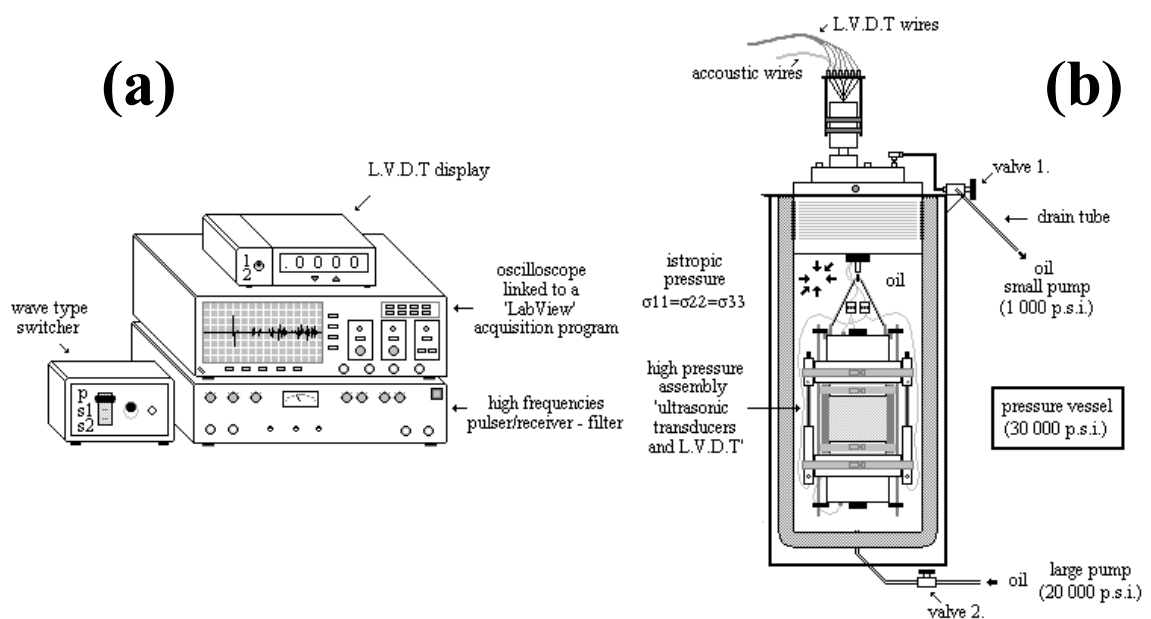


FIG. 4.5 – Dispositif expérimental pour mesurer la vitesse de propagation des ondes ultra-sonores dans un matériau granulaire sous confinement isotrope : (à gauche) les instruments permettant la génération d'un signal source (pulse) et de mesure du signal reçu, à droite, la presse de confinement isotrope (jusque  $p \approx 150 \text{ MPa}$ ) et l'échantillon de billes de verre dans son container flexible.

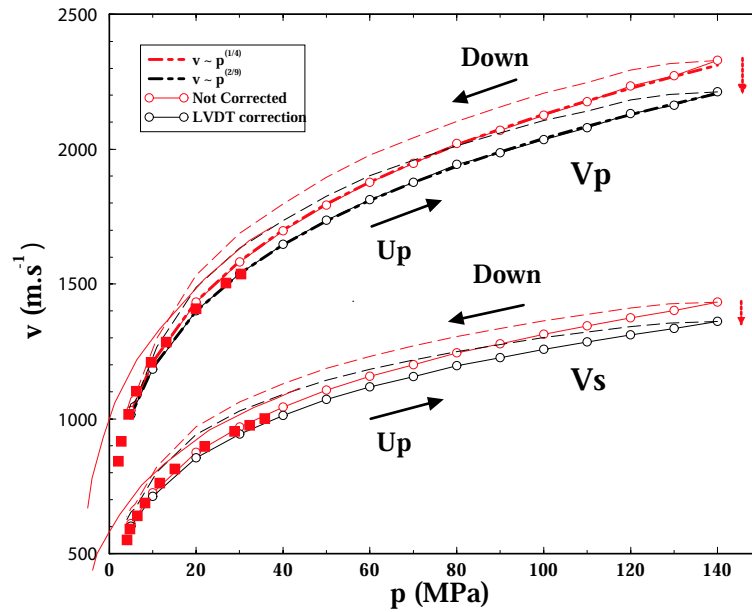


FIG. 4.6 – Evolution des vitesses de propagation de ondes ultra-sonores P (en haut) et S (en bas) en fonction de la pression de confinement ; la correction des vitesses liée à la compaction de l'échantillon granulaire lors des cycles initiaux de chargement-déchargement, est de l'ordre de 10% et l'hystérésis des cycles est minimale avant la mesure.

Les résultats que nous avons obtenus sont représentés sur la figure 4.6 et comparés avec les données de Domenico pour les pressions allant de  $\approx 0$  à  $40 \text{ MPa}$  (carrés rouges). Il reste une composante d'hysteresis entre le cycle de montée en pression, et celui de descente qui est représentatif d'un agrégats de particules.

A cause de la déformation des billes de verre et des réarrangements granulaires, la taille du système décroît avec l'augmentation de pression. Pour obtenir les vitesses correctes à partir des temps d'arrivées des signaux, nous avons mesuré de façon précise le déplacement des embases avec l'augmentation de pression par la paire de LVDT.

Pour éviter la fracturation des particules à cause d'un chargement local trop important, nous avons utilisé, comme déjà mentionné, des particules de petites tailles pour diminuer l'intensité des forces de contact. D'autre part, après avoir soumis le matériau granulaire à des pressions importantes, nous souhaitons avoir une idée qualitative de la présence de grains endommagés dans l'assemblage ; nous avons donc observé les grains sous microscope et nous avons observé qu'une faible fraction des billes a été endommagée.

Par contre, lorsque l'expérience a été répétée avec des billes de rayon plus importantes ( $\langle R \rangle \approx 0.3, \text{ mm}$ ), sous microscope, de nombreux grains sont apparus fracturés, ce qui corrobore les importantes émissions acoustiques et la sévère inflexion des vitesses ultrasonores qui ont pu être observées, lorsque nous avons monté en pression le système durant le premier cycle de chargement (non présenté ici). Pour les billes de  $45 \mu\text{m}$ , nous n'avons pas observé d'inflexion, ni remarqué d'émissions acoustiques.

## 4.4 Simulations numériques

Nous avons réalisé des simulations sur des systèmes composés de 10000 particules sphériques, placées dans une cellule cubique répétée périodiquement dans l'espace, et dont les dimensions latérales sont de l'ordre de  $L = 4\text{mm}$ . Les particules interagissent au contact par des forces de type Hertz-Mindlin et nous choisissons pour les paramètres élastiques des valeurs typiques pour ces billes de verre  $\mu_g = 30\text{GPa}$  et  $\nu_g = 0.2$ , pour pouvoir comparer nos résultats numériques avec les mesures expérimentales.

La distribution de taille de grains est choisie de telle sorte que la moitié des particules ait un rayon  $R_1 = 0.105\text{mm}$  et l'autre moitié un rayon  $R_2 = 0.095\text{mm}$ . Cependant, nos résultats se sont révélés à  $3D$  peu sensibles aux choix de la distribution de taille (faiblement polydisperse à monodisperse); à  $2D$  les effets de hétérogénéité de taille sur l'organisation des particules sont critiques (voir chapitre 3).

Le mode opératoire des simulations est le suivant : les simulations commencent avec un gaz de 10000 grains distribués à des positions aléatoires, dans une cellule cubique de dimension importante. Nous appliquons dans un premier temps un protocole de compression et d'équilibration, de façon à obtenir un agrégat dense désordonné, correspondant à une valeur de pression prédéterminée  $p$ . Ensuite, le système est sollicité par une compression infinitésimale incrémentale, ou bien par un cisaillement de même nature; l'évolution du champ de contraintes est calculée une fois que le système est de retour à un état d'équilibre. Nous obtenons alors, le module d'incompressibilité  $K(p)$  et le module de cisaillement  $\mu(p)$  du système, pour différentes pressions de confinement  $p$ .

### 4.4.1 L'état de référence - protocole numérique

Un point critique de cette étude est la façon d'obtenir un cadre de référence propre  $\{R\}$ , à partir duquel nous pouvons calculer les modules élastiques. Le travail commence donc avec un protocole numérique destiné à reproduire la procédure expérimentale utilisée pour la préparation d'agrégats granulaires denses, à une pression de confinement donnée. Dans les expériences, l'assemblage de grains initial est sujet à une agitation mécanique et à des vibrations, dans le but d'augmenter la fraction volumique de la phase solide  $\phi_s$ .

Durant l'étape de préparation des échantillons numériques, nous supprimons les forces transversales de contact entre les grains (c'est-à-dire, au choix  $k_t=0$  ou bien  $\mu_f=0$ ); de cette façon, puisqu'il n'y a pas de force transversale, les grains glissent sans résistance et le système atteint une forte fraction volumique de la phase solide  $\phi_s$  (comme obtenu expérimentalement). Si nous préparons le système avec les forces tangentielles, alors le système atteint un état de fraction volumique de la phase solide  $\phi_s$  plus faible, et la coordinance moyenne des particules  $\langle Z \rangle$  est également plus petite. Là, la force tangentielle et la friction seront restaurées au moment de calculer les constantes élastiques.

En partant d'un gaz de particule, nous appliquons en premier lieu une compression lente pour rapprocher les particules le plus proche possible de la valeur spécifiée pour la fraction volumique (0.64 pour la phase solide); à ce stade de nombreux contacts se sont formés, le système n'est pas dans un état d'équilibre, et une pression instantanée  $p$  et une coordinance  $\langle Z \rangle$  peuvent être calculées. Cette compression initiale est montrée en figure 4.7 (1).

La compression est alors stoppée et les grains peuvent alors se relaxer. Si la compression est stoppée avant d'atteindre la fraction volumique du 'Random Close Packing', le système relaxera vers une pression nulle  $p \rightarrow 0$  et une coordinance nulle  $\langle Z \rangle$ ; il n'est en effet pas possible d'atteindre l'équilibre en-dessous de cette fraction volumique. On voit cette relaxation dans la figure 4.7 (2).



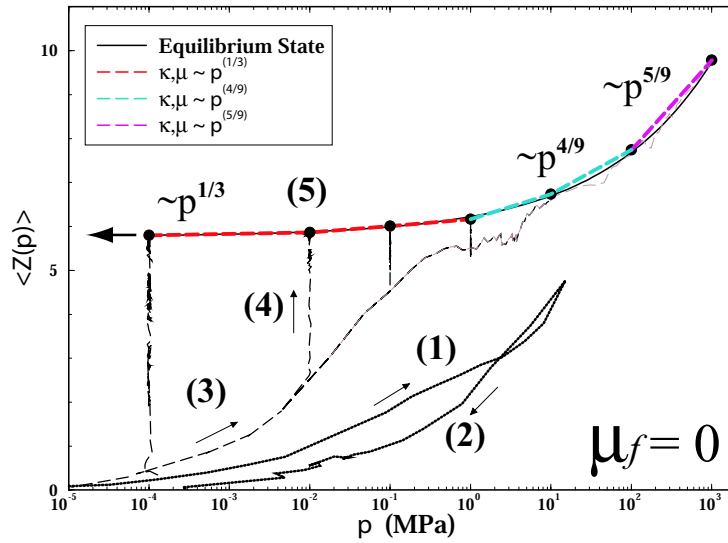


FIG. 4.7 – Suivi du processus initial de compaction (courbes en bas 1 et 2) et du protocole d'équilibration consécutif (courbes en haut (3), (4) et (5)) à partir de l'évolution de la coordinnence moyenne  $\langle Z \rangle$  du système en fonction de la pression  $p$ ; ces deux étapes utilisent une déformation affine du matériau pour le compacter et le densifier et on choisit un coefficient de friction intergranulaire nul,  $\mu_f = 0$ .

La compression est ensuite poursuivie au-delà de la fraction volumique critique vers une pression déterminée  $p_0$  comme dans la figure 4.7 (3), (4) et (5). Cette pression souhaitée est obtenue à l'aide d'un mécanisme de servo-contrôle, qui ajuste continûment le taux de déformation appliqué  $\dot{\epsilon}$  jusqu'à ce que le système atteigne l'équilibre à  $p_0$ . Ce mécanisme fonctionne de la façon suivante, pour ajuster le taux de déformation à l'écart entre la pression du système  $p$  et la pression désirée  $p_0$  :

$$\dot{\epsilon} = g(p - p_0), \quad (4.21)$$

où  $g$  est le facteur de gain qui permet d'atteindre l'équilibre de façon "optimale", quelque soit la pression désirée.

#### 4.4.2 Coordinence

Le protocole de préparation de l'état de référence est répété pour différentes pressions, ce qui permet d'obtenir la courbe d'évolution de la coordinnence moyenne  $\langle Z \rangle(p)$  de ces états d'équilibre, en fonction de la pression  $p$  (voir figure 4.8).

Plusieurs points importants peuvent être signalés sur la figure correspondante 4.8. Premièrement, la coordinnence moyenne  $\langle Z \rangle$  augmente de façon non-linéaire avec la pression; deuxièmement, nous trouvons que la coordinnence de l'assemblage approche une valeur minimale critique proche de  $Z_c \approx 4$  à  $2D$  et  $Z_c \approx 6$  à  $3D$  quand  $p \rightarrow 0$ .

Aux faibles pressions (comparées aux modules élastiques des grains), le système se comporte comme un assemblage de particules rigides. Ces particules sont connectées de façon minimale à  $Z = 6$  en  $3D$  alors qu'en  $2D$  le même protocole de préparation donne  $Z = 4$ . Ces faibles coordinnences peuvent s'expliquer [1] [51] [150], pour un système de  $N$  particules rigides sans friction

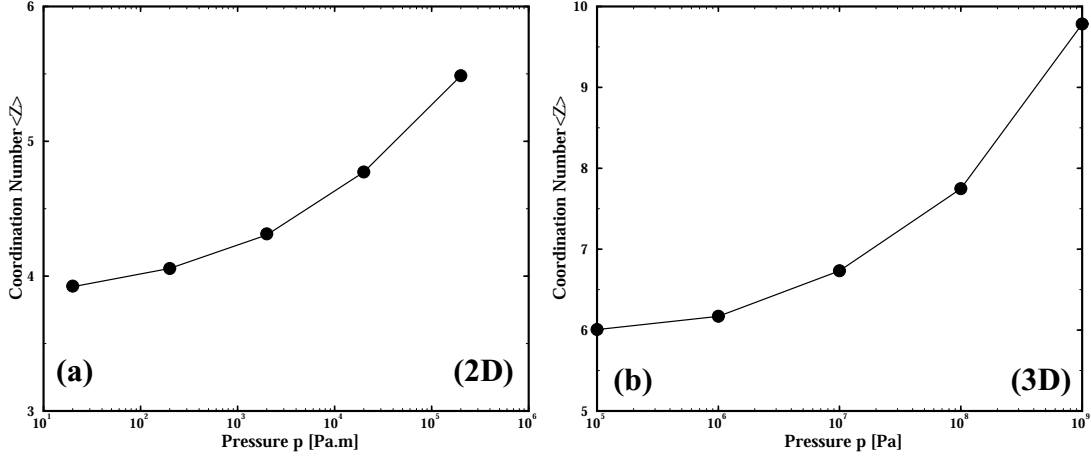


FIG. 4.8 – Evolution de la coordinnce moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  dans les assemblages 2D, pour 10 réalisations différentes (à gauche) et 3D (à droite) de sphères non frottantes, équilibrés à des pressions  $p$  croissantes ; à basse pression (limite isostatique),  $\langle \mathcal{Z} \rangle \rightarrow 4$  à 2D et  $\langle \mathcal{Z} \rangle \rightarrow 6$  à 3D.

en  $D$  dimensions. Il est nécessaire de déterminer  $\mathcal{Z}N/2$  forces normales avec  $ND$  équations d'équilibres des forces. La coordinnce critique qui permet de résoudre ce système d'équations est donc  $Z_c = 2D$ .

Aux larges pressions de confinement, les grains sont plus comprimés et de nouveaux contacts apparaissent ; la coordinnce augmente par rapport à sa valeur initiale de stabilité.

Nous pouvons ajuster la dépendance de la coordinnce avec la pression par une loi puissance en  $p$  et empiriquement nous trouvons la relation :

$$\begin{cases} \mathcal{Z}(p)^{2D} = \mathcal{Z}_c + \left(\frac{p}{6.210^5}\right)^{1/3}, \\ \mathcal{Z}(p)^{3D} = \mathcal{Z}_c + \left(\frac{p}{1.9110^7}\right)^{1/3}, \end{cases} \quad (4.22)$$

On a constaté une erreur (de saisie) concernant la dépendance de  $\mathcal{Z}(p)^{3D}$  dans l'équation (1) de l'article soumis à Physical Review Letter (voir Annexe B), et c'est la dépendance proposée dans l'équation 4.22 qui est correcte.

#### 4.4.3 Fraction volumique

Nous mesurons également la fraction volumique de la phase solide en fonction de la pression et nous trouvons qu'elle approche la valeur critique de  $\phi_{sc} = 0.64$  quand  $p \rightarrow 0$  :

$$\begin{cases} \phi_s(p)^{2D} = \phi_{sc} + \left(\frac{p}{1.3010^8}\right)^{1/3}, \\ \phi_s(p)^{3D} = \phi_{sc} + \left(\frac{p}{2.7510^{11}}\right)^{1/3}, \end{cases} \quad (4.23)$$

La valeur de  $\phi_{sc} = 0.63 = \phi_s(RCP)$  correspond à la fraction volumique du Random Close Packing (RCP), c'est-à-dire, l'assemblage de sphères rigides le plus dense possible [54] [7].

#### 4.4.4 Limite de sphères dures

Dans notre système de particules "déformables" (selon le concept d'interpénétration), cette limite de sphères est obtenue lorsque la pression s'annule  $p \rightarrow 0$  ; dans nos simulations, ce point critique du RCP ne peut être obtenu que de façon asymptotique. La faible valeur de  $\langle \mathcal{Z}_c$  est très significative et elle devrait être comparée par exemple à 2D à  $\langle \mathcal{Z} \rangle = 6$  pour un arrangement

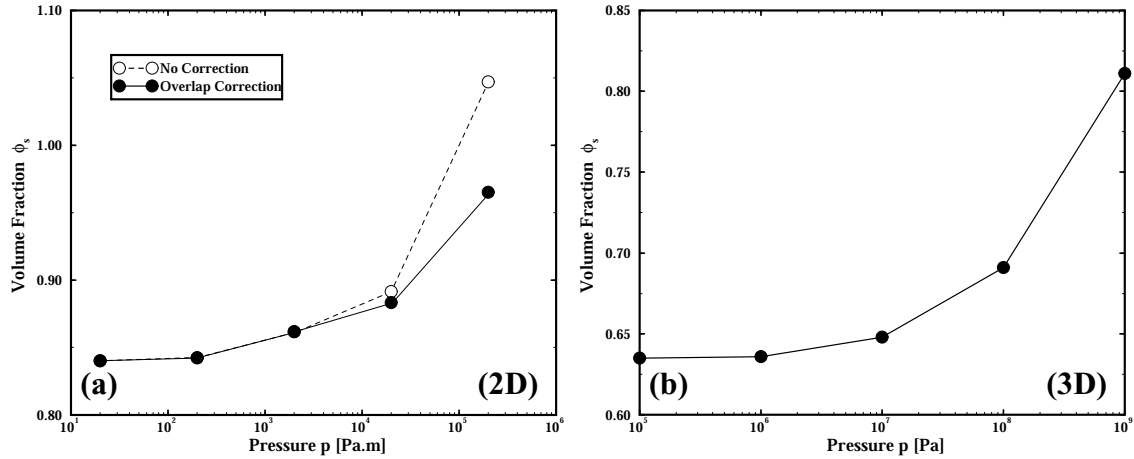


FIG. 4.9 – Evolution de la fraction volumique solide  $\phi_s$  dans les assemblages 2D (à gauche) et 3D (à droite) de sphères non frottantes, équilibrés à des pressions  $p$  croissantes ; à basse pression (limite de sphères rigides),  $\phi_s \rightarrow 0.84$  à 2D et  $\phi_s \rightarrow 0.64$  à 3D.

de type *Hexagonale Compacte*, HCP et à 3D à  $\langle \mathcal{Z} \rangle = 12$  pour un arrangement de type *Cubique Face Centrée*, CFC.

Si nous supposons que toutes les particules ont le même nombre de contacts minimum  $\mathcal{Z}^{(p)} = \mathcal{Z}_c$ , et que nous ne considérons pas une valeur moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  comme dans les résultats de nos simulations, alors les équations relatives à la distribution des contraintes peuvent être résolues sans référence à l'état de déformation du système  $\bar{\epsilon}$ . Nous nous plaçons dans le cadre de la limite isostatique [1], le point de départ des théories récentes de distributions des contraintes dans les assemblages granulaires [51] [150] [14] [23]. Les concepts de "fragilité" et de "rigidité marginales" dépendent de l'existence de cet état minimalement connecté.

Les résultats précédents ont été obtenus avec un système où la friction est inexistante ( $f_t = 0$ ). Des protocoles de préparation similaires pour des grains frottants donnent des agrégats avec des coordinances  $\langle \mathcal{Z} \rangle$  et des fractions volumiques de la phase solide  $\phi_s$  plus faibles. Des arguments similaires à ceux présentés précédemment, donnent  $\mathcal{Z}_c = D + 1$  pour ce cas (voir chapitre 3).

#### 4.4.5 Autre protocole de préparation

Pour tester la robustesse de nos résultats (courbe d'équilibre  $\langle \mathcal{Z} \rangle^{(1)}(p)$ ), nous avons employé un second protocole, dans lequel le système est préparé en compression dès le début au-delà de la limite du Random Close Packing (telle que  $\phi_s(p) > \phi_c^{RCP}$  et dans un deuxième temps, les grains sont libres de se relaxer vers l'équilibre sans avoir recours à un mécanisme de servo-contrôle. L'état final  $\langle \mathcal{Z} \rangle^{(2)}(p)$  est essentiellement identique à celui obtenu par le protocole de préparation précédent (voir figure 4.8).

#### 4.4.6 Distribution des Forces

Dans les matériaux granulaires, des études ont montré que pour les forces de contact  $f_n$  ayant une intensité plus grande que la valeur moyenne  $\langle f_n \rangle$ , la distribution des forces de contact suit une loi exponentielle [4] [109] [124] [97] [13].

D'autre part, les expériences de visualisation photo-élastique, ainsi que les simulations montrent que les forces de contact sont fortement localisées le long de chaîne de forces qui supporte la ma-

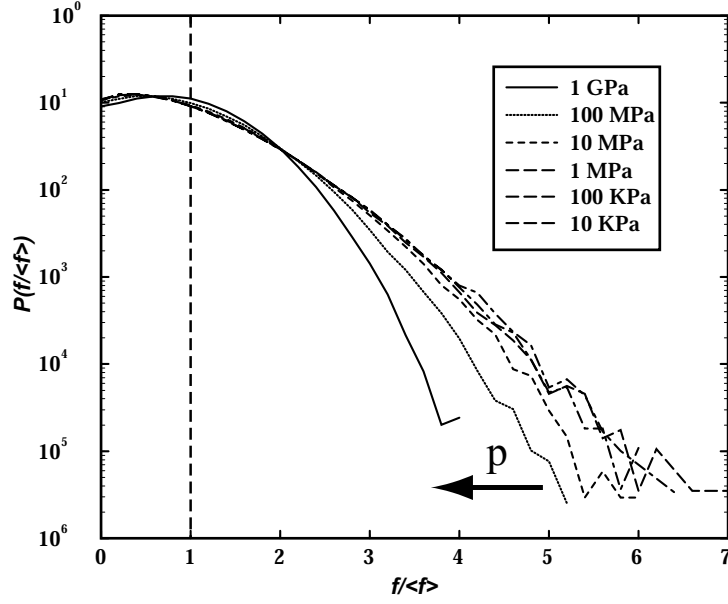


FIG. 4.10 – Distribution des intensités des forces de contact ( $\mathcal{P}(f_n / \langle f_n \rangle)$ ) dans des assemblages 3D sans friction pour différentes pressions (de  $p = 100 \text{ kPa}$  à  $p = 1 \text{ GPa}$ ) ; Pour le protocole de préparation employé, aux faibles pressions, les distributions des intensités des forces de contact fort ( $f_n > \langle f_n \rangle$ ) sont de nature exponentielle alors, qu’aux fortes pressions, on observe une transition vers une forme gaussienne.

jeune partie du chargement appliqué. L’existence des chaînes de forces et des distributions de forces exponentielles seraient intimement liées.

Nous avons analysé ce scénario sur un large intervalle de pression, depuis  $p = 10 \text{ KPa}$  jusqu’à  $p = 1 \text{ GPa}$ .

La figure 4.10, montre la distribution des forces obtenues dans nos simulations ; aux faibles pressions, la distribution est exponentielle en accord avec les expériences et modèles connus. Cependant, lorsque le système est compressé de façon plus importante, nous trouvons une transition graduelle vers une distribution de forces de type gaussienne.

$$\begin{cases} \mathcal{P}(f/\langle f \rangle) = \mathcal{P}(f/\langle f \rangle = 1) e^{\beta(1-f/\langle f \rangle)}, \\ \mathcal{P}(f/\langle f \rangle) \propto e^{-k^2(f-f_0)^2}, \end{cases} \quad (4.24)$$

où  $\beta \approx 2$  pour les distributions exponentielles aux faibles pressions et  $k \approx 0.8$  et  $f_0 \approx 1/2$  pour les distributions gaussiennes aux fortes pressions.

Cette transition a également été observée dans des simulations 3D de compression uniaxiale avec des grains frottants [100], et dans des expériences de compression uniaxiale [100] utilisant la technique du ”papier carbone” [92] [109] (mesure l’intensité des forces à la base d’une colonne par les empreintes des contacts) ; ceci suggère que ce résultat est générique et ne dépend pas qualitativement de l’histoire de la préparation. La transition d’une distribution de forces gaussienne (homogène), vers une distribution de forces exponentielle (hétérogène), serait guidée par la localisation des chaînes de forces lorsque la contrainte appliquée est diminuée ; cette localisation est induite par le désordre dans l’assemblage.

#### 4.4.7 Paramètre d'ordre

Pour quantifier l'ordre dans nos assemblages  $3D$ , nous avons examiné le paramètre d'orientation des contacts  $Q_6$  à  $3D$  défini par Torquato [151] [152], qui est une généralisation à  $3D$  du paramètre  $\Phi_6$  également défini par Torquato [82], et qui trouve son origine dans le paramètre d'ordre d'orientations des interactions  $Q_{lm}$  pour l'étude des liquides et des verres [147]; Chaque contact  $n^{\vec{c}}$  entre deux grains peut être associé à l'harmonique sphérique  $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} P_{lm}(\cos(\theta))$  (où  $P_{lm}(\cos(\theta))$  est le polynôme de Legendre) en utilisant les angles de la direction de contact  $(\theta, \phi)$  par rapport à un référentiel choisi. La fonction  $Q_6$  est alors définie comme :

$$Q_6^g = \left[ \frac{4\pi}{13} \sum_{m=-6}^{+6} |\bar{Y}_{6m}|^2 \right], \quad (4.25)$$

où  $\bar{Y}_{6m}$  correspond à une moyenne sur l'ensemble des contacts. Pour un système complètement désordonné dans la limite d'un système de taille infini,  $Q_6$  est égale à 0, alors que pour cristal de type cubique face centré (CFC),  $Q_6$  atteint sa valeur maximale 0.575 (la limite 1 est atteinte pour un réseau icosahedral parfait).

Par analogie avec le chapitre 3, nous avons recherché à l'aide de la fonction  $Q_6$ , la présence d'ordre dans le système sous la forme de cluster de type *CFC*; Il ne nous a pas été possible de mettre en évidence la présence d'un ordre local, même pour des systèmes préparés avec des distributions de tailles unimodales. En effet, les valeurs calculées pour nos préparations sont de l'ordre de  $Q_6 \approx 10^{-2}$ , ce qui est encore plus faible que les préparations de Torquato  $\approx 10^{-1}$  utilisant l'algorithme de compression de Lubachevsky-Stillinger [95]. Par ailleurs, nous n'avons pas mis en évidence de corrélation entre la valeur du paramètre  $Q_6$ , et la pression  $p$  (et donc avec la fraction solide  $\phi_s$  sur la même gamme [0.64; 0.68]). Ceci tend à montrer que selon notre protocole de préparation, il est très difficile d'observer une organisation collective des grains dans un arrangement tri-dimensionnel, alors que c'était le cas pour les arrangements bi-dimensionnels (voir chapitre 3). Cependant, la quantification de l'ordre orientationnel a été réalisé de façon globale, or on avait vu au chapitre 3, que la façon de calculer le paramètre en réalisant une moyenne locale ou globale pouvait être critique. En effet la décohérence des orientations des "clusters" organisés de particules dans le volume de l'échantillon pouvait sérieusement mettre à défaut la quantification de l'ordre. Il faudrait donc recalculer le paramètre  $Q_6^l$  de façon locale pour s'assurer du très faible degré d'ordre de nos échantillons numériques.

#### 4.4.8 Calcul des modules élastiques

Nous nous concentrons désormais sur le calcul des propriétés élastiques des matériaux granulaires en utilisant les états de références  $\{R\}(p)$  comme points de départ (voir figure 4.7). Considérons le calcul des modules élastiques  $K$  et  $\mu$  du système en fonction de la pression  $p$ . Premièrement nous restaurons la composante transversale des forces de contact en posant  $k_t \neq 0$  et donc  $f_t \neq 0$ . Nous appliquons ensuite une petite perturbation au système et nous mesurons la réponse résultante.

Nous supposons qu'il est peu probable que le glissement puisse avoir lieu aux contacts (seul le glissement total est considéré), étant donné que nous appliquons une déformation infinitésimale  $\Delta\epsilon = \dot{\epsilon}\Delta t$ , cependant nous choisissons une large valeur pour le coefficient de friction  $\mu_f \gg 1$  pour s'assurer qu'aucun contact ne glisse.

Les modules élastiques sont calculés en appliquant une perturbation de déformation affine infinitésimale  $\Delta\epsilon$  selon :

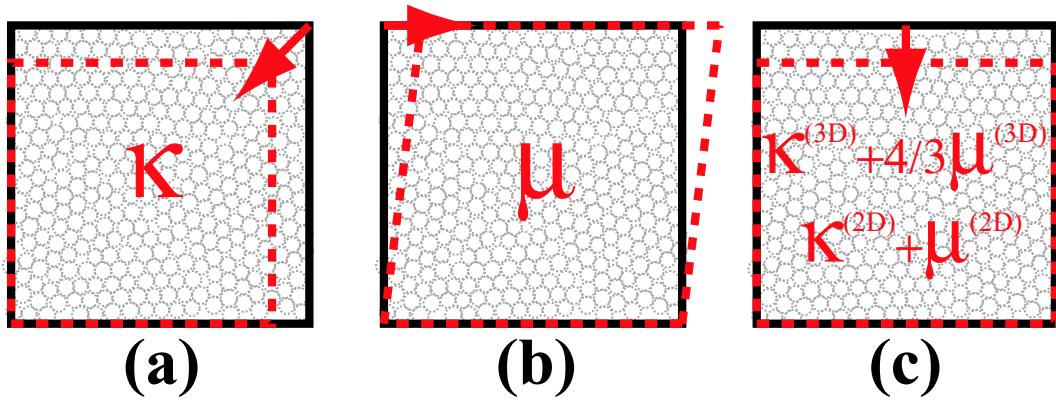


FIG. 4.11 – Calcul des modules élastiques : (a) le module d’incompressibilité  $K$  est obtenu par un test de compression isotrope, (b) le module de cisaillement  $\mu$  est obtenu par un test de cisaillement pur (où par un test biaxial symétrique, non représenté ici), (c) on vérifie la cohérence des calculs par un test de compression uniaxiale qui nous fournit la relation linéaire entre les modules élastique  $K + 4/3\mu$  en  $3D$  et  $K + \mu$  en  $2D$ .

$$\Delta u_i = \dot{\epsilon} x_j \Delta t \quad (4.26)$$

Ensuite, nous suivons la réponse du système au cours du temps en terme des contraintes  $\sigma_{ij}(t)$  correspondantes à la déformation appliquée. Lorsque, après un certain temps, le système atteint finalement un nouvel état d’équilibre, les modules sont obtenus à partir des perturbations des contraintes  $\Delta\sigma_{ij}$  entre les deux états d’équilibre statiques. Ce calcul est répété plusieurs fois pour  $\Delta\epsilon \rightarrow 0$ , afin de s’assurer que nous nous trouvons bien dans le régime de réponse linéaire, c’est-à-dire, lorsque le module élastique devient indépendant de  $\delta\epsilon$ .

Le module de cisaillement  $\mu$  peut être calculé soit à l’aide d’un test de cisaillement pur ( $\Delta\epsilon_{ii} = 0$ ) ou bien alors, à partir d’un test biaxial ( $\Delta\epsilon_{11} = -\Delta\epsilon_{22}$ ,  $\Delta\epsilon_{33} = 0$  et  $\Delta\epsilon_{ij} = 0$ ) :

$$\begin{cases} \mu = \frac{1}{2} \frac{\Delta\sigma_{12}}{\Delta\epsilon_{12}}, & ; \\ \mu = \frac{1}{2} \frac{(\Delta\sigma_{22} - \Delta\sigma_{11})}{(\Delta\epsilon_{22} - \Delta\epsilon_{11})}, & \cdot \end{cases} \quad (4.27)$$

Le module d’incompressibilité  $K$  peut lui être calculé soit à l’aide d’un test de compression hydrostatique ( $\delta\epsilon_{ii} = cst$ ,  $\delta\epsilon_{ij} = 0$ ) :

$$K = \frac{1}{3} \frac{\Delta\sigma_{kk}}{\Delta V}, \quad (4.28)$$

ou bien à l’aide d’un test de compression uniaxial en connaissant  $\mu$  préalablement ( $\Delta\epsilon_{33} \neq 0$ ,  $\Delta\epsilon_{11} = \Delta\epsilon_{22} = 0$  et  $\Delta\epsilon_{ij} = 0$ ) :

$$K + 4/3\mu = \frac{\Delta\sigma_{11}}{\Delta\epsilon_{11}}, \quad (4.29)$$

Les contraintes  $\sigma_{ij}$  sont déterminées à partir des forces de contact  $\vec{f}_n$  et  $\vec{f}_t$  calculées et la déformation  $\epsilon_{ij}$  est déterminée à partir des dimensions imposées à la cellule unité, c’est-à-dire,  $\epsilon = \delta L/L_0$  où  $L_0$  est la dimension de l’état de référence  $R$  du système dans une direction donnée à une pression  $p$ .

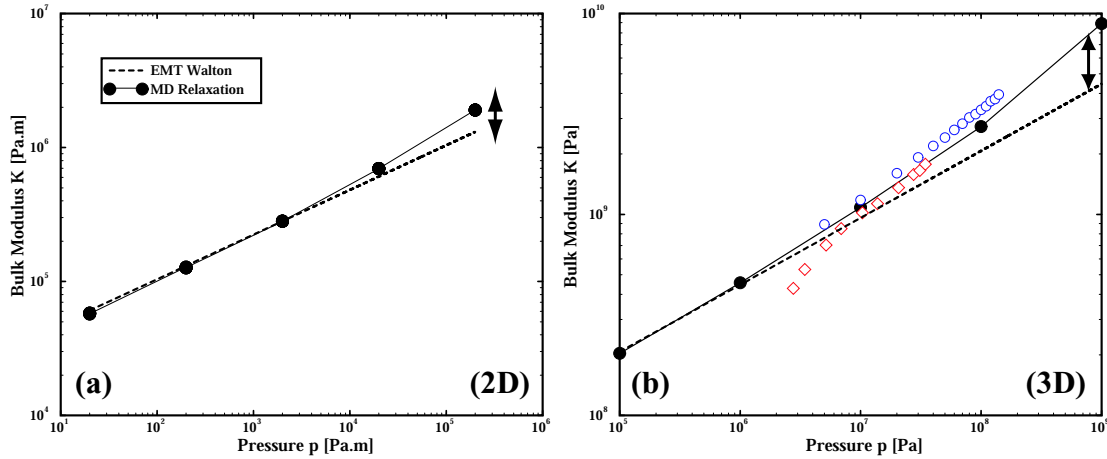


FIG. 4.12 – Evolution du module d’incompressibilité  $K$  dans les assemblages  $2D$  (à gauche) et  $3D$  (à droite) avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (droite en pointillé), nos mesures expérimentales (cercles) ainsi que celles de Domenico (losanges), et les résultats des simulations numériques (cercles pleins); lorsque la pression augmente, la théorie élastique sous-estime la valeur de  $K$  comparée aux valeurs expérimentales et numériques.

#### 4.4.9 Comparaisons : Théorie de Milieu Effectif, expériences, et simulations

##### Dépendance en pression des modules élastiques

Sur les figures 4.12 et 4.13 sont représentées respectivement les évolutions des modules d’incompressibilité et celles des modules de cisaillement pour les trois approches que sont, les prédictions de la Théorie de Milieu Effectif, les mesures expérimentales et les simulations numériques.

Nous voyons que nos résultats numériques et expérimentaux (à  $3D$ ) sont raisonnablement en bon accord.

Les résultats expérimentaux de Domenico [40] sont également montrés sur ces figures. On constate que les résultats expérimentaux sont dispersés aux faibles pressions. Ceci reflète la difficulté des mesures aux faibles pressions sur des matériaux granulaires où il existe une perte significative des signaux (d’où l’utilité d’utiliser des billes de petites tailles pour augmenter la surface de contact entre le matériau et les capteurs); aux pressions plus importantes, nos résultats numériques sont en bon accord avec les mesures expérimentales; numériquement on ne peut jouer sur aucun paramètre pour ajuster les données, étant donné que les constantes élastiques caractérisant le matériau des grains sont données par les propriétés des grains utilisés dans les expériences.

On montre également sur ces figures, les prédictions de la Théorie de Milieu Effectif utilisant les paramètres déterminés à partir des simulations; nous avons choisi les valeurs de ces paramètres dans la limite du Random Close Packing, lorsque  $p \rightarrow 0$ , soit  $\langle \mathcal{Z} \rangle = 4$  à  $2D$ ,  $\langle \mathcal{Z} \rangle = 6$  à  $3D$  et  $\phi_s = 0.84$  à  $2D$ ,  $\phi_s = 0.64$  à  $3D$  [7] sont tous indépendants de la pression (hypothèse incluse dans la Théorie de Milieu Effectif).

Sur les figures 4.12 à  $2D$  et à  $3D$ , nous voyons qu’aux faibles pressions, le module d’incompressibilité  $K$  est bien décrit par la théorie, par contre aux plus fortes pressions, les valeurs expérimentales et numériques de  $K$  augmentent plus rapidement que la dépendance en  $p^{1/3}$ . Sur les figures 4.12 à  $2D$  et à  $3D$ , nous constatons que la situation avec le module de cisaillement  $\mu$  est encore moins satisfaisante; la théorie le surestime aux faibles pressions, et sous-estime son

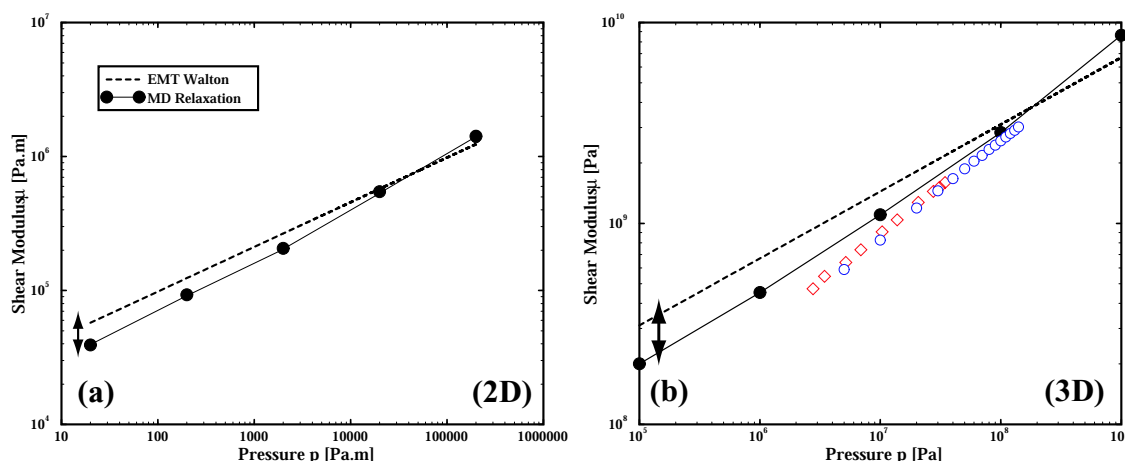


FIG. 4.13 – Evolution du module de cisaillement  $\mu$  dans les assemblages 2D (à gauche) et 3D (à droite) avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (droite en pointillé), nos mesures expérimentales (cercles) ainsi que celles de Domenico (losanges), et les résultats des simulations numériques (cercles pleins), aux faibles pressions, la théorie élastique surestime la valeur de  $\mu$  comparée aux valeurs expérimentales et numériques, et aux fortes pressions, elle la sous-estime.

augmentation avec la pression.

## Corrections de la théorie

### Module d'incompressibilité

Pour trouver l'origine du dysfonctionnement de la Théorie de Milieu Effectif, en ce qui concerne la prédiction de la dépendance correcte des modules élastiques avec la pression, on peut étudier les figures 4.14 et 4.15 qui représentent les valeurs des modules normalisés par le terme de dépendance en pression  $p^{1/3}$ .

Dans une telle représentation, la théorie prédit une valeur constante pour les modules, mais nous voyons sur les figures que les valeurs numériques et expérimentales, elles, augmentent clairement de façon non-linéaire avec la pression.

Il est tentant d'essayer d'ajuster ces données avec une autre loi puissance; cependant, nous devons inclure les lois puissances 4.22 et 4.23 de dépendance de la coordinence  $\langle \mathcal{Z} \rangle(p)$  et de la fraction solide avec la pression  $\phi_s(p)$ . Nous modifions donc les équations 4.10 pour inclure ces dépendances en pression. Modifiant ainsi la Théorie de Milieu Effectif, nous voyons qu'elle prédit désormais la même tendance avec la pression que les simulations. Les valeurs expérimentales semblent également suivre cette tendance mais, plus de données sur une gamme de pressions plus larges, seraient nécessaire pour le confirmer.

Pour le module d'incompressibilité,  $K(p)$  nous trouvons que la théorie modifiée est maintenant en très bon accord avec les simulations numériques et les données expérimentales. Nous pouvons donc penser que la dépendance "anormale" mise en évidence dans les expériences, pourrait être une mesure de la transition de comportement, obtenue en combinant les équations 4.10 et les non-linéarités des équations 4.22 et 4.9, donnant deux régimes de dépendance en pression différents, à savoir :

$$K(p) \sim \mu(p) \sim p^{1/3}, \quad p \ll 10 \text{ MPa} \quad (4.30)$$



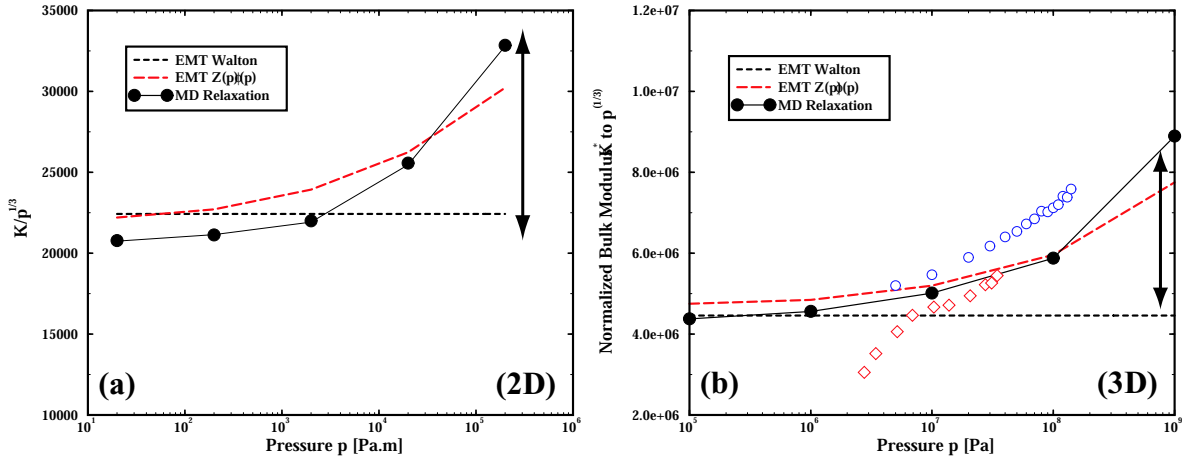


FIG. 4.14 – Evolution du module d’incompressibilité normalisé (par la dépendance de Hertz  $p^{1/3}$ )  $K^*$  dans les assemblages 2D (à gauche) et 3D (à droite) avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (droite en pointillé), nos mesures expérimentales (cercles) ainsi que celles de Domenico (losanges), les résultats des simulations numériques (cercles pleins) et la prédiction de la théorie modifiée (large pointillé) prenant en compte les dépendances  $Z(p)$  (4.22) et  $\phi(p)$  (4.23); la théorie élastique corrigée est essentiellement en bon accord avec les mesures expérimentales et les résultats numériques.

$$K(p) \sim \mu(p) \sim p^{5/9}, \quad , p \gg 10 \text{ MPa} \quad (4.31)$$

Très souvent, compte-tenu des contraintes expérimentales, les expériences sont faites proche de la zone de transition de dépendance en pression vers  $p \approx 10 \text{ MPa}$ ; elles pourraient ainsi mesurer un comportement de transition.

Nous souhaitons attirer l’attention sur le fait que pour des pressions larges (supérieures à quelques dizaines de  $\text{MPa}$ ), la mécanique du contact de Hertz pourrait ne plus fonctionner, étant donné que cette théorie est basée sur de faibles déformations (l’interpénétration est très petite par rapport au rayon des particules,  $w \ll R$ ); la vraie dépendance finale pourrait ne pas être accessible expérimentalement, au moins pour les matériaux utilisés dans cette étude (des billes de verre), et probablement pour les particules qui constituent généralement les formations granulaires réelles (sables).

## Module de cisaillement

Comme le module d’incompressibilité  $K(p)$  est désormais relativement bien décrit par la Théorie de Milieu Effectif modifiée, nous nous concentrons maintenant sur le module de cisaillement  $\mu(p)$ .

Dans la figure 4.15, on observe que si la tendance en pression est bien décrite par la théorie modifiée, aussi bien à 2D qu’à 3D, elle surestime fortement la valeur du module de cisaillement quelque soit la pression. Cette surestimation comme nous le montrerons par la suite, devient prépondérante lorsque l’intensité des forces de frottement diminue ( $k_t \rightarrow 0$ ,  $f_t \rightarrow 0$ ).

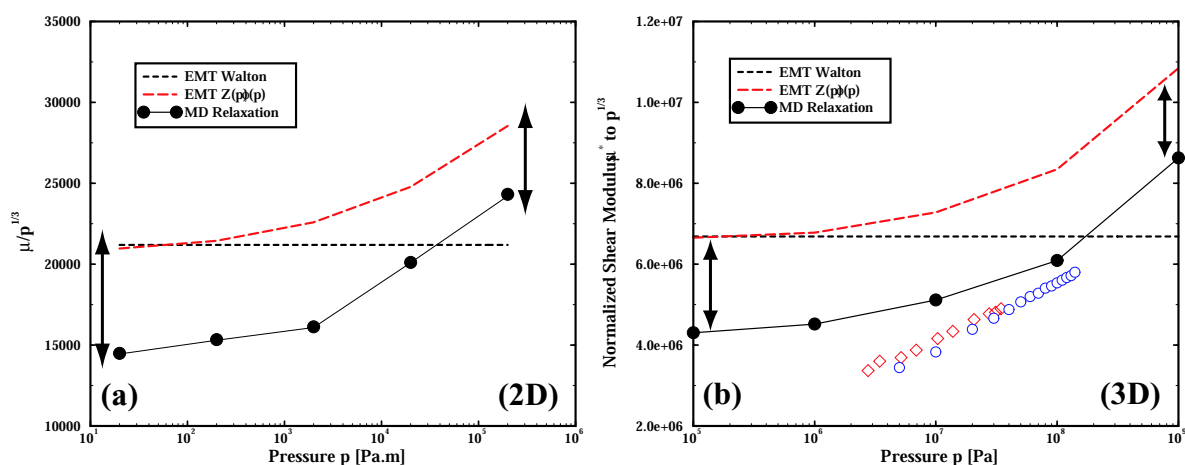


FIG. 4.15 – Evolution du module de cisaillement normalisé (par la dépendance de Hertz  $p^{1/3}$ )  $\mu^*$  dans les assemblages 2D (à gauche) et 3D (à droite) avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (droite en pointillé), nos mesures expérimentales (cercles) ainsi que celles de Domenico (losanges), les résultats des simulations numériques (cercles pleins) et la prédiction de la théorie modifiée (large pointillé) prenant en compte les dépendances  $Z(p)$  (4.22) et  $\phi(p)$  (4.23); la théorie élastique corrigée prédit la bonne dépendance en pression mais sur-estime fortement le module de cisaillement, par rapport aux mesures expérimentales et aux résultats numériques et ceci de façon plus prononcée aux faibles pressions.

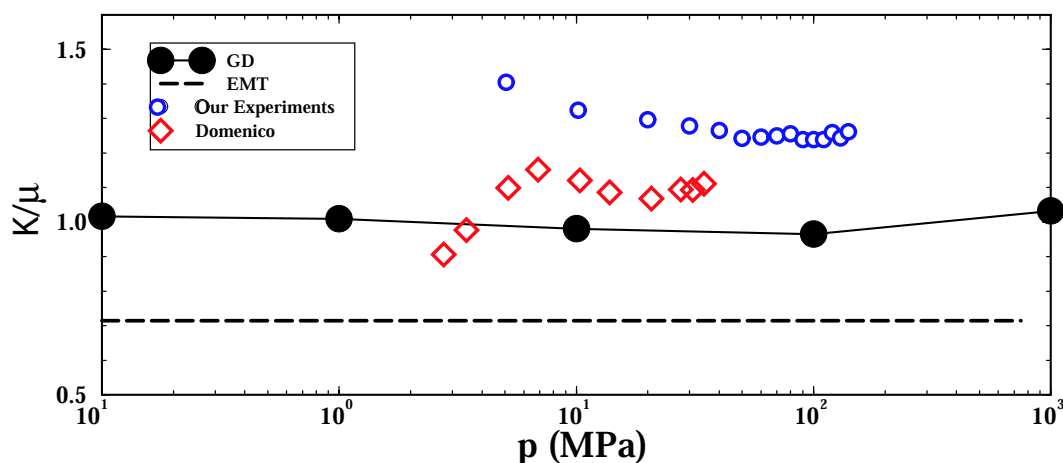


FIG. 4.16 – Désaccord entre la théorie élastique de milieu effectif et les mesures expérimentales et les résultats numériques pour des assemblages 3D mis en évidence par le rapport des modules élastique  $K/\mu$  (en pointillé, la prédiction élastique), en symboles, les mesures expérimentales, en traits et symboles pleins, les résultats numériques).

## Rapport des modules élastiques

Si l'on regarde le rapport des modules élastiques  $K/\mu$  qui est indépendant de la pression dans la théorie, dans les simulations et approximativement dans les expériences comme montré dans la figure 4.16, on remarque que les valeurs du rapport ne concordent pas. Les expériences donnent un rapport  $K/\mu \in [1.1; 1.3]$ , et les simulations un rapport  $K/\mu = 1.05 \pm 0.05$  en relativement bon accord avec les expériences ; les expériences de Domenico semblent donner un meilleur accord, car nos valeurs expérimentale de modules d'incompressibilité sont un peu plus fortes, et celles de modules de cisaillement un peu plus faibles. Pour les mesures expérimentales, la variabilité aux faibles pressions peut refléter la difficulté de propager une onde dans un matériau granulaire aux faibles pressions de confinement.

D'autre part, si on calcule le coefficient de Poisson effectif des assemblages (non présenté), on remarque que celui des simulations  $\nu_{MD} \approx 0.27$  est en excellent accord avec celui des expériences  $\nu_{EXP} \approx 0.28$ , mais diffère fortement de la prédiction théorique  $\nu_e = 0.02$ .

### 4.4.10 Rôle des forces transversales et des rotations

Pour comprendre pourquoi la Théorie de Milieu Effectif surestime le module de cisaillement  $\mu$ , nous examinons le rôle des forces transversales  $\vec{f}_t$ , et donc le rôle des rotations  $\vec{\theta}$  dans le processus de relaxation des grains. Ces effets ne jouent vraisemblablement aucun de rôle dans le calcul du module d'incompressibilité  $K$  (voir figure 4.14). Selon la théorie, la force transversale  $\vec{f}_t$  contribue uniquement au module de cisaillement (seul  $\mu_e \propto k_t$ ). Dans ces conditions, nous avons de bonnes raisons d'examiner le comportement de  $\mu$  en fonction de l'intensité de la force transversale, donc en fonction de la raideur tangentielle  $k_t$  ; nous remplaçons donc la raideur  $k_t$  dans l'équation 4.10 de la Théorie de Milieu Effectif par  $\alpha k_t$ , et nous redéfinissons la force transversale dans les simulations comme :

$$\Delta f_t = \alpha k_t (\bar{R}w)^{1/2} \Delta s, \quad (4.32)$$

où  $\alpha = 0$  est approprié pour un contact non frottant (glissement parfait), alors que  $\alpha = 1$  décrit le résultat purement frictionnel et correspondant aux résultats décrits jusqu'à présent.

Pour quantifier le rôle de la force transversale sur les modules élastiques, nous calculons  $K(\alpha)$  et  $\mu(\alpha)$  en faisant varier  $\alpha$  de 0 à 1 pour une pression donnée de  $p = 100, kPa$ .

Les résultats obtenus par les simulations numériques sont représentés sur la figure 4.17. Pour les comparer avec la Théorie de Milieu Effectif, nous montrons également les prédictions de la théorie où  $k_t$  serait normalisé par  $\alpha k_t$ . Ces simulations confirment que le module d'incompressibilité  $K$  est essentiellement indépendant de l'intensité des forces transversales ; la théorie prédit une ligne horizontale puisque  $K$  n'y est fonction que de la raideur normale  $k_n$  (équation 4.10), ce qui est confirmé par les résultats numériques.

Le module de cisaillement  $\mu$  est lui très sensible à la force transversale ; dans le cas de particules non frottantes, lorsque  $\alpha \rightarrow 0$ , il devient très petit en comparaison de la valeur prédite par l'EMT ; la Théorie de Milieu Effectif n'est pas en mesure de rendre compte de cette décroissance importante du module de cisaillement. Nous allons donc nous intéresser au processus de relaxation des contraintes dans le matériau granulaire, et aux conséquences des déplacements et réarrangements des grains qui ne suivent pas le champ de déformation de nature affine, dû au désordre de l'assemblage.

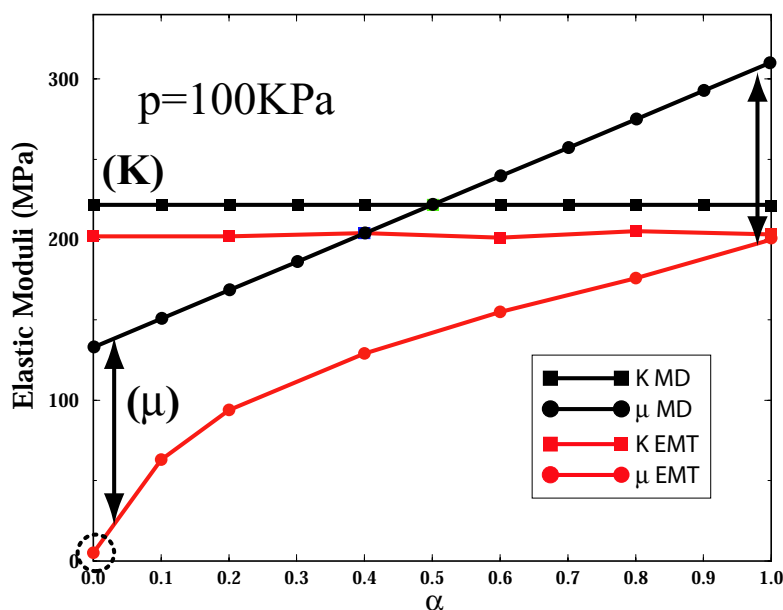


FIG. 4.17 – Prédictions théoriques de l'évolution des modules élastiques  $K_{EMT}$  et  $\mu_{EMT}$  en fonction de l'intensité de la force transversale  $f_t = \alpha f_t^H$  avec  $\alpha \in [0; 1]$ , et des résultats numériques issus des simulations de Dynamique Moléculaire  $K_{MD}$  et  $\mu_{MD}$ ; le module d'incompressibilité  $K$  est bien décrit par la théorie, quelque soit  $\alpha$ ; le module de cisaillement  $\mu$  par contre est surestimé, et de façon beaucoup plus prononcée lorsque  $\alpha \leftarrow 0$ , c'est-à-dire que le rapport  $\mu_e/\mu_{GD}$  croît de façon très importante lorsque  $\alpha \rightarrow 1$

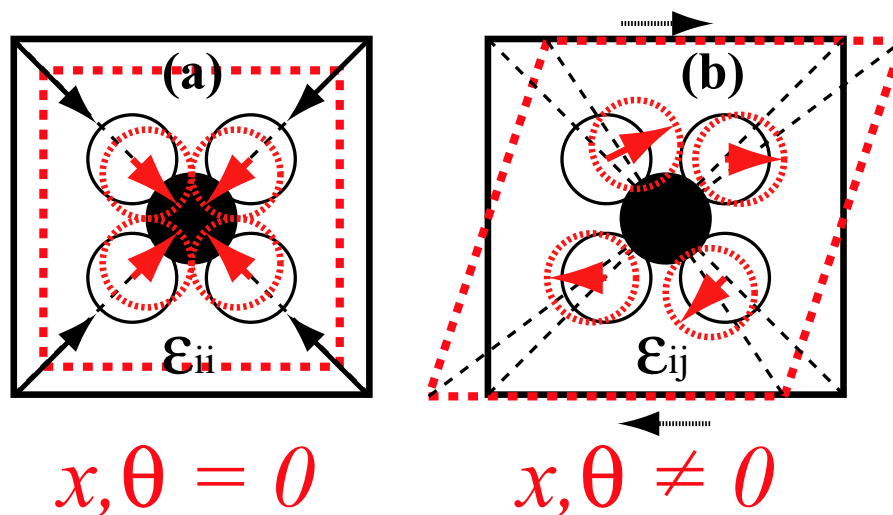


FIG. 4.18 – Evolution temporelle de l'état de contrainte, vu par l'évolution temporelle des forces de contact : (a) le système granulaire subit une déformation compressive isotrope  $\epsilon_{ii}$ , le champ de déformation (déplacement des particules) est compatible avec l'approximation affine, car les forces et les moments s'équilibrent sur chaque grain ; (b) le système granulaire subit une déformation cisailante  $\epsilon_{ij}$ , le champ de déformation est cette fois incompatible avec l'approximation affine, car les forces et les moments sur chaque grain ne s'équilibrent plus, donnant lieu à des réarrangements de grains, se traduisant par une relaxation des contraintes.

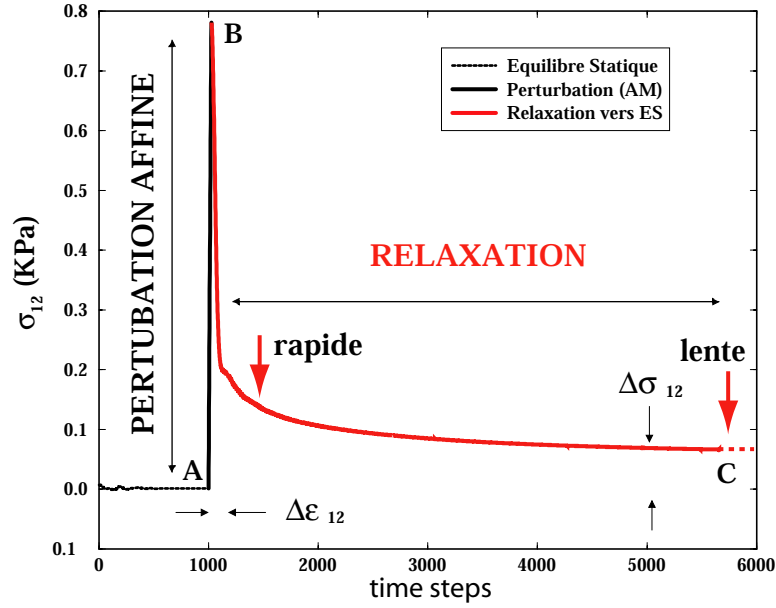


FIG. 4.19 – Evolution temporelle de la composante cisailante du tenseur des contraintes  $\Delta\sigma_{12}(t)$ , après une déformation cisailante infinitésimale instantanée  $\Delta\epsilon_{12}$ ; à la suite de la perturbation, le système relaxe vers un nouvel équilibre :  $\Delta\sigma_{12}(t = 0) = \Delta\sigma_{12}^{A \rightarrow B}$  et  $\Delta\sigma_{12}(t \rightarrow \infty) = \Delta\sigma_{12}^C$ ; on observe deux régimes de relaxation : la relaxation est d’abord très rapide, puis ensuite très lente.

#### 4.4.11 Rôle de la relaxation et du désordre

Dans la Théorie de Milieu Effectif, si une perturbation affine de la forme de l’équation 4.26 est appliquée au système, les grains seront toujours à l’équilibre de par l’hypothèse de distribution isotrope des contacts; aucune relaxation n’est nécessaire et la réponse du matériau est alors purement élastique.

Ce n’est pas le cas dans les simulations de dynamique moléculaire (et dans les systèmes réels à fortiori); à la suite de l’application d’une perturbation affine, les grains se réarrangent localement dans leur voisinage; ils se déplacent et s’éloignent de la position initiale fixée par la déformation affine et appliquée à chaque grain; relativement les uns aux autres, ils se réarrangent pour trouver une nouvelle position d’équilibre impliquant mouvements de translation et de rotation (dans un système frictionnel) (voir figure 4.18); ces réarrangements de grains sont directement associés à la relaxation des contraintes.

La figure 4.19 montre le comportement de  $\sigma_{12}(t)$  pour un système sous une pression de  $p = 100 \text{ KPa}$ , où l’intensité des forces transversales (c’est-à-dire  $k_t$ ) a été normalisée par  $\alpha = 0.2$  pendant, et après l’application de la perturbation de déformation affine  $\Delta\epsilon_{12}(t = 0)$ , qui déplace tous les grains en accord avec le taux de déformation macroscopique  $\dot{\epsilon}_{12}$ .

Il est évident que le système se comporte comme un milieu solide visco-élastique, comme nous l’avons expliqué dans ce chapitre. Lorsque la déformation affine est appliquée  $\Delta\epsilon_{12}$ , la contrainte cisailante  $\sigma_{12}$  augmente, et les grains sont loin de l’équilibre, étant donné, la configuration désordonnée du système; ceci correspond à la réponse élastique instantanée  $\sigma_{12}(t = 0)$ . Les grains se déplacent ensuite progressivement vers une nouvelle position d’équilibre. Une fois que cet état d’équilibre a été atteint pour l’ensemble du système (en théorie lorsque  $\sigma_{12}(t \rightarrow \infty)$ , numériquement, après un certain nombre de cycles, l’état de contrainte n’évolue pratiquement plus), nous mesurons le changement résultant en contrainte  $\Delta\sigma_{12}$  à partir duquel les modules

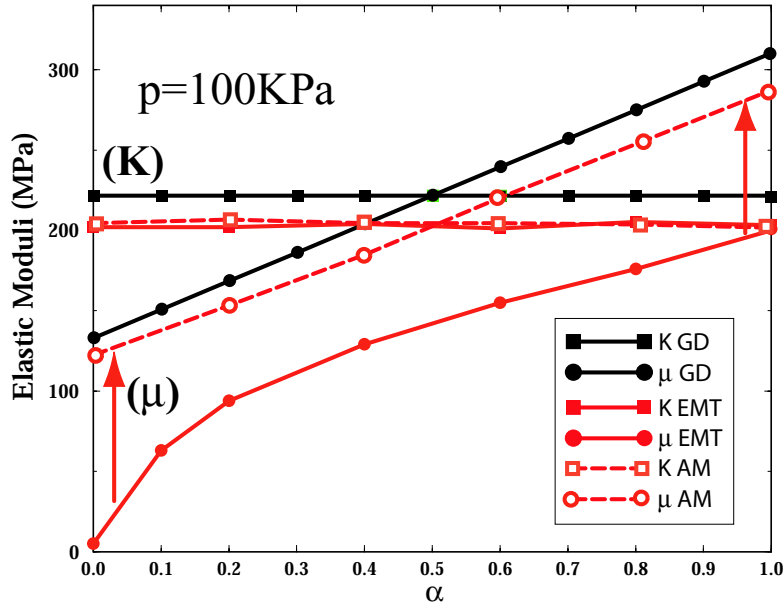


FIG. 4.20 – Prédiction théorique de l'évolution des modules élastiques  $K$   $\mu$  en fonction de l'intensité de la force transversale  $f_t = \alpha f_t^H$  avec  $\alpha \in [0; 1]$ , et des résultats numériques correspondants dans le cadre de l'approximation affine (c'est-à-dire, pas de rééquilibrage consécutif à la déformation) ; le module d'incompressibilité  $K$  reste inchangé (bien décrit par la théorie) et le module de cisaillement  $\mu$  est maintenant lui aussi bien prédit quelque soit  $\alpha$ .

sont calculés.

#### 4.4.12 Modules purement élastiques

Supposons maintenant, que l'on répète les calculs de modules élastiques en ne prenant en compte que le déplacement instantané de la perturbation affine, et on ignore donc la relaxation consécutive. Les modules élastiques qui résultent de cette hypothèse sont obtenus comme  $K^{AM} = \frac{1}{3} \frac{\Delta \sigma_{kk}^{AM}}{\Delta V}$  et  $\mu^{AM} = \Delta \sigma_{12}^{AM} / \delta \epsilon_{12}^{AM}$ .

Dans la figure 4.20 nous représentons les modules calculés de cette façon pour  $p = 100 \text{ KPa}$  comme fonction de  $\alpha$ . Nous voyons que les modules issus des déplacements instantanés (Affine Motion) sont maintenant très proches de la prédiction de la théorie ; Il reste environ un écart de l'ordre de 10% pour cent, qui est représentatif du désordre de l'assemblage dans les simulations alors qu'on a vu que la théorie élastique supposait des directions de contacts équiprobables.

Ainsi, la différence entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux et numériques pour le module de cisaillement  $\mu$ , repose essentiellement sur la relaxation non affine des grains ; cette différence est d'autant plus importante que les forces transversales sont de faibles intensités. Par contraste, la relaxation des grains après une perturbation affine en compression, n'est pas particulièrement significative, et la prédiction de la théorie pour le module d'incompressibilité  $K$  est correcte.

Sur les figures 4.21 et 4.22, on représente respectivement les modules élastiques  $K$  et  $\mu$  et les mêmes modules normalisés  $K^*$  et  $\mu^*$  (par  $p^{1/3}$ ) en fonction de la pression  $p$  ; on constate comme on pouvait s'y attendre, que le module d'incompressibilité  $K$  est bien décrit par la Théorie de Milieu Effectif (corrigée), quelque soit la pression ; le module de cisaillement, lorsqu'il est calculé sur la base de la déformation affine est compatible avec la Théorie de Milieu Effectif à toutes les

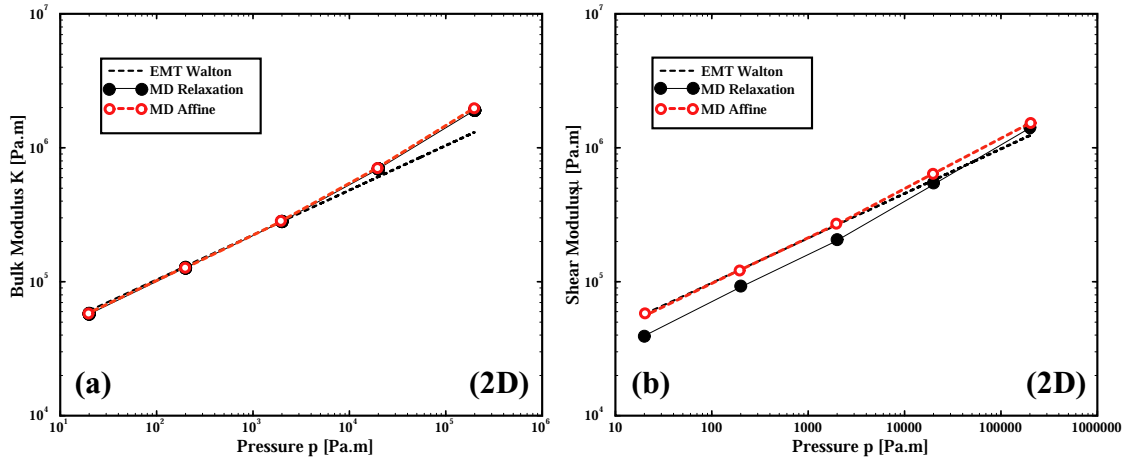


FIG. 4.21 – Evolution des modules élastiques  $K$  et  $\mu$  dans les assemblages 2D (en haut) avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (non corrigée de la dépendance en pression de la coordinence et de la fraction solide) (droite en pointillé), les résultats des simulations numériques avec relaxation (cercles pleins noirs) et sans relaxation (cercles rouges); A toutes les pressions, on observe le phénomène de relaxation des contraintes pour le module de cisaillement.

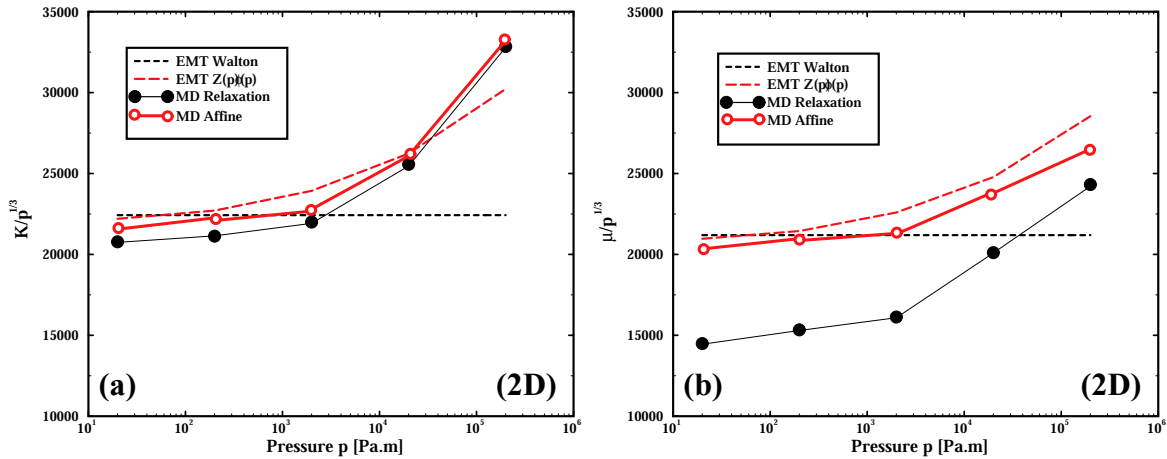


FIG. 4.22 – Evolution des modules élastiques normalisés (par la dépendance de Hertz  $p^{1/3}$ )  $\mu^*$  dans les assemblages 2D avec la pression  $p$ ; on superpose la prédiction de la théorie élastique de milieu effectif (droite en pointillé) et corrigée de la dépendance en pression de la coordinence et de la fraction solide (droite en pointillé), les résultats des simulations numériques (cercles pleins noirs) avec et sans relaxation (cercles rouges). Globalement à toutes les pressions, le module de cisaillement calculé à partir de la perturbation affine, est en accord avec la prédiction de la Théorie de Milieu Effectif corrigée de la dépendance en pression de la coordinence moyenne et de la fraction solide.

pressions mais cette hypothèse n'est pas vérifiée, car on constate que les processus de relaxation interviennent à toutes les pressions.

## 4.5 Conclusions et perspectives

Nos simulations de dynamique moléculaire en géométrie bi-dimensionnelle et tri-dimensionnelle sont en bon accord avec les données expérimentales sur la dépendance en pression des modules élastiques des assemblages granulaires. Elles servent également à clarifier le désaccord avec la Théorie de Milieu Effectif. La relaxation des grains après une déformation affine infinitésimale est une composante essentielle du module de cisaillement mais pas du module d'incompressibilité et cette relaxation n'est pas prise en compte dans l'EMT.

A partir de ces résultats, nous voyons qu'il a un réel besoin d'un nouveau cadre théorique pour décrire la relaxation collective des matériaux granulaires et spécialement pour le cas du cisaillement de ces matériaux, et plus particulièrement lorsque la friction est faible.

Nous avons vu qu'il est impossible de définir un champ de déformation dans un matériau granulaire, car elle est inhomogène à l'échelle des grains ; c'est la racine du problème à laquelle est confrontée la Théorie élastique de Milieu Effectif, car l'approche élastique repose sur l'hypothèse d'un champ de déformation uniforme à toutes les échelles.

Des théories alternatives ont été proposées récemment sur la transmission des contraintes dans les assemblages granulaires ; les contraintes internes y sont décrites sans avoir recours à l'utilisation des variables de déformation, comme c'est le cas dans la théorie élastique. Une nouvelle relation de clôture entre les composantes du tenseur des contraintes, et non plus entre la contrainte et la déformation, est proposée pour résoudre l'indétermination des systèmes granulaires. La validité de ces relations de clôture est toujours une question de débat, même si certaines expériences récentes sur la mesure de la fonction-réponse d'un milieu granulaire (fonction de Green), suggèrent que le cadre de l'élasticité pourrait être l'approche correcte aux larges échelles. Nous étudierons ce problème de plus près dans le prochain chapitre.

Dans le cas de relaxations collectives dynamiques, nos résultats montrent que la formulation élastique est fautive dans la description de la réponse des matériaux granulaires au cisaillement. L'assemblage de particules répond instantanément à un chargement externe, isotrope avec une déformation élastique et un module d'incompressibilité  $K$  fini, étant donné que la perturbation externe est incompatible avec les axes principaux des contraintes prédéterminés par l'histoire de la préparation de l'échantillon. Par contre, il ne peut pas supporter un chargement en cisaillement sans des réarrangements significatifs. Ainsi, le système granulaire ne peut être considéré élastique, que dans la mesure où les perturbations imposées sont compatibles avec la structure des chaînes de forces ; dans le cas contraire, il se déforme irréversiblement.





# Fonction Réponse de matériaux granulaires sous contrainte

## Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Introduction à la statique des matériaux granulaires . . . . .</b>	<b>137</b>
5.1.1	L'approche élastoplastique de la mécanique des sols . . . . .	137
5.1.2	Des expériences à l'échelle macroscopique . . . . .	138
5.1.3	L'échelle microscopique et les chaînes de forces . . . . .	140
5.1.4	Les modèles granulaires . . . . .	141
5.1.5	Confrontations des nouveaux modèles à l'approche élastoplastique .	144
5.1.6	Le test de la fonction réponse . . . . .	144
<b>5.2</b>	<b>Etude numérique de la fonction réponse . . . . .</b>	<b>146</b>
5.2.1	Présentation des simulations . . . . .	146
5.2.2	Propagation de la perturbation . . . . .	150
5.2.3	Vers la relaxation complète . . . . .	155
5.2.4	Comparaison avec l'élasticité . . . . .	158
5.2.5	Comparaison de la réponse statique et de la réponse dynamique . .	165
5.2.6	Dépendance de la largeur des profils avec la profondeur . . . . .	166
5.2.7	Dépendance en pression de la fonction réponse . . . . .	172
5.2.8	Fonction réponse à friction nulle . . . . .	173
<b>5.3</b>	<b>Conclusions . . . . .</b>	<b>174</b>

---

## 5.1 Introduction à la statique des matériaux granulaires

### 5.1.1 L'approche élastoplastique de la mécanique des sols

Les matériaux granulaires sont soumis comme les autres matériaux au principe fondamental de la dynamique ; en terme de contrainte, la relation qui décrit l'équilibre du matériau est  $\vec{div}\vec{\sigma} = \rho\vec{g}$  ; dans un problème bidimensionnel, nous avons alors un jeu de deux équations pour résoudre trois composantes indépendantes du tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  ; la troisième relation qui permet de clore le système d'équations caractérise le comportement du matériau ; en élasticité isotrope linéaire, c'est la loi de Hooke qui est utilisée. Les comportements des matériaux granulaires sont complexes comme peut l'illustrer l'étude présentée au chapitre précédent ; il n'a pas été identifié

encore aujourd'hui de loi universellement reconnue pour les milieux granulaires qui dicterait leurs comportements, étant donné un jeu de paramètres le caractérisant.

En mécanique des sols, pour déterminer la loi de comportement d'un matériau granulaire, on le soumet généralement à un ensemble de tests mécaniques parfois destructeur ; le plus classique de ces tests est le test de chargement triaxiale ; au terme de ces essais mécaniques, ce n'est pas une seule loi de comportement, mais un ensemble de lois qui vont caractériser les différents régimes de comportement du matériau granulaire au cours de son chargement, depuis un comportement initial élastique (réversible) vers un régime de déformation plastique lorsqu'il existe, décrit par un critère de rupture et une loi d'écoulement ; un matériau granulaire voit ses lois de comportement évoluer lorsqu'il subit des déformations plastiques ; le matériau granulaire a donc un comportement irréversible et son comportement dépend fortement des déformations antérieures ; cette modification irréversible du comportement du matériau s'appelle l'écrouissage. Si en plus, le matériau granulaire possède une anisotropie (directions privilégiées de comportement), alors les modèles élastoplastiques peuvent devenir terriblement complexes et il faut avoir recours à l'outil numérique (éléments finis) pour résoudre même un problème simple, comme trouver le profil de pression sous un tas de sable. Il faudra décrire numériquement de façon incrémentale la succession de processus de construction du tas.

Donc les lois de comportement sont déterminées de telle façon, qu'elles doivent décrire de la façon la plus fidèle, les résultats des tests mécaniques expérimentaux ; si le comportement du matériau à l'échelle macroscopique est relativement bien décrit ; la connaissance des processus microscopiques qui sont à l'origine du comportement macroscopique n'existe pas ; on ne sait pas comment par exemple, la polydispersité des grains va influencer le comportement du matériau (voir le Chapitre 3), ni comment autre exemple, la friction entre les grains peut également dicter son comportement (voir le Chapitre 4).

Le passage micro-macro est donc laissé de côté dans l'approche élastoplastique de la mécanique des sols. Il y a là un manque de justification microscopique des lois de comportement.

Nous allons maintenant présenter des expériences simples sur des milieux granulaires : le tas de sable et le silo. Les résultats sont simples et mettent l'accent sur l'insuffisance des modèles élastoplastiques.

Par ailleurs, au cours de la période récente, différentes techniques ont permis d'observer à l'échelle microscopique, les forces de contact dans les matériaux granulaires, expérimentalement par photoélasticimétrie par exemple et numériquement par les simulations de dynamique moléculaire ; ces études ont permis de mettre en évidence la forte hétérogénéité spatiale des forces de contact s'organisant selon des 'chaînes de forces'. Ce sont ces observations qui sont à l'origine des développements de nouvelles formulations mécaniques pour les matériaux granulaires (remise en cause du régime linéaire même aux très faibles déformations).

## 5.1.2 Des expériences à l'échelle macroscopique

### L'expérience du trou du Tas

Sur la figure 5.1 on présente deux modes de préparation d'un tas granulaire, par point source ou bien par pluviation et les profils de pressions à la base des tas sont mesurés ; le résultat peu intuitif de cette expérience est que, lorsque le tas est préparé à partir d'un point source, on observe un minimum de pression sous le centre du tas alors que c'est là que l'on s'attendrait à trouver, selon une approche élastique isotrope classique, un maximum de pression. De façon également surprenante, lorsque le tas est préparé par pluviation, ce n'est plus un minimum local mais un plateau de pression qui est observé. La préparation, et donc l'histoire de construction du

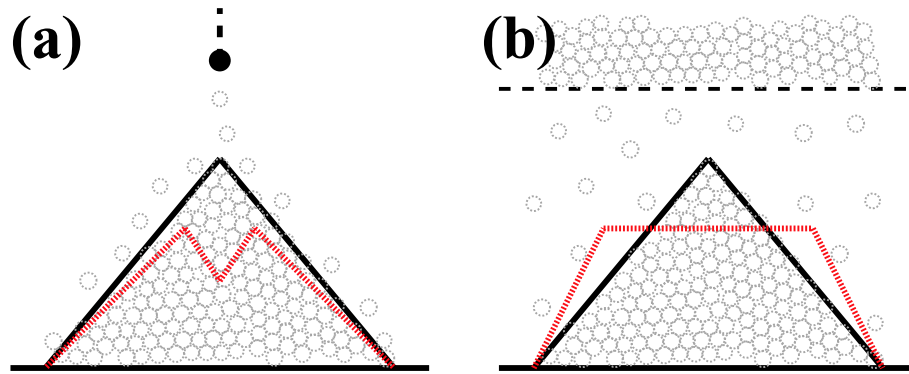


FIG. 5.1 – Tas granulaires obtenus par deux modes de construction différents et profils de pression mesurés à la base : (a) les grains sont lâchés à partir d'un point source, le tas se forme par avalanches successives, et le profil de pression présente un creux central ; (b) une pluie homogène de grains permet d'obtenir le même tas, mais cette fois le creux a disparu au profit d'un plateau.

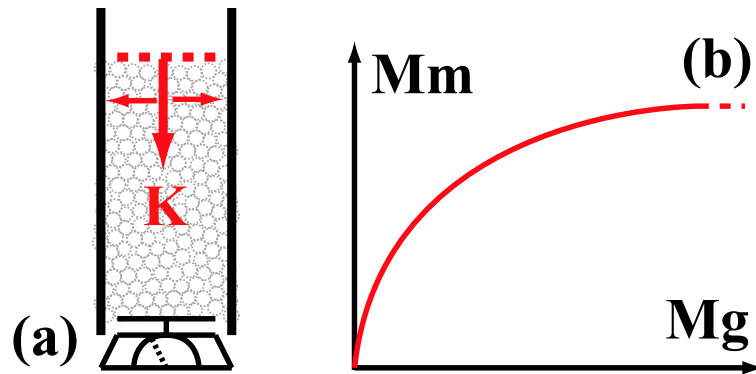


FIG. 5.2 – Remplissage d'une colonne par un matériau granulaire ; la masse lue sur la balance dévie de la masse réelle déposée dans la colonne, puis sature ; la friction aux parois supporterait l'écart de charge.

tas met en jeu des processus qui déterminent de façon fondamentale les propriétés ultérieures du tas à l'état statique. C'est la mise en évidence de la nature incrémentale des lois de comportement élastoplastiques.

Si l'élasticité isotrope n'est pas capable de reproduire ce profil de pression, en revanche l'élasticité anisotrope permet d'ajuster les solutions théoriques aux résultats expérimentaux. Encore faudrait-il pouvoir justifier au niveau microscopique la complexité de l'anisotropie nécessaire pour reproduire la réponse mécanique d'une expérience pourtant très simple.

### Le problème du silo

Le problème du silo se présente de la façon suivante ; on remplit progressivement une colonne par un matériau granulaire et on mesure la masse des grains sur le fond ; on s'attendrait à voir évoluer linéairement la masse mesurée avec la masse déversée dans le silo ; le comportement surprenant qui est mis en évidence dans cette expérience est le suivant : au cours du remplissage la masse mesurée sur le fond va saturer rapidement quelque soit la masse déversée dans le silo ; il y a donc là un effet d'écrantage de la masse réelle. Une interprétation simple de ce phénomène est fondée sur la redirection des contraintes verticales dans le plan transverse ; il convient alors

d'introduire une relation de proportionnalité entre les contraintes verticales et les contraintes horizontales ; la relation de Janssen traduit cette redirection comme  $\sigma_{11} = K\sigma_{22}$  où  $K$  est la constante de Janssen. Dans ce modèle, ce sont les parois qui encaissent le poids des couches granulaires et qui assurent l'écrantage de la masse. Bien que ce modèle s'ajuste bien aux résultats expérimentaux, il y a une hypothèse forte, qui consiste à supposer que les forces de friction aux parois, sont exactement sur le bord du cône de Coulomb. La question importante soulevée à nouveau par ce résultat expérimental est de savoir, s'il faut y voir la manifestation mécanique des chaînes de forces dans le comportement macroscopique du matériau.

### 5.1.3 L'échelle microscopique et les chaînes de forces

Si les expériences présentées précédemment fournissent des résultats étonnants à l'échelle des milieux continus, c'est-à-dire que les mesures effectuées proviennent de la moyenne sur un grand nombre de grains, d'autres expériences en revanche mettent en évidence des phénomènes tout aussi étonnants à l'échelle microscopique des grains et des contacts ; ces observations ont montré l'existence d'une organisation très particulière des forces de contact selon un réseau inhomogène.

On définit la biréfringence comme le fait de transmettre deux rayons distincts polarisés dans deux plans perpendiculaires, et qui se propagent dans le cristal à des vitesses différentes. Certaines matières présentent ce phénomène lorsqu'elles sont soumises à des contraintes. C'est cette propriété qui est utilisée en photoélasticimétrie pour mesurer les contraintes apparaissant dans un modèle. Dans les expériences, on utilise donc des grains photoélastiques qui ont cette propriété d'avoir leur *luminosité* corrélée aux contraintes locales auxquelles ils sont soumis. Si on prend un assemblage de grains que l'on confine, alors on voit apparaître une structuration particulière ; la lumière qui traverse le matériau granulaire est transmise à des vitesses différentes au niveau de chaque grain, et ceci montre que les forces de contact sont très inhomogènes. La charge appliquée au matériau est supportée par un faible nombre de grains qui forment des chaînes de forces ; on peut observer que ces chaînes de forces forment des structures cellulaires, dont la taille moyenne est de l'ordre de quelques tailles de grains.

Etant donné la structure très inhomogène des forces de contact, il est intéressant de caractériser leurs distributions ; pour ce faire, on peut utiliser des expériences de *papier carbone* ou bien des simulations numériques pour mesurer les intensités des forces de contact. On montre alors que les fluctuations des intensités des forces de contact sont de l'ordre de grandeur de la force moyenne. Il a ainsi été montré que ces forces ont une distribution exponentielle, donc hétérogène ; il a également été montré une transition de la distribution des forces, depuis une loi exponentielle vers une loi gaussienne lorsque augmente le chargement du système, et la distribution tend donc à s'homogénéiser.

Dans un matériau élastique homogène, la contrainte est répartie de façon régulière, contrairement à ce que l'on observe dans un matériau granulaire. On peut donc se demander si cette structuration inhomogène de la distribution des contraintes est incompatible avec une théorie élastique pour décrire le comportement macroscopique du matériau. Soit ces chaînes de forces sont à l'origine des comportements étonnants des matériaux granulaires par redirection des charges du centre vers les côtés dans le cas du trou du tas et du problème du silo entraînant le phénomène d'écrantage, soit elles ne sont qu'une curiosité microscopique et lorsqu'elles sont moyennées sur un volume macroscopique, leur existence n'est plus aussi importante. Il y a donc une perspective intéressante ; les matériaux granulaires pourraient obéir à des lois de comportement mécanique différentes de l'élasticité, et qui seraient la conséquence de l'existence des chaînes de forces.

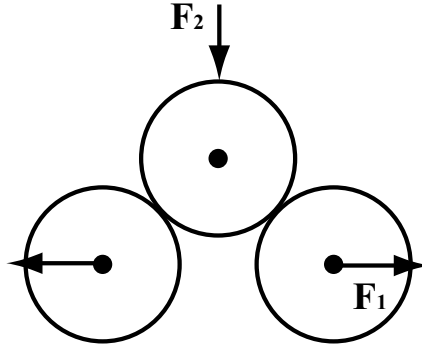


FIG. 5.3 – Retransmission d’une force verticale dans la direction horizontale dans un matériau granulaire; ce concept est à l’origine du développement des modèles propagatifs.

#### 5.1.4 Les modèles granulaires

Les résultats expérimentaux que l’on a présentés sont a priori incompatibles avec une théorie simple élastoplastique standard qui par ailleurs ne s’intéresse pas aux caractères microscopiques des matériaux granulaires; l’évidence expérimentale et numérique de la forte hétérogénéité spatiale des forces de contact s’organisant selon des ‘chaînes de forces’ est à l’origine des développements de nouvelles formulations mécaniques pour les matériaux granulaires [14].

De façon générale, les lois de la mécanique sont reformulées plus simplement que la théorie élastoplastique. Il y a aussi le problème de la définition à l’échelle macroscopique des déformations  $\bar{\epsilon}$  dans les milieux discrets; dans ces conditions, elles pourraient ne pas être importantes pour décrire le comportement d’un matériau granulaire et on pourrait reformuler les lois sans les prendre en compte; dans ce cas pour clore le problème, il faut proposer de nouvelles hypothèses; ce sont ces relations de clôture qui s’inspirent des observations des chaînes de forces et des phénomènes de redirection des contraintes. La loi de Hooke reliant contraintes et déformations est abandonnée au profit de nouvelles lois qui ne prennent pas en compte les déformations.

#### Les Modèles propagatifs

On reprend les équations d’équilibre des contraintes :

$$\text{div} \vec{\sigma} = \rho \vec{g}, \quad (5.1)$$

On avait vu qu’elles étaient insuffisantes pour décrire le matériau et qu’il fallait apporter une autre relation traduisant les caractéristiques mécaniques du matériau considéré. Les nouveaux modèles granulaires proposent des relations mettant en jeu uniquement les composantes du tenseur des contraintes sans faire apparaître le concept de déformation (par rapport aux équations constitutives de la mécanique traditionnelle).

**Equations hyperboliques et modèles BCC et O.S.L** En prenant pour base le concept de chaînes de forces, et en supposant leur influence à l’échelle macroscopique, un matériau granulaire pourrait être modélisable par des liens rigides entre les grains. Un matériau granulaire aurait la propriété de retransmettre toute force verticale dans la direction horizontale.

En reprenant ces idées, en les traduisant en terme de contraintes et faisant le passage depuis les hypothèses microscopiques vers l’échelle des milieux continus, le modèle B.C.C. (Bouchaud, Cates, Claudin) [23] propose de nouvelles relations phénoménologiques :

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = K\sigma_{33}, \quad (5.2)$$

et le modèle plus général O.S.L. (Oriented Stress Linearity) qui fait apparaître le terme de cisaillement du tenseur des contraintes propose lui la relation :

$$\sigma_{11}/\sigma_{22} = \eta + \mu\sigma_{12}/\sigma_{22}, \quad (5.3)$$

où les coefficients  $\eta$  et  $\mu$  dépendent de l'historique de la construction du matériau granulaire ( $\mu$  s'annule si le mode de construction respecte une symétrie horizontale par exemple).

En introduisant ces relations de clôture dans l'équation d'équilibre sur les contraintes 5.1, on obtient alors des équations dites hyperboliques, c'est-à-dire possédant la même structure mathématique qu'une équation d'onde.

Pour le modèle B.C.C., la composante verticale  $\sigma_{11}$  vérifie par exemple l'équation suivante :

$$\partial_{22}^2\sigma_{22} - K\partial_{11}^2\sigma_{22}, \quad (5.4)$$

C'est donc une équation d'onde, où la variable temporelle aurait été remplacée par une variable spatiale. Par conséquent, une contrainte appliquée en surface d'un matériau se propage le long de lignes caractéristiques formant un angle avec la verticale dont la tangente vaut  $\sqrt{K}$ . Ces lignes (macroscopiques car définies à l'échelle des milieux continus) seraient la représentation mathématique des chaînes de forces (qui ont une origine microscopique), qui était on le rappelle à la base de la pensée de ce modèle.

Pour le modèle O.S.L., la substitution du second modèle dans l'équation de continuité donne pour les composantes du tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  l'équation suivante :

$$(\partial_2 - c^+\partial_1)(\partial_2 - c^-\partial_1)\sigma_{ij} = 0, \quad (5.5)$$

où  $c^\pm = 1/2(-\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4\eta})$ .

Cette équation est également hyperbolique et appartient donc à la même classe d'équation d'onde que la précédente. Cette fois, la réponse à la perturbation doit se propager selon les deux directions définies par  $\partial_1 = c^\pm\partial_2$  où  $\partial_1$  et  $\partial_2$  sont les déplacements relatifs par rapport au point d'application de la perturbation.

Pour ces deux modèles, il y a donc une grande différence avec les modèles élastoplastiques standards dont les équations sont elliptiques, c'est-à-dire de type Laplaciennes.

La donnée d'une relation quelconque entre les composantes du tenseur des contraintes, ne mettant pas en jeu les déformations, aboutit au même type d'équations hyperboliques.

## Modèles paraboliques

Une tout autre approche des matériaux granulaires considère l'aspect discret de la matière à l'échelle des grains et la transmission des forces de contact de proche en proche qui repose sur une théorie probabiliste de diffusion des forces [25].

L'idée représentée sur la figure 5.4 a été mise en forme mathématiquement sous le nom de *q - Model*.

On sait que le mécanisme qui domine l'apparition de la structure très inhomogène du réseau de forces est l'hétérogénéité de l'assemblage (comme on a pu le voir au Chapitre 3) ; ce désordre dans l'organisation des particules entraîne une distribution inégale des forces de contact entre des particules voisines.

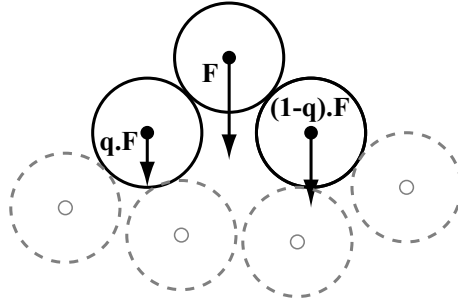


FIG. 5.4 – Le  $q$ -model : redistribution d'une force verticale  $F$  au niveau d'un grain sur ses deux voisins immédiats qui vont supporter chacun une partie de la force,  $qF$  et  $(1-q)F$ , où  $q$  est une variable aléatoire bornée par 0 et 1.

Dans un assemblage, un grain est chargé verticalement vers le bas par une force  $F$  ; celle-ci va se répartir de façon non équilibré et aléatoirement sur les grains dans son voisinage inférieur ; on pourrait considérer un modèle à plus de deux voisins.

Ici, comme il s'agit d'un modèle statistique, les corrélations spatiales de répartition, que l'on avait mis en évidence au Chapitre 3 par l'étude des fonctions de corrélation de paires  $g(r)$  et de forces  $K(R)$  ne sont pas considérées, pas plus que les hétérogénéités de coordination des particules  $\mathcal{Z}^{(p)}$ .

Pour un modèle à deux voisins il y aura donc une fraction  $q$  de la force transmise  $F$  sur le premier et une autre fraction  $(1-q)$  sur le second.

Si une fraction  $q_{ij}$  de la force totale supportée par la particule  $i$  dans la couche  $D$  est transmise à la particule  $j$  dans la couche  $D+1$ , alors la force supportée par la particule  $i$  dans la couche  $D$  satisfait l'équation :

$$w(D+1, j) = 1 + \sum q_{ij}(D)w(D, i), \quad (5.6)$$

Les fractions  $q_{ij}(D)$  sont des variables aléatoires indépendantes avec pour contrainte  $\sum q_{ij} = 1$  qui assure la condition d'équilibre des forces sur chaque particule. La probabilité de réaliser un tirage donné de  $q$  à chaque site  $i$ , est donnée par la fonction de distribution  $\rho(q_{i1}, \dots, q_{iN})$ .

De proche en proche les forces se répartissent et diffusent vers le bas.

Si on s'intéresse à la distribution de force  $Q_D(w)$  qui est la probabilité qu'un site de la couche  $D$  supporte une force verticale  $w$ , on peut obtenir  $Q_D$  pour différentes distributions de  $q$ .

Si on considère une distribution uniforme de  $q$ , qui est la distribution la plus simple consistante avec la contrainte  $\sum_1^N q_i = 1$ . On l'obtient en choisissant chacun des  $q_1, q_2, \dots, q_{N-1}$  indépendamment d'une distribution uniforme entre 0 et 1 en posant  $q_N = 1 - \sum q_j$  et en gardant seulement les jeux satisfaisants  $q_N \geq 0$ . Il est montré que dans ce cas  $\eta(q) = 1/(N-1)(1-q)^{N-2}$  pour cette distribution.

Ainsi pour le  $q$ -model à deux voisins  $N = 2$ , avec  $q_2 = 1 - q_1$ , la probabilité d'obtenir une valeur  $q$  est  $\eta(q) = 1$ . Pour le  $q$ -model à trois voisins  $N = 3$ , les configurations retenues sont  $q_1 + q_2 + q_3 = 1$  et  $\eta(q) = M$ , et la probabilité d'obtenir une valeur  $q$  est  $M(1-q)$  où  $M = (N-1) = 2$ . Le  $q$ -model le plus général à  $N$  voisins donne pour la probabilité d'obtenir une valeur  $q$   $\eta(q) = (N-1)(1-q)^{N-2}$ .

Bien qu'il existe une distribution particulière de  $q$  qui donne une distribution des forces qui décroît comme une loi puissance aux grandes forces, pour presque toutes les distributions de  $q$  si on choisit pour  $q$  une distribution uniforme entre 0 et 1, on retrouve que les forces de forte amplitude (c'est-à-dire supérieures à la force moyenne) suivent une distribution exponentielle.



Ainsi, ce modèle semble contenir des composantes essentielles de l'inhomogénéité des forces dans les matériaux granulaires. Cependant si ce modèle reproduit bien la distribution des fortes forces, c'est là sa meilleure justification, il est en contradiction avec les résultats expérimentaux sur la distribution des faibles forces. Radjai et coll. montrent en effet que si les grandes forces (supérieures à la force moyenne) sont bien distribuées exponentiellement, les forces faibles suivent elles une loi de puissance d'exposant très faible. L'allure bimodale de cette distribution laisse penser que le matériau granulaire est constitué de deux sous-réseaux qui vont chacun avoir un rôle mécanique différent.

Ce modèle ne peut bien sûr pas capturer l'ensemble des propriétés des matériaux granulaires, car c'est un simple modèle scalaire qui ne prend en considération que la conservation de la composante verticale des forces ; il ignore la nature vectorielle des forces et l'équilibre vectoriel n'est pas vérifié. Ces effets qui ont été négligés par ce modèle laisse penser qu'ils ne déterminent pas le trait caractéristique de la distribution des fortes forces.

A grande échelle, l'équation que vérifient les contraintes est une équation de diffusion, comme on pouvait s'y attendre d'après le caractère stochastique du processus.

### 5.1.5 Confrontations des nouveaux modèles à l'approche élastoplastique

Les modèles propagatifs et le modèle statistique de diffusion, peuvent être qualifiés de modèles causaux ; en effet, la contrainte se propage dans le matériau depuis un point source et ce qui est important, la partie du matériau qui est au-dessus de la perturbation n'est pas influencée par l'état du matériau au-dessous de la perturbation de part la *directionnalité* des modèles ; cette caractéristique des modèles granulaires sort donc complètement de l'approche élastique puisque dans cette approche, tous les points de l'espace sont sensibles à l'état de tous les autres.

D'autre part, on a vu que dans l'approche élastoplastique standard, pour connaître l'état de contrainte d'un matériau il est nécessaire de décrire tous les processus qui ont participé à sa construction, soit la succession de tous les états intermédiaires du matériau ce qui nécessite d'avoir recours à des équations de types incrémentales. En revanche, dans les modèles propagatifs, tous les états possibles du matériau (dus à des processus de construction différents) sont envisagés par le choix d'un jeu différent de paramètres ; le caractère incrémental des équations n'est plus nécessaire pour calculer l'état de contrainte dans le matériau.

### 5.1.6 Le test de la fonction réponse

Pour tenter de départager les différents modèles, une expérience a été proposée par P.G. De Gennes [35] ; Il s'agit d'appliquer en surface du matériau (ou dans le matériau) une force de perturbation ponctuelle et de mesurer le champ de contraintes résultant sous la perturbation. L'approche élastoplastique est alors confrontée aux modèles granulaires du point de vue de la perturbation du champ de contraintes. Or, chacun de ces modèles prédit des distributions de contraintes différentes en accord avec la forme mathématique spécifique qui décrit l'équilibre des contraintes de ces modèles. Les modèles élastoplastiques sont décrits par des équations de nature elliptique, tandis que les modèles granulaires sont décrits par des équations d'autres natures, hyperboliques pour les modèles propagatifs et paraboliques pour les modèles probabilistes de diffusion des forces.

Sur la figure 5.5, on compare les réponses des différents modèles :

– Modèle elliptique

Dans le cadre de l'approche élastoplastique, si on regarde l'état d'un matériau avant qu'il n'atteigne le critère de rupture, la loi de comportement mécanique est de type élastique

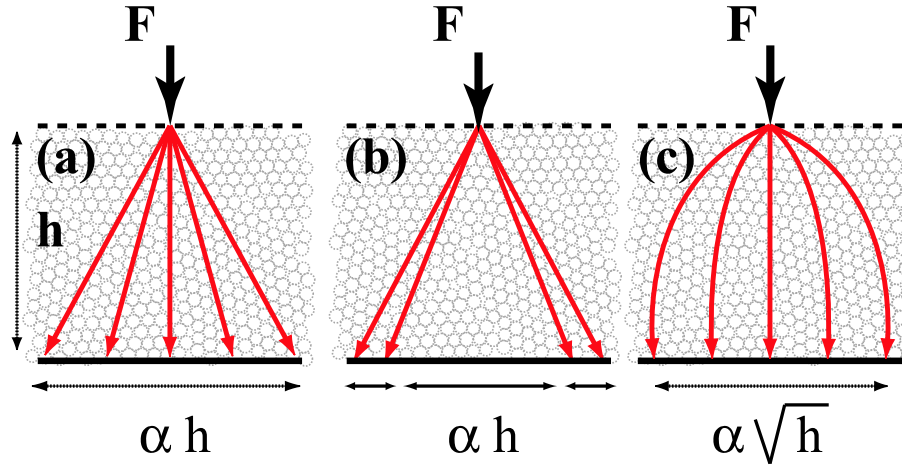


FIG. 5.5 – Fonctions réponses des différents modèles et largeur des distributions : (a) réponse elliptique de l’approche élastique, (b) réponse hyperbolique du modèle propagatif, (c) réponse parabolique du modèle probabiliste.

et les équations différentielles qui décrivent l’état de contrainte du matériau sont de types elliptiques.

Dans le cas le plus simple, si on considère un matériau élastique linéaire homogène isotrope, Boussinesq a calculé le profil de contrainte issu de la perturbation ponctuelle (fonction de Green) en surface d’une couche semi-infinie ; cette réponse ne dépend d’aucun paramètre élastique de matériau ; le profil se présente sous la forme d’un pic centré verticalement sous la perturbation dont la largeur à  $W$  est proportionnelle à la profondeur  $y$  :  $W \propto y$ .

– Modèle hyperbolique

Les premiers modèles granulaires que nous avons présentés, de type propagatifs, le modèle B.C.C. et le modèle O.S.L., ont leur état de contrainte décrit par des équations hyperboliques, c’est-à-dire des équations d’ondes (où la variable temporelle aurait été remplacée par une variable spatiale). Pour le même problème, l’application d’une charge ponctuelle en surface, le profil de pression est différent ; il se présente sous la forme d’une zone annulaire dont le rayon au centre et la largeur sont également proportionnels à la profondeur  $y$  :  $W \propto y$  ; de par la forme du profil, contrairement au cas elliptique, le maximum de contraintes ne se situe pas à la verticale du point d’application de la perturbation mais au niveau de l’anneau de propagation.

– Modèle parabolique

Le second modèle granulaire présenté est de type probabilistique à l’échelle microscopique des grains ; à l’échelle des milieux continus, en traduisant les forces de contact en terme de contraintes les équations proposées pour le q-modèle sont de type parabolique, c’est-à-dire diffusives. Le profil de contrainte est encore différent ; cette-fois il se présente sous la forme d’un pic de pression centré à la verticale du point d’application de la force comme en élasticité, mais cette fois-ci sa largeur  $W$  à la profondeur  $y$  est proportionnelle à  $\sqrt{h}$  et l’équation de la parabole qui borne le profil est  $x = \sqrt{2Dy}$ .

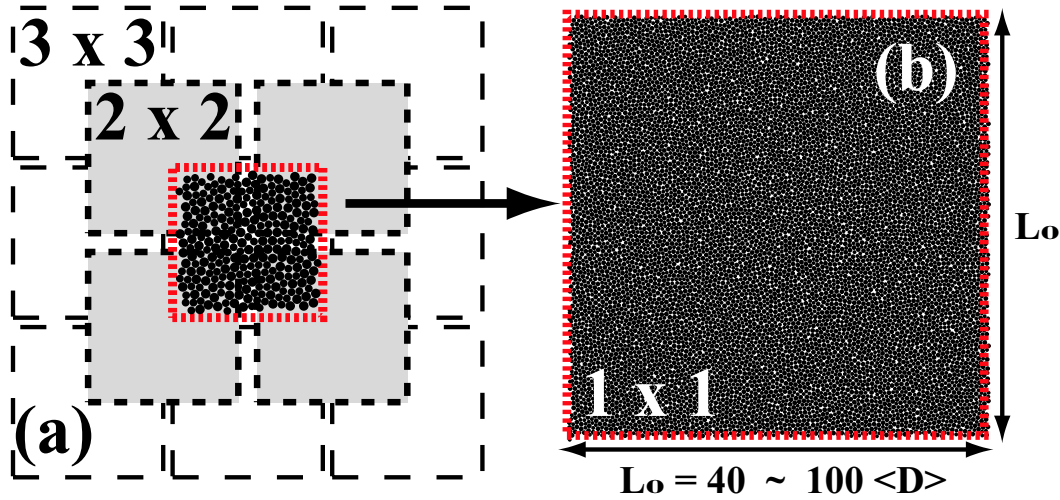


FIG. 5.6 – Les trois tailles de systèmes granulaires préparés à l’état statique pour mesurer leur fonction réponse; l’échantillon de plus petite taille  $L_0 \times L_0$  est composé de 10000 grains (soit environ 100 grains de côté), et est subdivisé en 40 couches granulaires (une couche a donc une épaisseur d’environ 2.5 taille de grain  $\langle D \rangle$ ); on double ( $2L_0 \times 2L_0$ ) puis triple ( $3L_0 \times 3L_0$ ) la taille de système initiale pour quantifier l’effet de taille finie sur la fonction réponse.

## 5.2 Etude numérique de la fonction réponse

### 5.2.1 Présentation des simulations

#### Préparation du système

Nous avons réalisé des simulations numériques de *Dynamique Moléculaire* pour étudier les fonctions réponses d’assemblages denses de particules sphériques en géométrie bidimensionnelle. Ces assemblages ont été obtenus à l’aide de mélanges bidisperses de particules caractérisés par 10% de déviation de rayons par rapport au rayon moyen de  $\langle R \rangle = 0.1mm$ ; les plus petits systèmes sont composés de 10000 particules, soit approximativement 100 particules de côté; la taille de système intermédiaire correspond à 40000 particules, c’est-à-dire  $\approx 200 \times 200$ ; enfin les plus grands systèmes simulés sont composés de 90000 particules, soit  $\approx 300$  diamètres de particules.

Pour obtenir des systèmes de très grande taille équilibrés à l’état statique, nous avons répété périodiquement dans l’espace un système cubique composé de 10000 particules préparé en conditions de frontières périodiques et équilibré en utilisant le protocole de *compaction-densification* présenté dans le chapitre précédent. Nous avons utilisé cette méthode, plutôt que de rééquilibrer depuis l’état initial de *gaz* des grands systèmes composés d’un très grand nombre de particules. En effet, équilibrer des systèmes de cette taille aurait été trop coûteux en temps de calcul.

Les particules interagissent selon les lois de contact élastiques de Hertz-Mindlin et les valeurs des paramètres élastiques des grains sont les mêmes que ceux utilisés dans les études précédentes,  $\mu_g = 30GPa$  et  $\nu_g = 0.2$ ; les grains sont frottants et là, le coefficient de friction au contact est  $\mu_f = 0.3$

Des termes d’amortissement numérique de type visqueux ( $-C_T \dot{x}$  et  $-C_R \omega$ ) sont pris en compte dans le schéma d’intégration du mouvement des particules pour permettre au système d’atteindre un état d’équilibre statique; le type d’amortissement considéré est de type global (voir le chapitre 2 pour explication).

Le schéma général de ces simulations est le suivant; les simulations commencent avec un

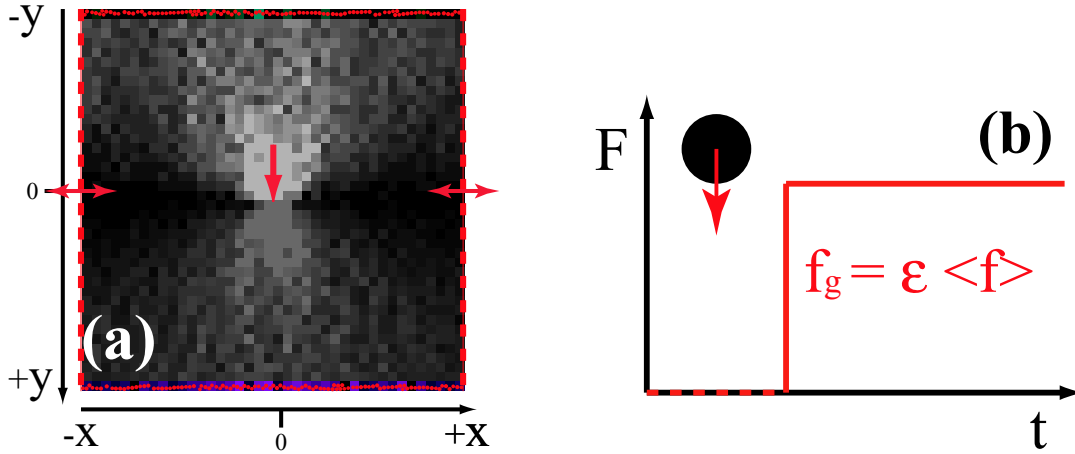


FIG. 5.7 – Conditions aux limites : (1) les conditions de frontières périodiques sont conservées dans la direction horizontale; (2) rupture de la symétrie verticale du système par la création d'un *fond* et d'un *toit* en imposant une condition de parfaite rigidité sur les particules les plus extérieures en rouge ( $u_2^p = 0$ ); (3) application d'une surcharge verticale au centre du système, en appliquant une force de très faible intensité sur une particule ( $\Delta f_n^{(p)} = \epsilon_f \langle f \rangle$ ).

agrégat bidimensionnel dense de 10000 grains sphériques à l'état statique; cet assemblage est confiné (par les conditions de frontières périodiques) à une valeur de pression déterminée lors du protocole d'équilibration; nous avons étudié trois gammes de pression,  $p = 100\text{KPa}$ ,  $p = 1\text{MPa}$  et  $p = 10\text{MPa}$ . Les agrégats obtenus sont denses, car préparés sans friction, et désordonnés, la déviation de rayon du mélange étant suffisante pour empêcher l'organisation collective des grains selon un réseau *Hexagonal Compact*.

Ensuite, pour obtenir des systèmes de taille plus importante, nous répétons périodiquement autant de fois que désiré et ce dans chaque direction de l'espace la configuration de grains précédemment équilibrée en conditions de frontières périodiques comme cela est présenté sur la figure 5.6. Nous avons ainsi créé des systèmes équilibrés en conditions de frontières périodiques de taille  $2 \times 2$  (40000 grains),  $3 \times 3$  (90000 grains),  $4 \times 4$  (160000 grains),  $5 \times 5$  (250000 grains) et  $x \times y$  ( $x \times y \times 10000$  grains) en général.

### Modifications des conditions de frontières

L'étape suivante consiste à supprimer la symétrie verticale du système en supprimant les conditions périodiques dans la direction verticale (2). Pour ce faire, nous utilisons des parois rigides granulaires représentées sur la figure 5.8 qui consiste à fixer un déplacement nul à l'ensemble des grains interceptés par la droite d'équation  $y = \pm L_2/2$ , où  $L_2$  est la dimension verticale du système; les grains non interceptés sont : soit à l'intérieur de l'espace délimité par les deux droites et ils sont conservés, soit ils sont à l'extérieur de cet espace et ils sont supprimés. Pour conserver le maximum de grains dans le système, on utilise les droites d'équation  $y = 0.99L_2$ ; on ne perd alors qu'une seule rangée horizontale de grains sans déséquilibrer le système; en effet, il ne faut pas que les grains, qui partageaient des contacts à travers les conditions de frontières périodiques avant la brisure de symétrie du système, les conservent sous peine de déséquilibrer l'état statique; Les conditions périodiques horizontales sont elles conservées car nous voulons préserver cette symétrie du système.

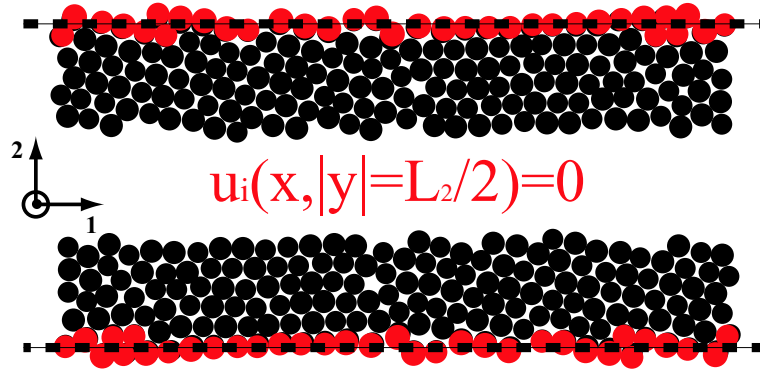


FIG. 5.8 – Rupture de la symétrie verticale : création d'un *fond* en  $y = +L_2/2$  et d'un *toit* en  $y = -L_2/2$  en imposant une condition de parfaite rigidité sur les particules les plus extérieures en rouge ( $u^p = 0$ ).

### Perturbation infinitésimale

Nous sélectionnons ensuite un grain dans ce système, celui dont la position est la plus proche du centre du système ( $x = 0$  et  $y = 0$ ) ; ce grain partage des contacts avec un certain nombre de grains voisins et les forces de contact se compensent à l'équilibre.

Nous ajoutons sur ce grain une force verticale dirigée vers le bas, infinitésimale c'est-à-dire d'amplitude très faible par rapport à l'intensité moyenne des forces de contact dans l'assemblage ;  $f_g = 1.E - 6\langle f \rangle$  est un choix acceptable qui permet à la fois de ne pas modifier de façon trop importante le réseau de contacts préexistant et d'avoir une résolution numérique acceptable pour mesurer la perturbation du champ de contraintes au sein de l'agrégat.

Sur la figure 5.9, on suit au cours du temps, pour une simulation typique, l'effet de la perturbation ponctuelle du système sur le réseau de contacts ; on constate une diminution très légère de la coordinence moyenne  $\langle Z \rangle$  du système qui se stabilise rapidement à moins de 1% ; la perturbation du réseau de contacts est donc très réduite ce qui est important pour interpréter correctement les résultats numériques en terme de perturbation du champ de contraintes  $\Delta\sigma_{ij}$ .

Cette perturbation est de type *marche* comme illustré sur la figure 5.7 ; on applique de façon instantanée cette perturbation et l'amplitude et la direction de la force appliquée sur le grain est constante au cours de la simulation ; le point d'application de cette force est le centre du grain sélectionné, et il suit donc le déplacement du grain en déséquilibre jusqu'à ce qu'un nouvel état statique soit atteint.

### Calcul de la perturbation du champ de contraintes

Au cours des simulations, la perturbation du champ de contraintes se propage dans le matériau granulaire ; la perturbation locale est définie par rapport à l'état initial statique non perturbé ; le système est subdivisé en un certain nombre de cellules carrées toutes de dimensions égales ; elle contient en moyenne 4 à 6 grains en contact ce qui permet de calculer un tenseur de contrainte local avec une résolution suffisante ; pour vérifier que nous n'avons pas d'effet de taille de moyennage, nous avons également calculé les contraintes sur des cellules plus grandes ; aucun effet particulier n'a été mis en évidence.

Le tenseur local des contraintes de référence  $\sigma_{ij}^{ref}$  est calculé à l'équilibre statique à partir des  $n$  forces de contact  $\vec{f}$  entre les particules ; il s'écrit :

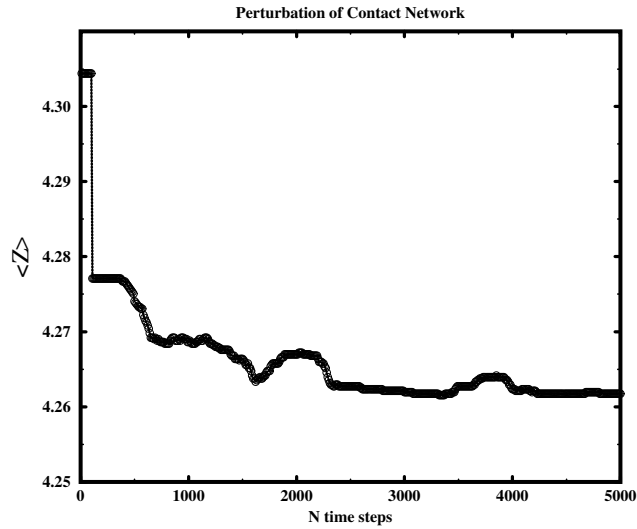


FIG. 5.9 – Evolution de la coordinnce moyenne  $\langle Z \rangle$  d'un système de  $N = 10000$  grains suite à la perturbation appliquée ( $f^{(G)} = 10^{-6} \langle f^{(e)} \rangle$ ); la faible diminution de  $\langle Z \rangle$  ( $\approx 1\%$ ) traduit une faible perturbation du réseau de contacts.

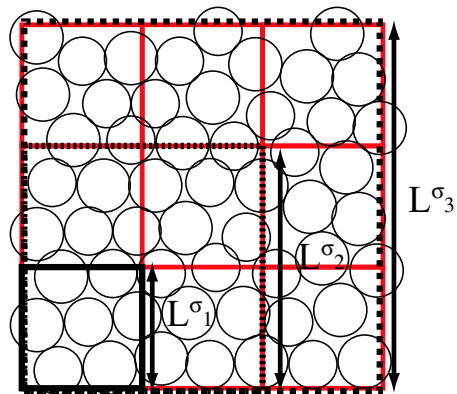


FIG. 5.10 – Taille sur laquelle est effectué la moyenne des forces de contact pour le calcul de l'état de contrainte local; on a fait varier cette taille par rapport à la taille de la cellule unité, en la doublant puis en la triplant dans chaque direction; suivant la configuration locale des particules, la cellule unité se compose de 4 à 6 particules, avec une moyenne de  $\approx 4$  contacts par particule.

$$\sigma_{ij}^{ref} = \frac{\bar{R}}{S} \sum_{i=1}^n (f_i n_j + f_j n_i), \quad (5.7)$$

Le tenseur local des contraintes lors de la propagation de la perturbation,  $\sigma_{ij}^{per}(t)$ , et ensuite à l'équilibre statique,  $\sigma_{ij}^{per}(t_{equ})$ , est déterminé à partir des  $n'$  forces mesurées aux contacts des particules ; la perturbation on l'a vu, doit être la plus faible possible de telle façon que le nombre de contacts dans l'assemblage ne soit pratiquement pas modifié,  $n' \approx n$  ; il s'écrit :

$$\sigma_{ij}^{per}(t) = \frac{\bar{R}}{S} \sum_{i=1}^{n'(t)} (f_i n_j + f_j n_i), \quad (5.8)$$

Et finalement, la perturbation du champ de contraintes  $\Delta\sigma_{ij}^g$  résultant de la force appliquée  $f^g$  est :

$$\sigma_{ij}^g = \Delta\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{per} - \sigma_{ij}^{ref}. \quad (5.9)$$

Selon la convention de signe utilisée dans cette étude, une perturbation positive ( $\Delta\sigma_{ii}^g > 0$ ) se traduira en terme de compression tandis qu'une perturbation négative ( $\Delta\sigma_{ii}^g < 0$ ) se traduira en terme de dilatation. Les rotations des particules seront considérées positives dans le sens anti-horaire.

## 5.2.2 Propagation de la perturbation

### Visualisation de la propagation

Les premières simulations que nous avons conduites sont des simulations où l'on se focalise sur la propagation de la perturbation du champ de contraintes par rapport à l'état de référence ; elles ont été réalisées avec des tailles de système  $L_0 \times L_0$ ,  $3L_0 \times 3L_0$  et  $5L_0 \times 5L_0$  (soit 10000, 90000 et 250000 grains).

Pour la taille de système la plus petite, 10 simulations (correspondant à 10 réalisations différentes de configuration de particules à l'état statique) ont été réalisées ; Pour la taille de système intermédiaire nous avons réalisé 5 simulations et enfin pour la plus grande taille de système, une seule simulation a été effectuée. Multiplier les réalisations permet de moyennner la fonction réponse d'un matériau granulaire ; Etant donné la nature discrète du matériau et le caractère très inhomogène du réseau de contacts et l'hétérogénéité des intensités des forces de contact , un profil issu d'une seule réalisation est très *bruité* ; moyennner sur un ensemble de réalisations permet de lisser la fonction réponse.

Le pas de temps choisi pour ces simulations est plus fin que celui que nous avons utilisé jusqu'à présent,  $\Delta t = 10^{-9}s$  ; cela nous permet d'obtenir une meilleure résolution pour suivre la propagation de la perturbation.

Le schéma de ces simulations de propagation se présente comme suit. Une fois le grain le plus central sélectionné, on applique une force de très faible amplitude et la perturbation se propage à partir du centre du système comme on peut le voir sur les figures 5.11 (propagation avant la première réflexion du front sur le *fond* et le *toit*) et 5.12 (propagation après la première réflexion du front sur le *fond* et le *toit*).

Sur ces deux figures, on voit dans les colonnes de gauche à droite, les perturbations des composantes horizontales, verticales et cisailantes du tenseur des contraintes :

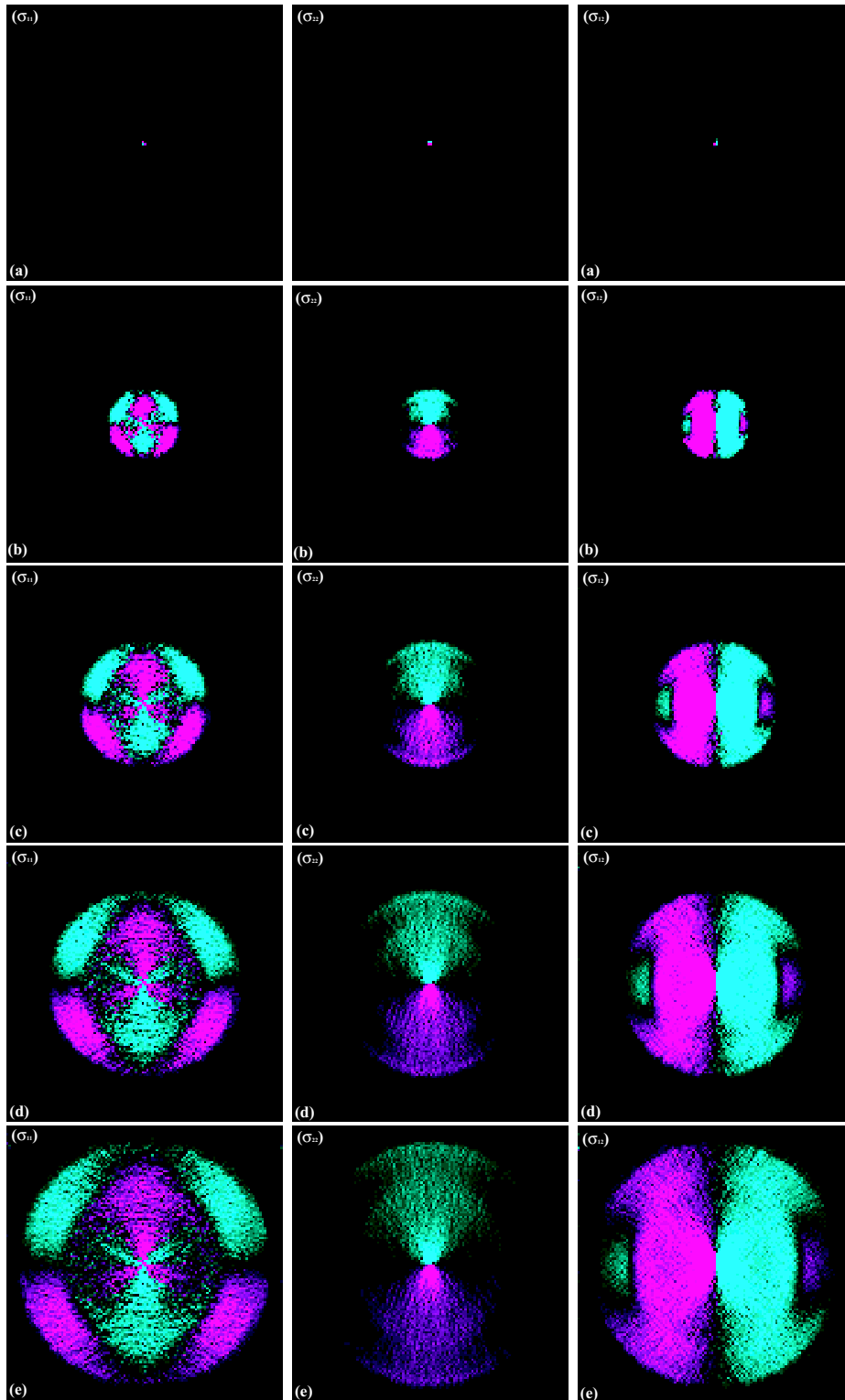


FIG. 5.11 – Perturbation du champ de contraintes en fonction du temps (de haut en bas : (a)  $N = 1$ , (b)  $N = 3000$ , (c)  $N = 6000$ , (d)  $N = 9000$  et (e)  $N = 12000$  cycles) - pour les 3 composantes indépendantes du tenseur (à gauche)  $\sigma_{11}(t)$ , (au centre)  $\sigma_{22}(t)$ , (à droite)  $\sigma_{12}(t)$  - dans un système de  $N = 90000$  grains soumis localement à une très faible perturbation, une force de contact verticale dirigée vers le bas et de module  $f^{(G)} = 10^{-6}\langle f^{(c)} \rangle$ . L'échelle de couleur correspond à l'intensité de la perturbation : (en magenta) un état compressif ou un cisaillement positif, (en cyan), un état de dilatation ou un cisaillement négatif.



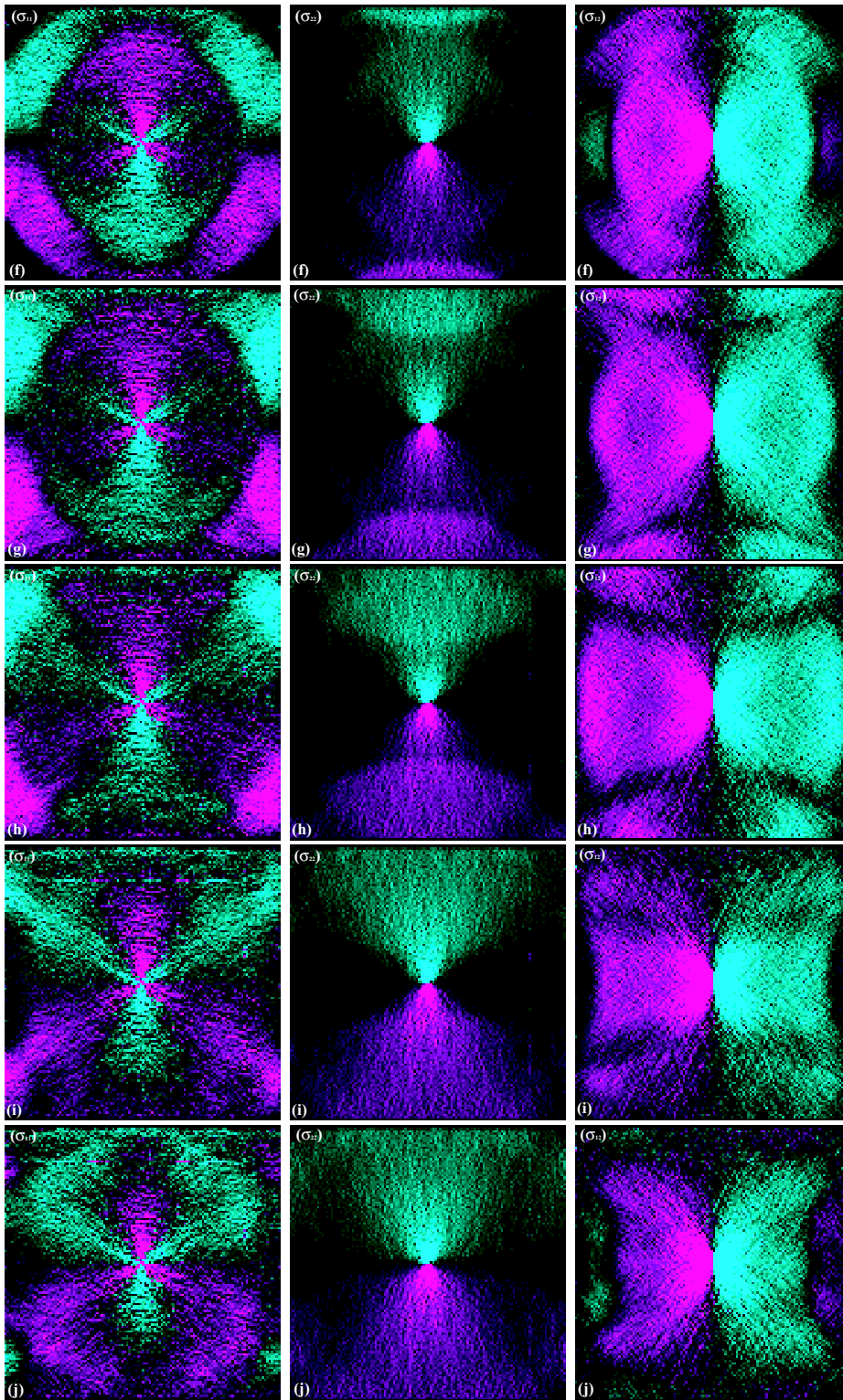


FIG. 5.12 – Perturbation du champ de contraintes en fonction du temps (de haut en bas : (a)  $N = 15000$ , (b)  $N = 18000$ , (c)  $N = 21000$ , (d)  $N = 24000$  et (e)  $N = 27000$  cycles) - pour les 3 composantes indépendantes du tenseur (à gauche)  $\sigma_{11}(t)$ , (au centre)  $\sigma_{22}(t)$ , (à droite)  $\sigma_{12}(t)$  - dans un système de  $N = 90000$  grains soumis localement à une très faible perturbation, une force de contact verticale dirigée vers le bas et de module  $f^{(G)} = 10^{-6} \langle f^{(c)} \rangle$ . L'échelle de couleur correspond à l'intensité de la perturbation : (en magenta) un état compressif ou un cisaillement positif, (en cyan), un état de dilatation ou un cisaillement négatif.

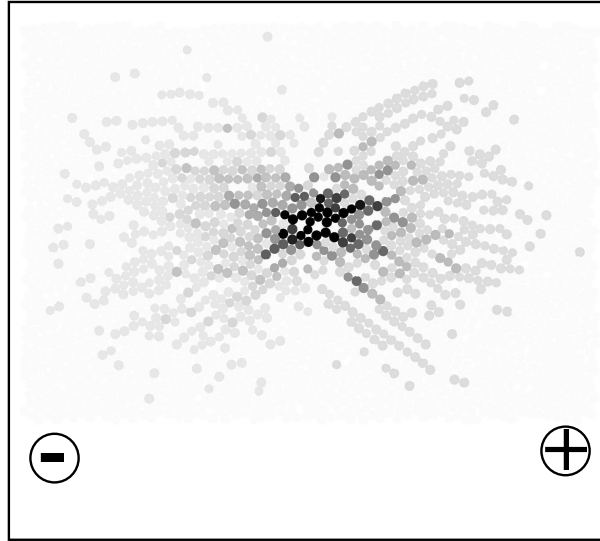


FIG. 5.13 – Rotations des grains lors de la propagation de la perturbation ; à gauche de l’application de la force, les grains sont en mouvement de rotation dans le sens horaire  $\theta < 0$  alors qu’à droite de la perturbation, ils sont en mouvement de rotation dans le sens anti-horaire  $\theta > 0$ .

- Avant la première réflexion, la composante horizontale  $\Delta\sigma_{11}$  sous le point d’application de la perturbation ( $y > 0$ ), la composante horizontale  $\Delta\sigma_{11}$  est négative dans sa partie centrale et positive de part et d’autre ; on a donc une dilatation au centre et un état de compression selon les directions diagonales. Un profil de pression à une profondeur  $y$   $\Delta\sigma_{11}(x, y)$  se présente alors sous la forme d’un creux central et de deux pics extérieurs. Au-dessus du point d’application de la perturbation  $y < 0$ , la composante horizontale  $\Delta\sigma_{11}$  présente une distribution opposée, positive (donc état compressif) au centre et négatif (état de dilatation) sur l’extérieur ; globalement il semble que  $\Delta\sigma_{11}(x, -y) = -\Delta\sigma_{11}(x, y)$ .
- La composante verticale  $\Delta\sigma_{22}$  est exclusivement positive sous le point d’application de la perturbation avec un maximum au centre ; le profil qui caractérise cet état de contraintes compressives par rapport à l’état de référence a manifestement l’allure d’un pic central. Au-dessus du point d’application on a manifestement un état de contraintes opposé de dilatation avec  $\Delta\sigma_{22}(x, -y) = -\Delta\sigma_{11}(x, y)$ .
- La composante cisailante  $\Delta\sigma_{12}$  est négative à gauche du point d’application de la perturbation et positive à droite ; cette fois on a une symétrie verticale telle que  $\Delta\sigma_{12}(-x, y) = -\Delta\sigma_{11}(x, y)$ .

Pour la composante verticale du tenseur des contraintes, dans la direction de la force appliquée, une première réflexion a lieu lorsque le front atteint les frontières du système (voir figure 5.11), verticalement au niveau des parois rigides et horizontalement au niveau des conditions de frontières périodiques. Le front circulaire est réfléchi verticalement après  $\approx 12000$  cycles de calculs ( $\Delta t = 10^{-9}$ ) en ayant parcouru une distance  $L_2/2 \approx 2.8 \text{ cm}$  ; la vitesse de propagation est donc de l’ordre de  $\approx 2400 \text{ m.s}^{-1}$

Après cette première réflexion, le front se propage dans la direction opposée vers le centre qu’il atteint après environ 24000 cycles (voir figure 5.12)

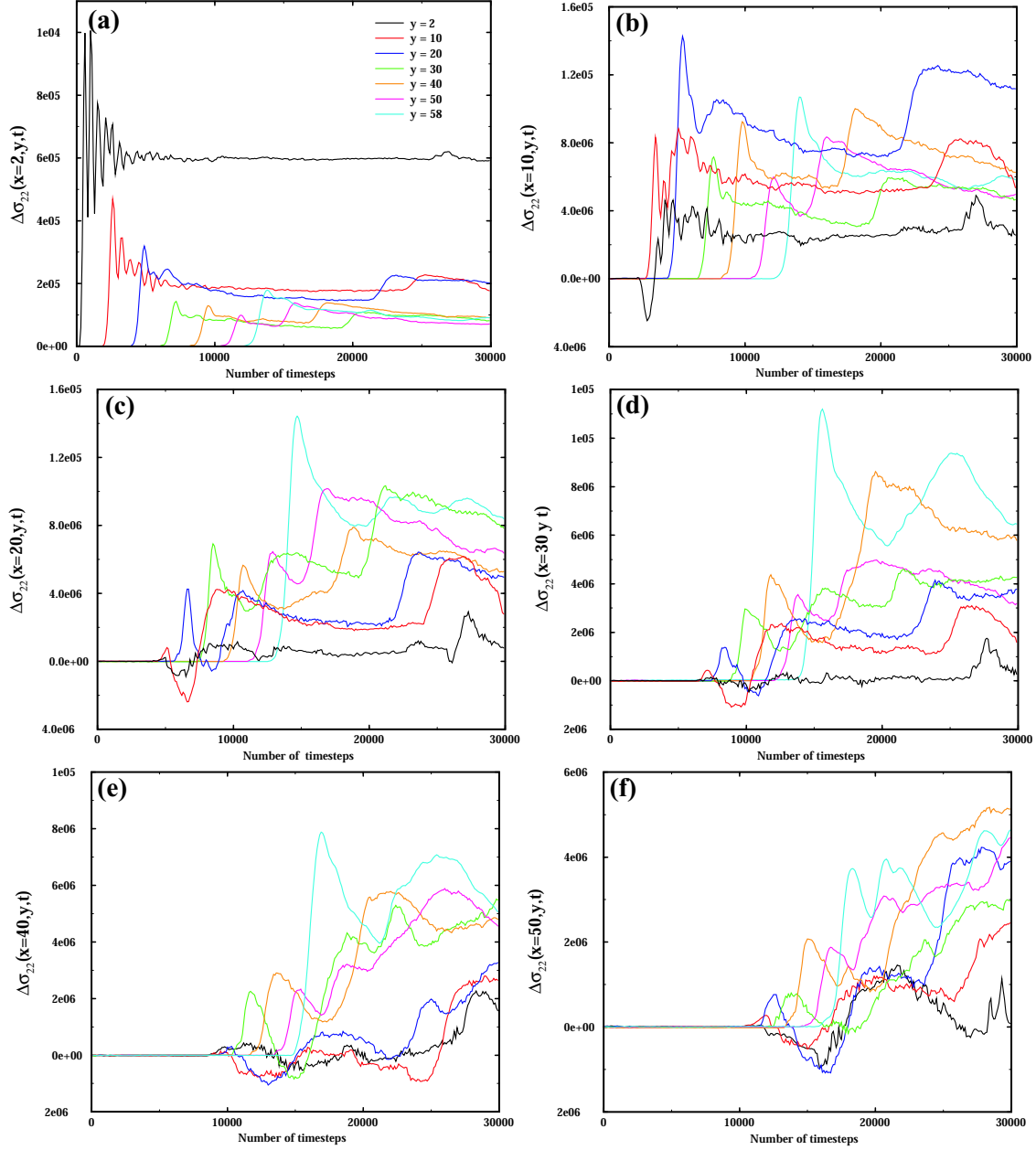


FIG. 5.14 – Perturbation locale de la composante verticale du tenseur des contraintes par rapport à l'état de référence non perturbé  $\Delta\sigma_{22}$ ; pour les rangées de cellules verticales (a)  $x = 1$ , (b)  $x = 10$ , (c)  $x = 20$ , (d)  $x = 30$ , (e)  $x = 40$ , et (f)  $x = 50$  par rapport au centre ( $x = 0$ ), on présente les réponses  $\Delta\sigma_{22}(t)$  des rangées de cellules horizontales  $y = -1$ ,  $y = -10$ ,  $y = -20$ ,  $y = -30$ ,  $y = -40$ , et  $y = -50$  par rapport au centre ( $y = 0$ ), i.e. pour la moitié inférieure du système de  $N = 90000$  grains.

## Analyse de la propagation

Premièrement, au cours de la propagation de la perturbation, on peut suivre l'évolution des rotations des particules ; la distribution des rotations des particules présentée en figure 5.13 correspond exactement à la distribution de la composante cisailante des contraintes ; les particules subissent une rotation horaire à droite de la perturbation et une rotation anti-horaire à gauche, compatible avec l'état de contraintes cisailant.

Nous procédons ensuite à l'analyse de la perturbation de la composante verticale du champ de contraintes au cours de la propagation  $\Delta\sigma_{22}(x, y, t)$  ; ces mesures sont présentées en figure 5.14. Pour ce faire, nous nous intéressons à 6 rangées verticales de cellules à droite de la perturbation ( $x > 0$ ) et dans la demi-partie inférieure du système ( $y > 0$ ) ; nous sélectionnons pour chacune de ces 6 rangées, 6 cellules à différentes profondeurs dont nous analysons la réponse temporelle du matériau à la perturbation pendant la phase initiale de sa propagation depuis l'initiation, en passant par la première réflexion puis le retour à la source.

- Dans l'axe vertical (rangée  $x = 1$ ), au plus proche de la perturbation  $y = 1$ , on observe un pic de contrainte au passage du front puis une oscillation d'amplitude décroissante avec globalement une diminution de l'intensité de la contrainte et enfin une stabilisation à une valeur inférieure à la valeur du pic initiale. Beaucoup plus tard, on observe à nouveau un pic d'amplitude beaucoup plus faible lors du retour du front réfléchi sur les parois horizontales rigides aux frontières verticales du système. Globalement aux profondeurs plus importantes on observe la même évolution temporelle de  $\Delta\sigma_{22}(t)$  mais plus on s'éloigne du point d'application de la perturbation, plus l'amplitude initiale du premier pic est faible (expansion radiale du front) et plus le second pic arrive rapidement puisqu'on se trouve plus proche des frontières rigides où le front est réfléchi.
- Plus on s'éloigne du front sur l'axe horizontal, et plus la réponse temporelle du matériau en terme de perturbation du champ de contraintes devient complexe et c'est surtout aux faibles profondeurs que la réponse est la plus difficile à comprendre. Aux grandes profondeurs, globalement la réponse est identique à celle que nous venons d'expliquer. En étudiant la propagation des forces sur le réseau de contacts (voir la figure 5.17, on se rend compte qu'en réalité il existe une succession de fronts de propagation qui sont dus au mouvement oscillant amorti de la particule forcée au centre du système.

Si maintenant, on s'intéresse à la réponse du système à l'état statique, il faut attendre la relaxation complète du système et l'amortissement de la propagation ; ceci n'intervient qu'après une succession d'aller-retour du front entre le centre du système et ses frontières, et c'est cette réponse finale que nous allons maintenant regarder de plus près.

### 5.2.3 Vers la relaxation complète

#### Critères de relaxation

L'application d'une perturbation dans le matériau granulaire à l'état statique, génère une onde qui se propage et s'amortit au cours du temps ; tout d'abord, lors du passage du premier front d'onde, les grains sont forcés en déplacement et ils ne sont plus à l'équilibre ; c'est la réponse instantanée locale du matériau. Les grains relaxent ensuite vers une nouvelle position d'équilibre avant le retour du front d'onde réfléchi ; lors du retour du front, ils sont de nouveau mis en état de déséquilibre et relaxent ; En attendant suffisamment longtemps, l'onde est complètement amortie et tous les grains peuvent atteindre un état d'équilibre, c'est-à-dire qu'ils n'ont plus de mouvement, les forces de contact et les moments étant compensés. Finalement tout le système atteint un nouvel état d'équilibre statique. C'est cet état que nous cherchons maintenant à caractériser ;

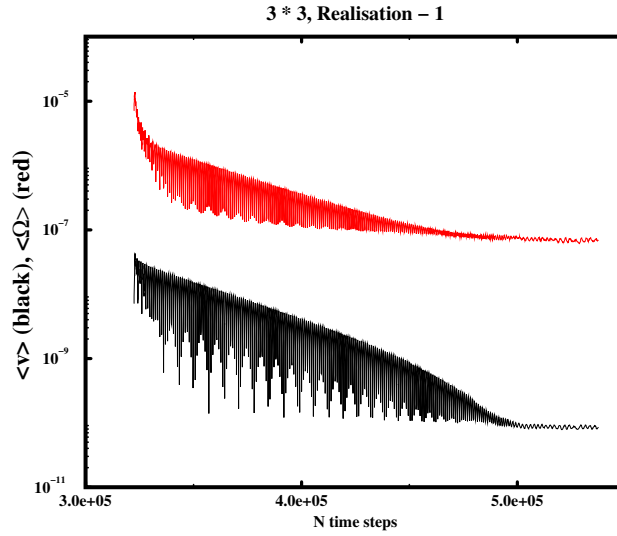


FIG. 5.15 – Relaxation complète du système granulaire après perturbation vers un nouvel état d’équilibre : vitesses et taux de rotations moyennés  $\langle \dot{x} \rangle$  et  $\langle \omega \rangle$  sur l’ensemble des grains ; après 200000 cycles de calcul, le système a complètement relaxé.

nous conduisons donc de nouvelles simulations pour obtenir cette relaxation complète.

Nous utilisons alors un pas de temps plus important  $\delta t = 10^{-8} s$  pour diminuer le temps de calcul, la relaxation complète étant assez longue à obtenir. Dans ces simulations nous regardons l’état final et pour cela il faut choisir des critères permettant de repérer le nouvel état statique. Nous pouvons par exemple regarder l’évolution de la moyenne des vitesses  $\langle \dot{x} \rangle$  et des taux de rotations  $\langle \omega \rangle$  des particules ; sur la figure 5.15 (a), on présente cette évolution pour une simulation typique. Après avoir atteint un pic, les valeurs de ces moyennes diminuent avec le temps ; il faudrait définir un seuil à partir duquel on définit l’état statique ; en réalité c’est la précision numérique qui nous impose ce seuil.

Une fois que l’on a atteint l’état statique, on peut mesurer le champ de contraintes résultant et le comparer à l’état de référence pour obtenir finalement la fonction réponse du matériau.

On présente sur la figure 5.16 (à droite), les distributions des contraintes  $\Delta \sigma_{ij}$  à l’état statique ; globalement, ces distributions ressemblent aux distributions que l’on avait décrites lors de la propagation.

### Effet de taille finie

Nous avons réalisé des simulations avec différentes tailles de système ( $L_0 \times L_0$ ,  $2L_0 \times 2L_0$  et  $3L_0 \times 3L_0$ ) pour connaître la taille minimale à considérer afin de pas avoir des résultats biaisés par des effets de taille finie.

Nous avons mis en évidence l’existence de ces effets de taille finie pour plusieurs composantes du tenseur des contraintes, comme cela est montré sur la figure 5.18. Si la composante verticale  $\Delta \sigma_{22}$  n’est pas sensible à la taille de système, les deux autres composantes  $\Delta \sigma_{11}$  et  $\Delta \sigma_{12}$  sont elles sensibles.

On constate que le profil  $\Delta \sigma_{11}(x)$  pour la plus petite taille de système est assez différent des profils obtenus aux plus grandes tailles de système ; c’est l’effet de la rugosité des parois

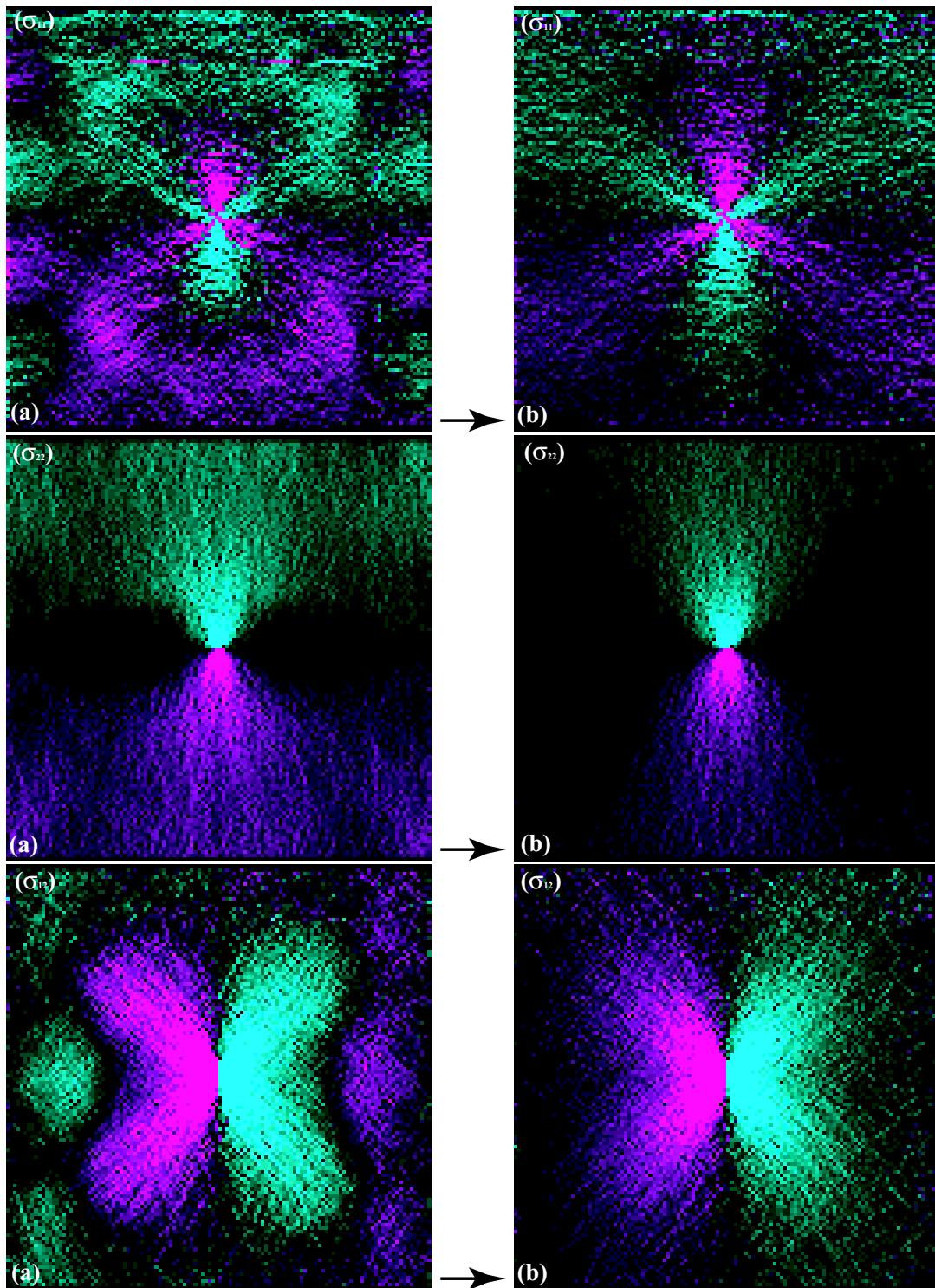


FIG. 5.16 – Perturbation du champ de contraintes à  $N = 30000$  et à  $N = 300000$  cycles (équilibre statique) - pour les 3 composantes indépendantes du tenseur (en haut)  $\sigma_{11}$ , (au centre)  $\sigma_{22}$ , (en bas)  $\sigma_{12}$  - dans un système de  $N = 90000$  grains soumis localement à une très faible perturbation, une force de contact verticale dirigée vers le bas et de module  $f^{(G)} = 10^{-6}\langle f^{(c)} \rangle$ . L'échelle de couleur correspond à l'intensité de la perturbation : (en magenta) un état compressif ou un cisaillement positif, (en cyan), un état de dilatation ou un cisaillement négatif.

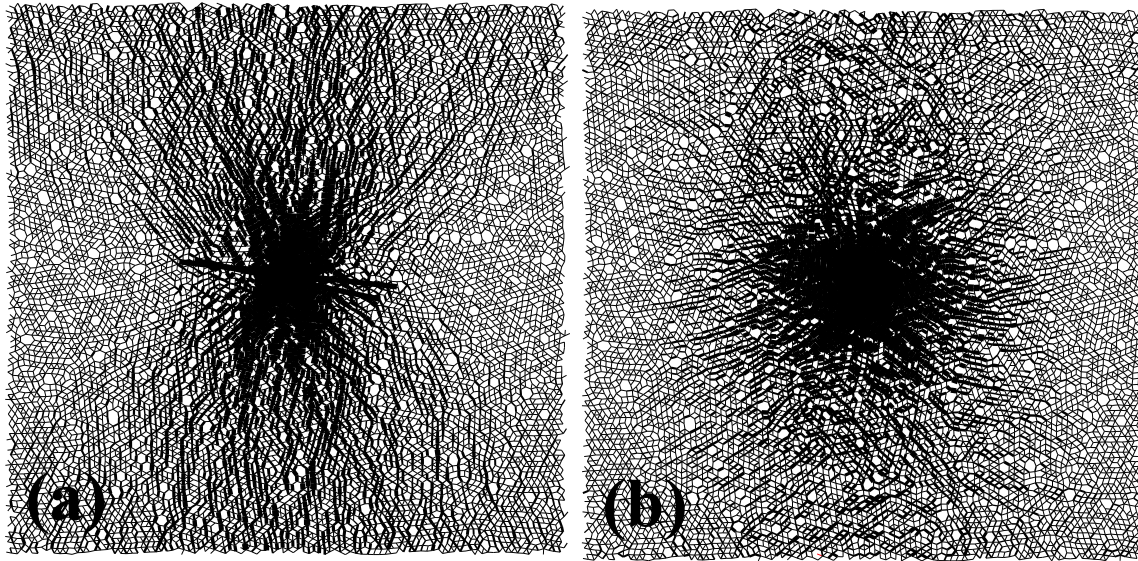


FIG. 5.17 – Perturbation des réseaux de forces à l'équilibre statique ( $N = 300000$  cycles); (à gauche) réseau des forces normales, (à droite) réseau des forces transversales; l'épaisseur des segments est proportionnelle à l'intensité de la perturbation des forces de contact.

horizontales qui se fait sentir. Lorsque la taille de système augmente, on s'éloigne des parois pour la même profondeur  $y = -10$ .

On considérera que pour des tailles de système  $3L_0 \times 3L_0$ , les effets de taille finie saturent pour les profondeurs pas trop importantes; on sait qu'il faut à peu près un rapport de taille 3 à 4 entre les dimensions verticales et horizontales pour éviter ces effets.

### Symétrie de la réponse

Sur la figure 5.19, on compare les réponses à l'état statique au-dessous et au-dessus de la perturbation; pour les composantes horizontales et verticales des contraintes  $\Delta\sigma_{11}$ ,  $\Delta\sigma_{22}$ , on note une symétrie verticale de la réponse. Pour la composante verticale, la distribution des contraintes (état compressif) sous la perturbation est exactement similaire à la distribution des contraintes (état extensif) au-dessus de la perturbation.

### 5.2.4 Comparaison avec l'élasticité

Nous allons maintenant comparer les résultats de nos simulations avec les prédictions de la théorie; dans un premier temps, nous considérerons le problème d'un espace bidimensionnel semi-infini, c'est-à-dire sans présence de *fond*; dans un deuxième temps, nous nous intéresserons au problème d'un espace bidimensionnel de dimensions finies pour prendre en considération les effets de la présence d'un *fond* et d'un *toit*.

#### Elasticité - cas d'un milieu semi-infini

**Les profils de contraintes de Boussinesq** Les résultats de nos simulations numériques sont comparés avec les prédictions de la théorie élastique; un matériau élastique homogène linéaire isotrope est complètement caractérisé par le jeu de deux coefficients élastiques (module d'Young  $E$  et coefficient de Poisson  $\nu$  par exemple).



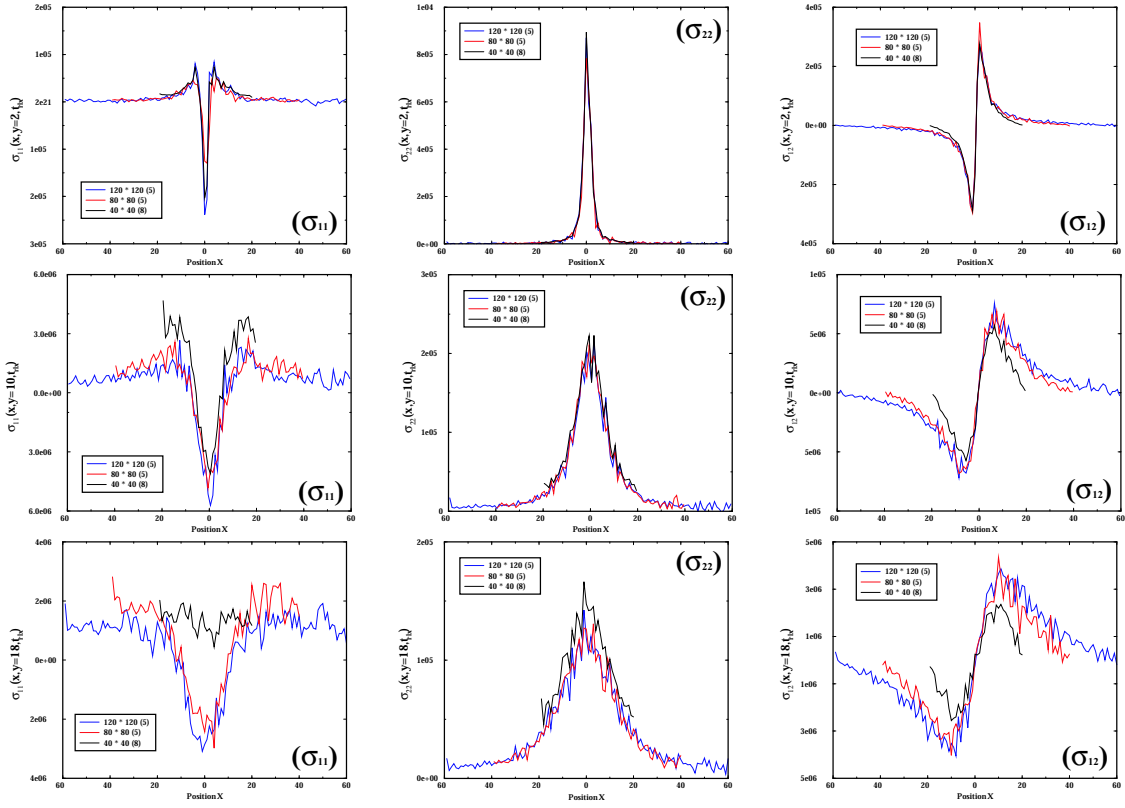


FIG. 5.18 – Profils horizontaux des trois composantes du tenseur des contraintes  $\Delta\sigma_{11}$ ,  $\Delta\sigma_{22}$  et  $\Delta\sigma_{12}$  après relaxation complète, pour trois profondeurs  $y = -2$  (en haut),  $y = -10$  (au centre),  $y = -18$  (en bas) et pour trois tailles de système  $1 \times 1$  (10000 grains) en noir,  $2 \times 2$  (40000 grains) en rouge, et  $3 \times 3$  (90000 grains) en bleu ; Chaque profil est issu de la moyenne des réponses pour 10 réalisations différentes ;  $\Delta\sigma_{12}(x, y)$  est sensible à la taille de système,  $\Delta\sigma_{11}(x, y)$  dans une moindre mesure, et  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$  pratiquement pas.

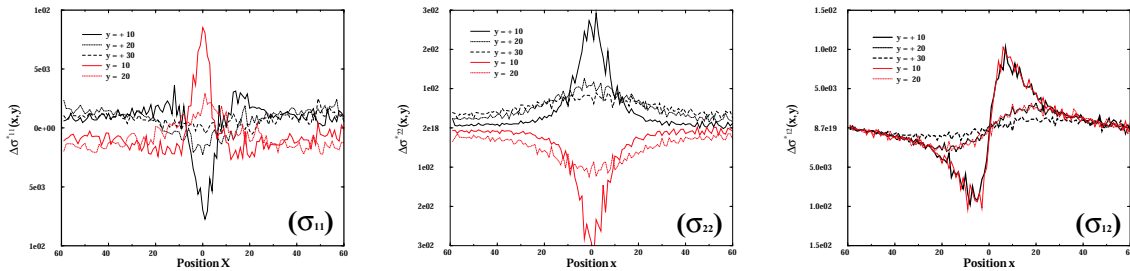


FIG. 5.19 – Profils horizontaux des trois composantes du tenseur des contraintes (à gauche)  $\Delta\sigma_{11}$ , (au centre)  $\Delta\sigma_{22}$ , (à droite)  $\Delta\sigma_{12}$  après relaxation complète à différentes profondeurs, pour la taille de système  $3 \times 3$  (90000 grains) ; Chaque profil est issu de la moyenne des réponses pour 10 réalisations différentes. Les profils compressifs et extensifs sont symétriques par rapport à l'horizontale passant par le centre du système  $y = 0$ .



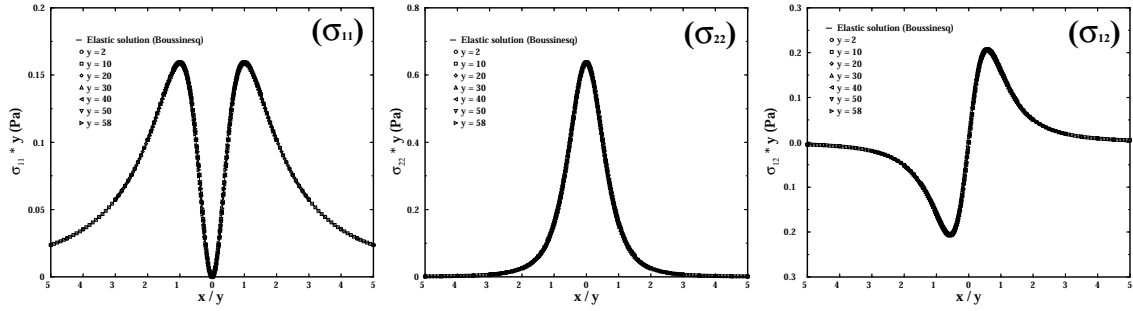


FIG. 5.20 – Profils de contraintes (a)  $\Delta\sigma_{11}(x)$ , (b)  $\Delta\sigma_{22}(x)$ , (c)  $\Delta\sigma_{12}(x)$  remis à l'échelle élastique prédits par la théorie élastique dans le cas d'un milieu semi-infini en géométrie 2D à différentes profondeurs  $y = 2$ ,  $y = 10$ ,  $y = 20$ ,  $y = 30$ ,  $y = 40$ ,  $y = 50$  et  $y = 58$  pour une force de perturbation unitaire  $F = 1$ .

La solution élastique de Boussinesq [149] [86] [33] nous donne les profils de réponse en terme de contraintes  $\Delta\sigma_{11}(x)$ ,  $\Delta\sigma_{22}(x)$  et  $\Delta\sigma_{12}(x)$ , à une profondeur  $y$ , pour un espace bidimensionnel semi-infini :

$$\Delta\sigma_{11}(x, y)^{2D} = \frac{2F}{\pi} \frac{yx^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (5.10)$$

$$\Delta\sigma_{22}(x, y)^{2D} = \frac{2F}{\pi} \frac{y^3}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (5.11)$$

$$\Delta\sigma_{12}(x, y)^{2D} = \frac{2F}{\pi} \frac{xy^3}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (5.12)$$

où  $F$  est l'intensité de la force appliquée ponctuellement sur le matériau ; on remarquera que cette solution ne dépend pas du jeu de paramètres élastiques qui définit le matériau.

Sur la figure 5.20, on présente la forme de ces profils de contraintes  $\Delta\sigma_{ij}(x)$  pour différentes profondeurs  $y$ , tous remis à l'échelle élastique (voir figure 5.20) ; la composante verticale  $\Delta\sigma_{22}(x)$  se présente sous la forme d'un pic central symétrique horizontalement, de valeurs exclusivement positives ; la composante horizontale  $\Delta\sigma_{11}(x)$  présente un double pic avec un creux central symétrique horizontalement et de valeurs exclusivement positives également ; la composante de cisaillement  $\Delta\sigma_{12}(x)$  possède une symétrie centrale.

**Comparaison avec les profils issus des simulations à l'état statique** Sur la figure 5.21 les résultats de nos simulations numériques à l'état statique après relaxation complète en terme de champ de contraintes résultant de l'application d'une force ponctuelle dans l'échantillon granulaire numérique, sont comparés aux profils de Boussinesq de la figure 5.20.

Tout d'abord, nous avons comparé les profils numériques normalisés par l'intensité de force ponctuelle  $f_{FR} = \epsilon\langle f \rangle$  imposée au système (sur un grain) et remis à l'échelle élastique. Nous constatons que les profils numériques ne sont pas compatibles avec la solution de Boussinesq.

Si par contre, on normalise les profils  $\Delta\sigma_{ij}(x, y)$  par l'intégrale  $\int_{-L_1/2}^{+L_1/2} \sigma_{22}(x, y) dx$ , alors les résultats numériques deviennent en meilleur accord avec la solution élastique de Boussinesq.

Pourtant dans un milieu élastique, la valeur de l'intégrale  $\int_{-L_1/2}^{+L_1/2} \sigma_{22}(x, y) dx$  devrait être exactement égale à l'intensité de la force appliquée ; ceci nous laisse donc penser que le matériau granulaire ne se comporte pas tout à fait comme un matériau élastique et qu'une fraction de la force appliquée s'est dissipée.

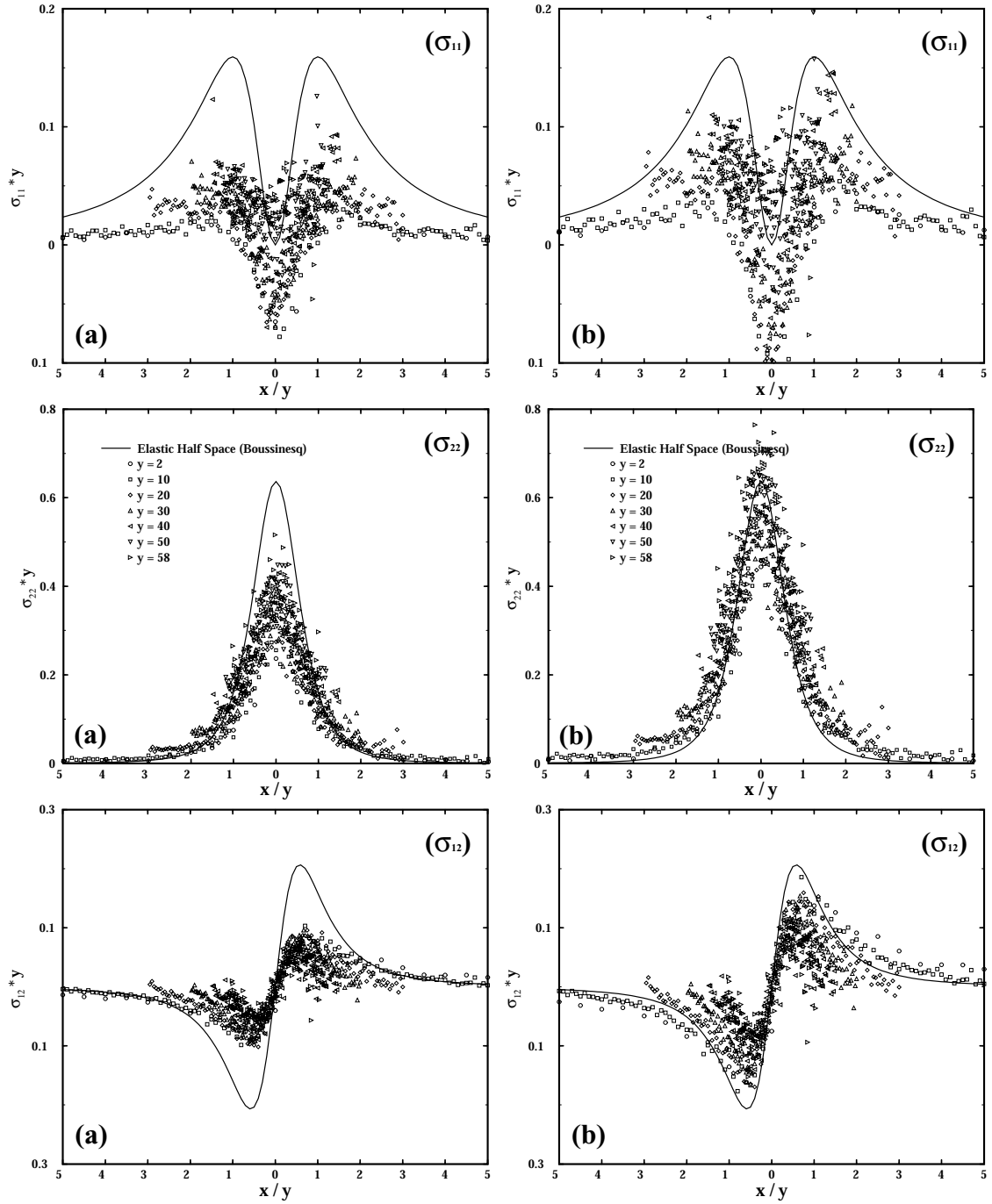


FIG. 5.21 – Profils de contraintes résultants des simulations numériques à l'état statique (a)  $\Delta\sigma_{11}(x)$ , (b)  $\Delta\sigma_{22}(x)$ , (c)  $\Delta\sigma_{12}(x)$  à différentes profondeurs  $y = 2, y = 10, y = 20, y = 30, y = 40, y = 50$  et  $y = 58$  : (à gauche) les profils sont normalisés par la force  $F$  imposée au matériau et sont globalement incompatibles avec les profils de Boussinesq, (à droite) les profils sont normalisés par l'intégrale  $\int_{-L_1/2}^{+L_1/2} \sigma_{22}(x) dx$  et deviennent *plus* compatibles avec les profils de Boussinesq.

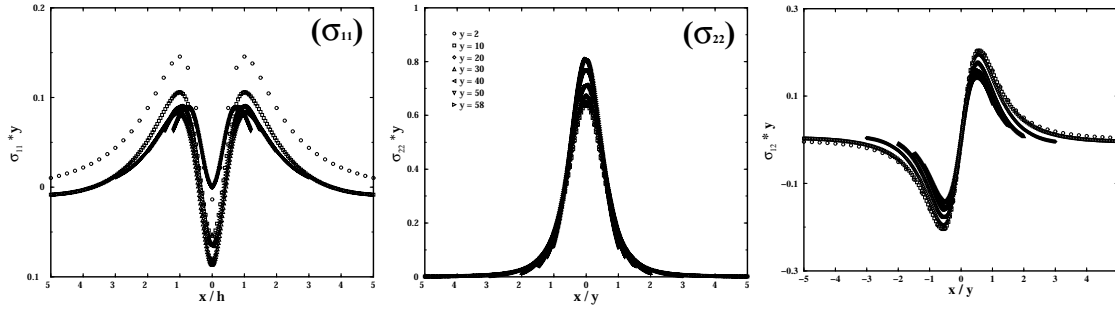


FIG. 5.22 – Profils de contraintes (a)  $\Delta\sigma_{11}(x)$ , (b)  $\Delta\sigma_{22}(x)$ , (c)  $\Delta\sigma_{12}(x)$  remis à l'échelle élastique prédits par la théorie élastique dans le cas d'un système de taille finie en présence d'un *fond* et d'un *toit* en géométrie  $2D$  à différentes profondeurs  $y = 2, y = 10, y = 20, y = 30, y = 40, y = 50$  et  $y = 58$  pour une force de perturbation unitaire  $F = 1$ .

Cependant, il n'y a rien d'étonnant à ce que la solution de Boussinesq soit incompatible avec les résultats de nos simulations; en effet la géométrie du problème considéré dans nos simulations est assez différente; aux extrémités verticales en  $y = +L_2/2$  et  $y = -L_2/2$ , nous sommes en présence d'un *fond* et d'un *toit* rigides.

Nous allons donc nous intéresser à la résolution du problème élastique dans la même géométrie que celle employée dans nos simulations.

### Elasticité - cas isotrope en présence d'un *fond* et d'un *toit*

**La solution élastique** Le milieu bidimensionnel considéré est supposé élastique linéaire isotrope de taille verticale  $L_2$ ; la prise en compte de la géométrie spécifique [143], c'est-à-dire la présence d'un *fond* et d'un *toit* implique d'y spécifier des conditions aux limites.

On pose alors la condition de déplacement nul à ces limites rigides du système :

$$u_y(x, y = \pm L_2/2) = 0 \quad (5.13)$$

On peut ensuite choisir sur ces limites rigides entre une condition de type rugueuse :

$$u_x = 0, \quad (5.14)$$

ou bien une condition parfaitement lisse :

$$\sigma_{12} = 0, \quad (5.15)$$

Pour comparer aux conditions limites posées dans les simulations, nous nous intéressons exclusivement aux cas rugueux; en effet dans nos simulations, les déplacements verticaux et horizontaux des grains aux frontières sont nuls ( $u_y^{(p)}$  et  $u_x^{(p)}$ ); d'autre par le coefficient de frottement  $\mu_f$  au contact de ces grains est également non nul ( $\mu_f^{(c)} = 0.3$ ) et par conséquent  $\sigma_{12}(x, y = \pm L_2/2) \neq 0$ .

Une force unité est appliquée verticalement vers le bas au centre du système ( $x = 0$  et  $y = 0$ ) sous la forme d'un profil gaussien normalisé :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp^{-x^2/2\sigma^2}, \quad (5.16)$$

où  $\sigma$  est le seul paramètre ajustable qui définit la largeur du profil.

Un autre paramètre qui intervient dans la résolution de ce problème est le coefficient de Poisson de l'assemblage  $\nu_e$  ; on rappelle que le coefficient de Poisson est borné par la valeur 0.5 pour des considérations énergétiques.

Le calcul élastique de ce problème a été réalisé par Ping Wang étudiant en thèse sous la direction de Hernan Makse au Levich Institute (City College of CUNY) dans le cadre de notre collaboration sur cette étude ; un programme de résolution numérique a été élaboré sous le logiciel Mathematica afin d'obtenir les profils de contraintes.

Ping Wang, nous a communiqué ses résultats pour différentes tailles de système  $L_0$ , différentes largeurs de profil de perturbation  $\sigma$  et différent coefficient de poisson  $\nu_e$ .

La résolution numérique de la fonction réponse montre une faible sensibilité au coefficient de Poisson  $\nu_e$ . Un coefficient de 0.2 a été choisi pour la prédiction élastique présentée dans cette étude.

En revanche, la résolution est beaucoup plus sensible au choix de la largeur de la perturbation ; une perturbation très étroite (autant que le permet la résolution numérique), la plus proche d'une fonction Dirac a été utilisée.

Sur la figure 5.22, on présente la forme des profils de contraintes  $\Delta\sigma_{ij}(x)$  pour différentes profondeurs  $y$ , tous remis à l'échelle élastique ; on constate que tous les profils ne se superposent pas correctement comme on l'attendrait ; l'origine de cette dispersion n'est pas claire ; il pourrait s'agir de l'effet de taille finie du système dans la résolution numérique (les profils sont tronqués horizontalement). C'est un point qui nécessite clairement une vérification mais dans le temps imparti pour cette étude, il ne nous a pas été possible pour le moment de faire les vérifications nécessaires.

Néanmoins, nous pouvons tout de même tirer des informations de ces profils remis à l'échelle élastique : la forme générale des profils de contraintes est très similaire aux profils de Boussinesq, surtout pour la contrainte verticale  $\Delta\sigma_{22}(x)$  et la contrainte cisailante  $\Delta\sigma_{12}(x)$  : la composante verticale se présente sous la forme d'un pic central symétrique horizontalement, de valeurs exclusivement positives et la composante de cisaillement  $\Delta\sigma_{12}(x)$  possède une symétrie centrale. La composante horizontale  $\Delta\sigma_{11}(x)$  présente également un double pic de valeurs positives avec un creux central symétrique horizontalement mais cette fois-ci une part des valeurs est négatives (l'amplitude négative du creux est à peu près de l'ordre de l'amplitude positive des pics).

Il est difficile de comparer ces profils de contraintes aux profils de Boussinesq étant donné la dispersion des profils remis à l'échelle ; Il semble que globalement, l'amplitude du pic de contrainte verticale soit supérieure à l'amplitude du pic de Boussinesq ; pour la composante horizontale en revanche, l'amplitude du double pic semble plus faible que celle du profil de Boussinesq.

Les résultats de nos simulations numériques sont comparées avec les prédictions de la théorie élastique ; un matériau élastique homogène linéaire isotrope est complètement caractérisé par le jeu de deux coefficients élastiques (module d'Young  $E$  et coefficient de Poisson  $\nu$  par exemple).

**Comparaison avec les profils issus des simulations à l'état statique** Sur la figure 5.23 les résultats de nos simulations numériques à l'état statique après relaxation complète en terme de champ de contraintes résultant de l'application d'une force ponctuelle dans l'échantillon granulaire numérique, sont comparés aux profils de la solution élastique en présence d'un *fond* et d'un *toit* de la figure 5.22.

Comme dans le cas précédent, pour la comparaison des résultats des simulations avec les profils de Boussinesq, nous avons comparé les profils numériques normalisés par l'intensité de force ponctuelle  $f_{FR} = \epsilon\langle f \rangle$  imposée au système (sur un grain) et remis à l'échelle élastique. Les profils des simulations numériques ne sont toujours pas compatibles avec la nouvelle solution.

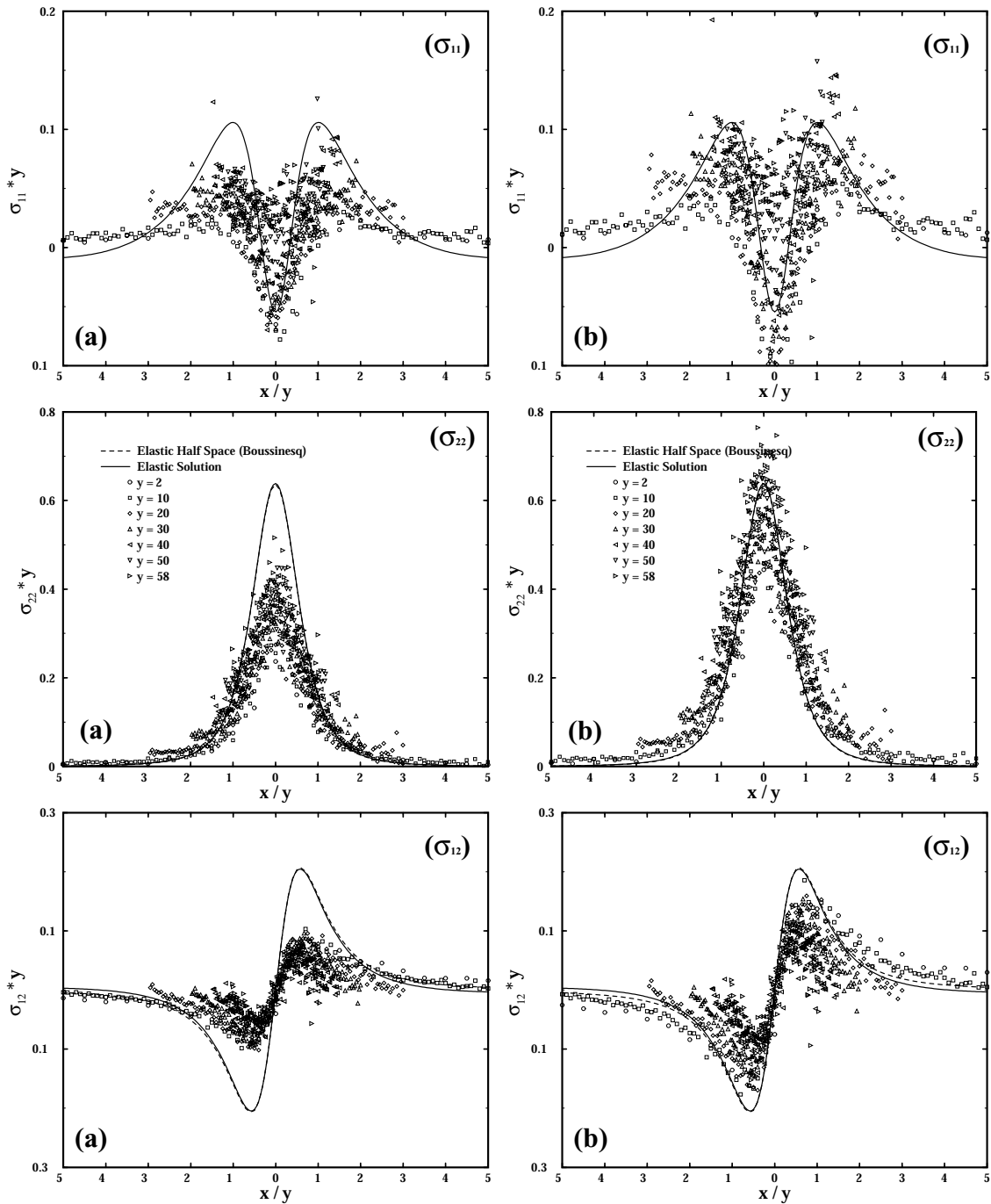


FIG. 5.23 – Profils de contraintes résultants des simulations numériques à l'état statique (a)  $\Delta\sigma_{11}(x)$ , (b)  $\Delta\sigma_{22}(x)$ , (c)  $\Delta\sigma_{12}(x)$  à différentes profondeurs  $y = 2, y = 10, y = 20, y = 30, y = 40, y = 50$  et  $y = 58$  : (à gauche) les profils sont normalisés par la force  $F$  imposée au matériau et sont globalement incompatibles avec les profils de la solution numérique en présence de *fond* et de *toit*, (à droite) les profils sont normalisés par l'intégrale  $\int_{-L_1/2}^{+L_1/2} \sigma_{22}(x) dx$  et deviennent *plus* compatibles avec ces profils.

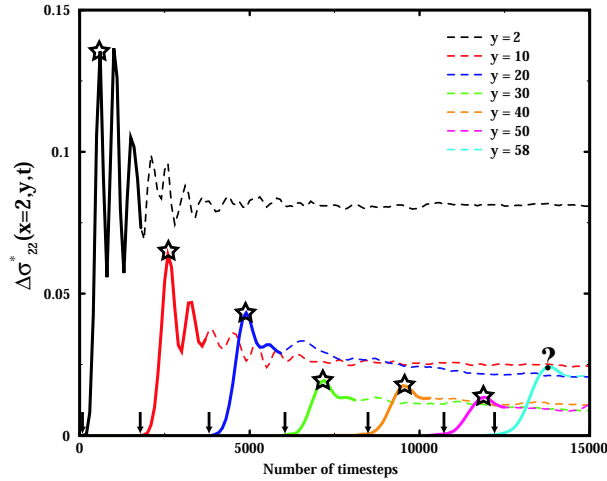


FIG. 5.24 – Réponse instantanée à la perturbation par le repérage de la première arrivée du front de propagation de la perturbation ; le front d’onde qui se déplace à la vitesse  $c$  se dilate lors de la propagation et sa largeur  $l(t)$  augmente avec le temps ; en  $\vec{r}$  on mesure l’arrivée sur un intervalle de temps  $[r/c - \epsilon_t; r/c + \epsilon_t]$  et on repère le maximum de  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$ .

Maintenant, on normalise les profils  $\Delta\sigma_{ij}(x, y)$  par l’intégrale  $\int_{-L_1/2}^{+L_1/2} \sigma_{22}(x, y) dx$ , et les résultats numériques deviennent également en meilleur accord avec la solution élastique.

En réalité, c’est surtout au niveau des profils de contraintes horizontales, que la nouvelle solution élastique qui prend en compte la présence d’un *fond* et d’un *toit* rigides est importante ; en effet, après normalisation par l’intégrale, les profils numériques horizontaux deviennent en bon accord avec la solution élastique

Cependant comme on l’avait déjà noté, le désaccord entre les profils numériques normalisés par la force appliquée et les solutions élastiques laisse supposer des phénomènes de dissipation dans le matériau granulaire à la suite de l’application de la perturbation.

### 5.2.5 Comparaison de la réponse statique et de la réponse dynamique

La comparaison des fonctions réponses obtenues par les simulations numériques avec celles prédites par l’élasticité, nous laisse penser qu’une partie de l’énergie transférée au système lors de l’application de la perturbation est ensuite dissipée, ce qui se traduit par une relaxation des contraintes et ceci expliquerait les amplitudes plus faibles observées dans les simulations numériques.

Pour étudier ce phénomène de relaxation, il peut être intéressant de séparer la réponse élastique instantanée de la réponse inélastique consécutive.

#### Définitions des deux types de réponse

**Réponse élastique instantanée** Pour mesurer la réponse élastique instantanée, il faut se placer dans le référentiel du front de perturbation ; sur la figure 5.14, on avait représenté les traces de mesures de l’amplitude de la composante verticale du tenseur des contraintes  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$  en fonction du temps en différents points du système. Avant l’arrivée du front, l’amplitude mesurée est nulle, puis on observe une augmentation de l’amplitude au passage du front ; comme le front à une certaine largeur, l’augmentation de l’amplitude est graduelle ; elle atteint une valeur maximale au centre du front, puis diminue lorsque le front s’éloigne.

En réalité, l'application d'une perturbation de type 'marche' en terme de force sur un grain se traduit dans les simulations par la génération d'une succession de fronts de perturbation due à la nature élastique des interactions de contacts. C'est ce qui explique la nature complexe de la réponse après le passage du premier front d'onde.

Si on se focalise uniquement sur la réponse locale au passage du premier front, on peut mesurer en tout point, le premier maximum en terme de contrainte verticale comme on peut le voir sur la figure 5.24. Il s'agit de la mesure de la contrainte en chaque point si l'on se place sur le référentiel qui se propage avec le front. C'est ce maximum de réponse *instantanée* que nous considérons comme étant la réponse élastique du matériau granulaire.

**Evolution de la réponse** L'évolution locale de la réponse dans le matériau granulaire est complexe et est fonction de l'éloignement horizontal et vertical par rapport au point d'application de la perturbation.

**Réponse à l'équilibre statique** Le terme d'amortissement numérique présent dans la modélisation permet de faire évoluer le système vers un état d'équilibre statique et de dissiper efficacement l'énergie cinétique transférée aux particules sous l'impulsion de la perturbation.

### Comparaison des profils instantanés et statiques avec la théorie élastique

Nous comparons les différents modes de réponse de nos simulations numériques avec les prédictions de l'élasticité.

Sur la figure 5.25, nous avons représenté les profils de contraintes normalisés par la force appliquée  $F$  pour les trois composantes, horizontale  $\Delta\sigma_{11}(x, y)$ , verticale  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$  et cisailante  $\Delta\sigma_{12}(x, y)$  à différentes profondeurs  $y$ , pour la théorie élastique, pour la réponse instantanée et pour la réponse à l'état statique.

Malgré la dispersion des profils numériques, globalement pour les profondeurs considérées, nous trouvons un bon accord entre la réponse instantanée et la réponse élastique. La réponse à l'état statique est globalement par contre plutôt en désaccord, d'amplitude toujours plus faible.

La réponse instantanée correspond donc à un état de déséquilibre du système ; les réarrangements locaux des grains permettent au système de relaxer et l'amplitude de cette relaxation est relativement importante.

Nos simulations clarifient donc les déficiences de la prédiction élastique. La relaxation des grains après une déformation affine infinitésimale est donc une composante essentielle de la fonction réponse.

## 5.2.6 Dépendance de la largeur des profils avec la profondeur

### Méthodes de calcul de la largeur

**Présentation des méthodes** Les fonctions réponses d'assemblages granulaires denses ont été obtenues à partir des simulations numériques où l'on s'intéresse : 1/ à l'état statique de l'assemblage après relaxation complète ( $\Delta\sigma_{22}(x, y, t_{RLX})$ ), 2/ à la réponse instantanée sur le front de propagation de la perturbation  $\Delta\sigma_{22}(y(x, c))$ .

Nous pouvons alors calculer la largeur des profils  $W$  en fonction de la profondeur  $y$ .

Nous avons deux possibilités pour estimer la largeur  $W$  :

- soit nous calculons le second moment de la distribution  $W_{SM}$  comme suit :

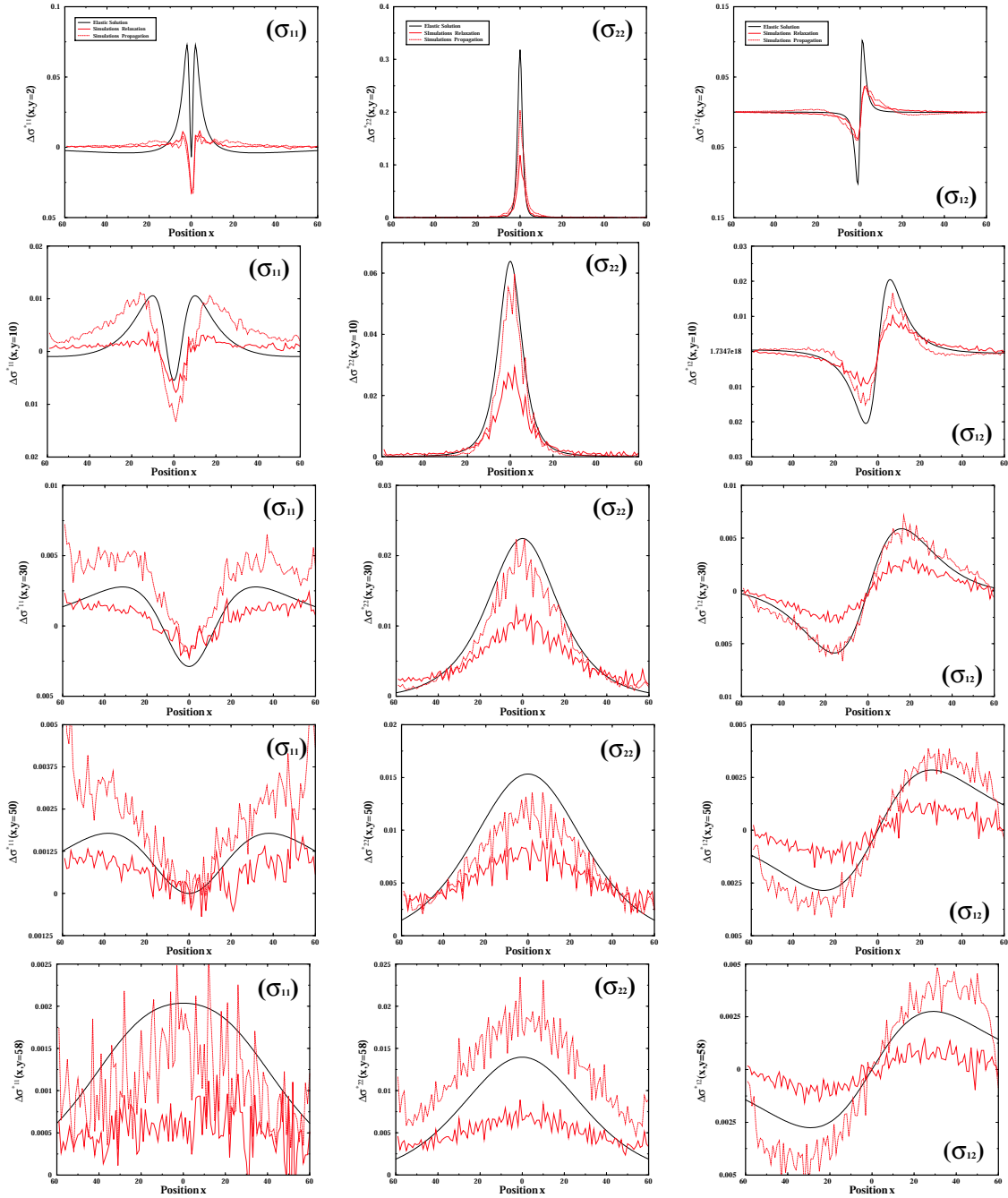


FIG. 5.25 – Comparaison des profils de contraintes ((à gauche)  $\Delta\sigma_{11}(x)$ , (au centre)  $\Delta\sigma_{22}(x)$ , (à droite)  $\Delta\sigma_{12}(x)$ ), à différentes profondeurs ((a)  $y = 2$ , (b)  $y = 10$ , (c)  $y = 30$ , (d)  $y = 50$  et (e)  $y = 58$ ), de la théorie élastique (tracé noir) et des simulations numériques correspondantes (1) à la première arrivée du front de perturbation (trait pointillé rouge), (2) à la relaxation complète (trait plein rouge) ; globalement, la théorie élastique est en bien meilleur accord avec la réponse instantanée lors du passage du front, qu'avec la réponse qui suit la relaxation.



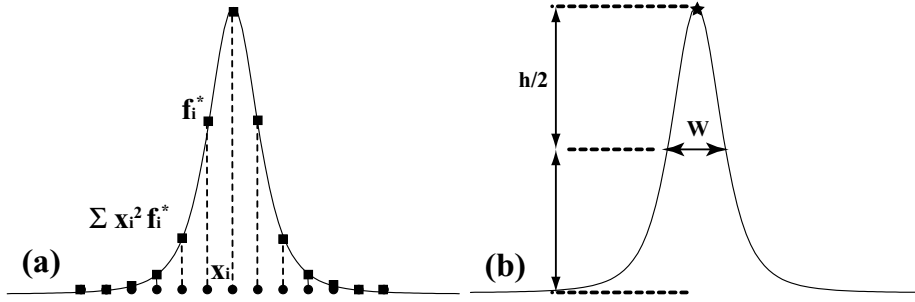


FIG. 5.26 – Méthodes de calcul de la largeur  $W$  d'une distribution  $f(x)$  : (a)  $W_{SM}$  par le second moment et (b)  $W_{1/2}$  par la largeur à *mi-hauteur*.

$$W_{SM}(y) = \frac{\sum x^2 \Delta\sigma_{22}(x, y)}{\sum \Delta\sigma_{22}(x, y)}, \quad (5.17)$$

- soit nous estimons la largeur du pic de réponse à mi-hauteur (1) en ajustant le profil avec une fonction *cloche* (une gaussienne par exemple), (2) ou bien nous appliquons au jeu de données représentant le profil un algorithme de *spline*, qui permet d'échantillonner le profil à n'importe quelle abscisse  $x$ .
- Après avoir déterminé le maximum du profil de contraintes  $\max(\Delta\sigma_{22}(x, y))$ , nous identifions l'abscisse à mi-hauteur  $x_{1/2} = f^{-1}(\frac{1}{2}\max(\Delta\sigma_{22}(x, y)))$ , et nous avons alors :

$$W_{1/2}(y) = 2|x_{1/2}| = 2|f^{-1}(\frac{1}{2}\max(\Delta\sigma_{22}(x, y)))|, \quad (5.18)$$

**Remarques** Les deux méthodes ne fournissent pas la même valeur de largeur  $W$  pour une distribution  $f(x)$  parfaitement définie car elles ne sont pas basées sur la même définition de la largeur ; il ne faut donc pas comparer des largeurs obtenues avec deux méthodes différentes.

Sur des jeux de données, ces calculs entraînent une légère dispersion mais qui ne prête pas à conséquence sur l'interprétation de la forme de la dépendance de la largeur des profils avec la profondeur.

**Précautions sur l'effet de taille finie** Dans un problème numérique, la géométrie est de taille finie ; nous savons qu'un profil  $\Delta\sigma_{ij}(x, y)$  est globalement représentatif, lorsque le rapport entre la taille horizontale du système  $L_1$  et la profondeur  $y$  vaut au moins 3 à 4.

Par conséquent, dans les assemblages granulaires simulés où la plus grande taille horizontale est de  $L_1 = 120$  (en unité de subdivisions du système), nous savons qu'au-delà d'une profondeur  $y = 30$  à  $y = 40$ , les profils ne seront pas représentatifs.

## Dépendance de la largeur des profils pour les théories élastiques

**Dépendances des largeurs élastiques par le second moment** Pour chaque taille de système  $xL_0 \times xL_0$ , et pour chaque profondeur  $y$ , nous avons calculé le Second Moment  $W_{SM}$  de la distribution  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$ , selon l'équation 5.17.

Sur la figure 5.27, nous avons tracé l'évolution du Second Moment des profils de réponses, pour les théories élastiques (solution de Boussinesq sans *fond* et solution numérique avec *fond*).

Pour la théorie élastique d'un milieu semi-infini, le calcul de la largeur  $W$  par le second moment donne une dépendance linéaire en fonction de la profondeur selon une pente 1.

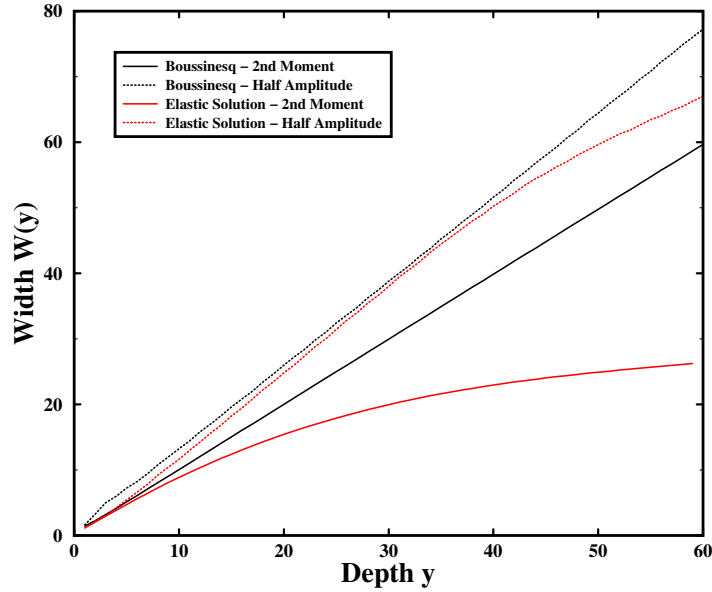


FIG. 5.27 – Dépendance de la largeur  $W$  des profils de contraintes normalisés  $\sigma_{22}^*(x)$  avec la profondeur  $y$  pour les théories élastiques sans *fond* (en noir) et avec *fond* et *toit* (en rouge) : le calcul de  $W_{SM}$  par la méthode du second moment est biaisé lorsque les profils sont tronqués (cas du calcul numérique élastique avec *fond*) ; pour la solution élastique de Boussinesq, la dépendance est linéaire et sa pente vaut  $\approx 1$  ; la largeur à mi-hauteur donne une autre dépendance linéaire pour les deux théories élastiques de pente  $\approx 1.3$ .

Ce n'est pas le cas pour la théorie élastique en présence de *fond* ; cette solution a été calculée numériquement avec une taille de système  $3L_0 \times 3L_0$  ; par conséquent, les profils sont tronqués horizontalement et les valeurs de largeurs calculées sont biaisées. La largeur est sous-estimée à toutes les profondeurs mais les effets augmentent lorsque la profondeur devient plus grande. Les profils ne sont donc pas représentatifs dû à l'effet de taille finie.

On remarque que cette dépendance ressemble à celle d'un modèle de type diffusif (q-model) qui prévoit  $W \propto y^{1/2}$ , mais en réalité ce n'est que l'artefact du mode de calcul, biaisé.

Nous allons donc utiliser l'autre méthode pour estimer la largeur de la distribution  $W$  afin de pouvoir comparer les dépendances des deux solutions élastiques.

**Dépendance des largeurs élastiques à mi-hauteur** Pour chaque taille de système  $xL_0 \times xL_0$ , et pour chaque profondeur  $y$ , nous avons estimé la largeur à mi-hauteur  $W_{1/2}$  de la distribution  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$ .

Les largeurs  $W_{1/2}$  obtenues par les deux théories sont cette fois toutes les deux proportionnelles à la profondeur  $y$  ; de plus les pentes de ces deux dépendances sont quasiment identiques, 1,28 pour la solution de Boussinesq et 1,30 pour la solution avec *fond*.

On remarque l'effet de taille finie, pour la solution élastique avec *fond* à partir de la profondeur  $y \approx 40$ .

### Largeurs des fonctions réponses issues des simulations

**Largeur de la réponse à l'état statique après relaxation complète** Sur la figure 5.28, nous présentons l'évolution de la largeur  $W$ , calculée par le Second Moment de la distribution

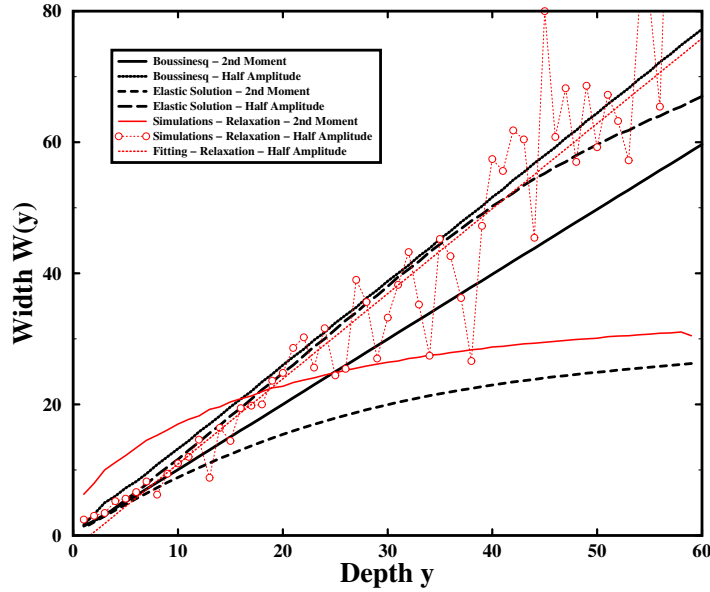


FIG. 5.28 – Dépendance de la largeur  $W$  des profils de contraintes normalisés  $\sigma_{22}^*(x)$  avec la profondeur  $y$  pour les simulations de relaxation complète où les assemblages granulaires sont à l'état statique : le calcul de  $W_{SM}$  par la méthode du second moment est biaisé (dispersion aux grandes abscisses, profils tronqués aux grandes profondeurs) ; la dépendance obtenue par la largeur à mi-hauteur  $W_{1/2}$  est compatible avec la théorie élastique en présence d'un *fond* et d'un *toit*, elle est linéaire de pente 1, 3.

$W_{SM}$ , et déterminée à mi-hauteur du *pic* de réponse  $W_{1/2}$ , en fonction de la profondeur  $y$  des couches granulaires, pour les assemblages granulaires à l'état statique après relaxation complète de la perturbation.

On rappelle qu'une unité de subdivision (horizontale ou verticale) du système vaut approximativement 2.5 taille de grains ( $\langle D \rangle$ ).

- Le calcul de la largeur par le second moment de la distribution  $W_{SM}$  est biaisé : aux faibles profondeurs, la dispersion des valeurs des contraintes aux grandes abscisses due au *bruit* numérique surévalue la largeur, et aux profondeurs plus importantes, les distributions sont tronquées dans la mesure où la taille horizontale des systèmes  $L_1$  est trop petite pour obtenir un profil représentatif (i.e.,  $\sum \Delta\sigma^* < 1$ ) et de ce fait, la largeur est sous-évaluée. Par conséquent, cette méthode de mesure de la largeur est inadaptée aux profils de contraintes issues des simulations.
- Le calcul de la largeur à mi-hauteur du profil  $W_{1/2}$  donne cette fois des résultats exploitables. Concernant nos simulations de relaxation complète des assemblages à l'état statique, la largeur  $W_{1/2}$  évolue linéairement avec la profondeur  $y$  sur des profondeurs allant de  $y = 1$  (centre du système) à  $y = 60$  (au niveau du *fond*) ;  
Si on considère le *fit* linéaire des valeurs  $W_{1/2}(y)$  ( en trait pointillé rouge sur la figure 5.28), on obtient une dépendance en très bon accord avec les prédictions de l'élasticité (en absence et en présence de *fond*) pour la même méthode de calcul, pente 1, 3.

Cependant, on rappelle que si la remise à l'échelle est compatible avec les théories élastiques, l'amplitude des profils de contraintes issues des simulations sont plus faibles (voir figure 5.25).

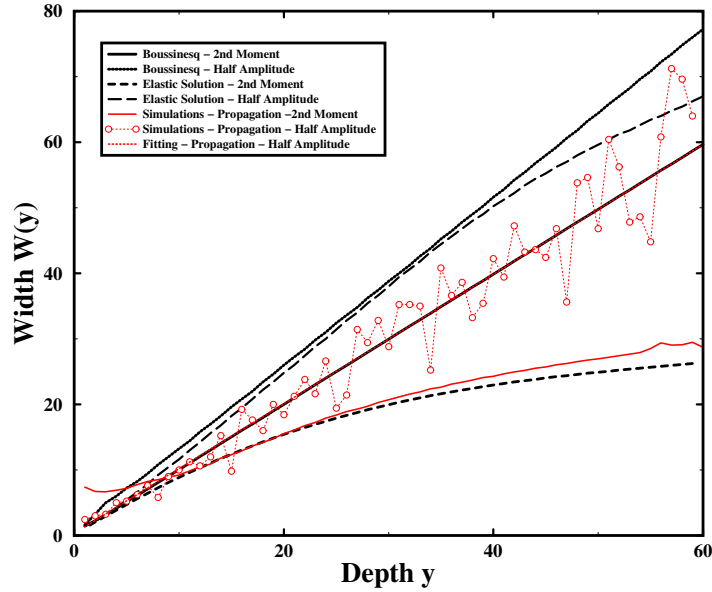


FIG. 5.29 – Dépendance de la largeur  $W$  des profils de contraintes  $\sigma_{22}^*(x)$  avec la profondeur  $y$ , pour les théories élastiques, et pour les simulations de propagation ; la méthode de calcul du second moment est biaisée par la dispersion aux grandes abscisses  $x$  ; globalement, la dépendance obtenue par la largeur à mi-hauteur est compatible avec la théorie élastique d'un espace semi-infini (Boussinesq), pente 1.04.

**Largeur de la réponse instantanée au front de propagation** Sur la figure 5.29, nous présentons l'évolution de la largeur de second moment  $W_{SM}$  et de la largeur à mi-hauteur  $W_{1/2}$  du *pic* de réponse *instantanée* au niveau du front de propagation en fonction de la profondeur  $y$  des couches granulaires.

- De la même façon que pour les simulations de relaxation complète, on constate que le calcul de la largeur par le second moment de la distribution  $W_{SM}$  est biaisé pour les raisons évoquées précédemment.
- Le calcul de la largeur à mi-hauteur du *pic* de réponse  $W_{1/2}$  donne également de bons résultats pour ces simulations ; pour des profondeurs allant de  $y = 1$  à  $y = 60$ , la largeur est proportionnelle à la profondeur, mais le *fit* linéaire des valeurs de  $W_{1/2}$  montre une dépendance qui n'est plus tout à fait en accord avec les prédictions de l'élasticité ; la pente est légèrement plus faible, 1.04 au lieu de  $\approx 1.28$ .

On remarquera, la superposition du *fit* linéaire ( en trait pointillé rouge sur la figure 5.29) avec la prédiction de l'élasticité calculée par le second moment  $W_{SM}$  ; Etant donné que ces dépendances ont été obtenues par deux méthodes de calculs différentes, il n'est pas possible de les comparer.

Nous avons vu que les fonctions réponses instantanées de propagation du front issues des simulations, ont des amplitudes globalement en meilleur accord avec les prédictions des théories élastiques, en comparaison des fonctions réponses après relaxation ; cependant la dépendance de la largeur à mi-hauteur des profils en fonction de la profondeur a une pente plus faible.

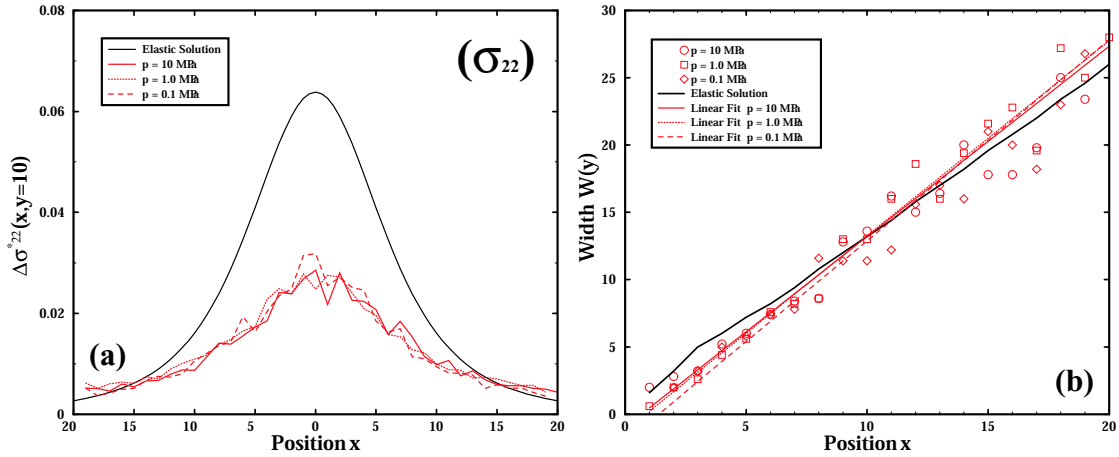


FIG. 5.30 – Pas dévolution de la fonction réponse avec la pression : (a) Profils de contraintes normalisés  $\sigma_{22}^*(x)$  à la profondeur  $y = 10$  pour des systèmes équilibrés à différentes pressions  $p$  (100 KPa en tirets, 1 MPa en trait pointillé et 10 MPa en trait plein) ; ces profils sont comparés au profil de la solution élastique en présence de *fond* et de *toit* ; les profils mesurés aux différentes pressions sont quasiment identiques, mais d’amplitude inférieure au profil élastique. (b) Dépendance de la largeur à mi-hauteur  $W_{1/2}$  des profils de contraintes avec la profondeur  $y$  ; la largeur dépend linéairement de la profondeur en très bon accord avec prédiction élastique

### 5.2.7 Dépendance en pression de la fonction réponse

#### Préparations aux faibles pressions

Dans cette étude numérique, nous avons également regardé l’influence de la pression sur les fonctions réponses des assemblages granulaires denses ; nous avons préparés et équilibrés des systèmes à trois pressions différentes  $p = 100 \text{ KPa}$ ,  $p = 1 \text{ MPa}$  et  $p = 10 \text{ MPa}$ .

Ces systèmes sont composés de 10000 grains (taille  $L_0 \times L_0$ ), soit la plus petite taille ; en effet plus la pression devient faible, plus l’équilibration numérique des assemblages vers l’état statique est longue et délicate à obtenir.

Pour chaque pression, les fonctions réponses ont été moyennées sur un jeu de 10 réalisations, c’est-à-dire de configuration initiale de particules.

#### Profils de contraintes

Sur la figure 5.30 (a), nous présentons les profils de contraintes normalisés  $\Delta\sigma_{22}^*(x)$  à la profondeur  $y = 10$  obtenus après relaxation complète pour les différentes pression, comparés au profil de contraintes de la solution élastique en présence de *fond* et de *toit*.

Nous constatons que les profils moyens pour les trois pressions se superposent presque parfaitement mais que leur amplitude est inférieure à celle du profil élastique ; de même que pour les simulations précédentes à la pression  $p = 10 \text{ MPa}$ , nous pouvons montrer qu’à ces pressions plus faibles, ces écarts d’amplitude sont aussi imputables au phénomène de relaxation granulaire.

Précédemment, nous avons montré la nature élastique de la remise à l’échelle pour les systèmes à la pression  $p = 10 \text{ MPa}$  ; par conséquent la remise à l’échelle pour ces pressions plus faibles est donc elle aussi de type élastique.

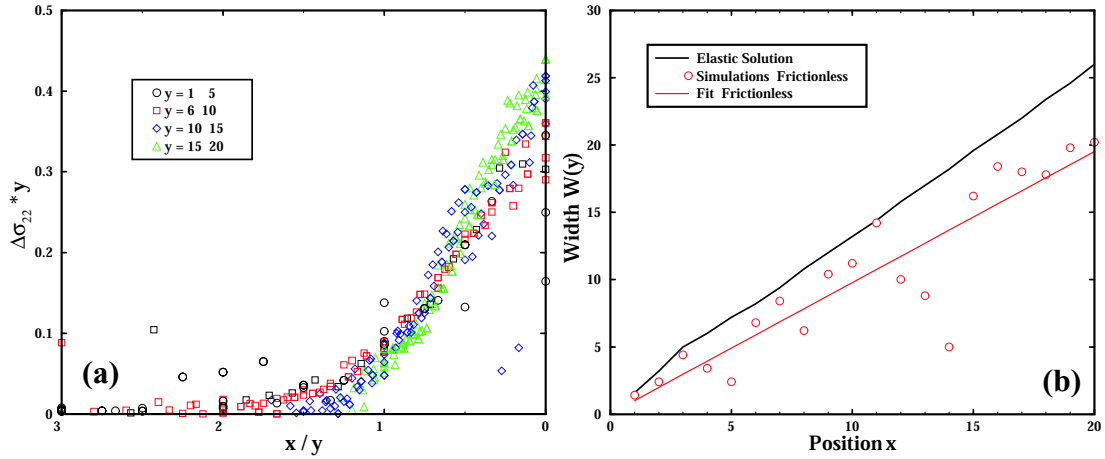


FIG. 5.31 – Fonction réponse d’un système de grains non frottants : (a) profils de contraintes  $\sigma_{22}(x, y)$  remis à l’échelle élastique ; (b) Dépendance de la largeur des profils de contraintes  $W$  avec la profondeur  $y$  ; la largeur dépend linéairement de la profondeur en accord avec la théorie élastique mais avec une pente plus faible

### Largeurs des profils

Nous avons calculé la largeur des profils à mi-hauteur  $W_{1/2}$  à chaque profondeur  $y$  pour les trois pressions et ces résultats sont présentés sur la figure 5.31 (b) ; pour les trois pressions, la largeur  $W$  est proportionnelle à la profondeur  $y$ , ce qui est en accord avec les prédictions de l’élasticité ; les profils de contraintes normalisés étant superposables, la dépendance obtenue est par suite identique pour les trois pressions ; elle est parfaitement compatible avec la dépendance linéaire prédite par l’élasticité.

## 5.2.8 Fonction réponse à friction nulle

### Préparation et Moyennage

Les premières simulations que nous avons réalisées dans le cadre de cette étude l’ont été sur des assemblages de grains non frottants ( $\mu_f^{(c)} = 0$ ).

Ces systèmes sont composés de 10000 grains (dimensions  $L_0 \times L_0$ ) et ont été équilibrés à la pression  $p = 10 \text{ MPa}$  selon le protocole de densification déjà évoqué dans les chapitres suivants ; comme le coefficient de friction aux contacts est nul, les grains peuvent se réarranger sans résistance vers une compacité maximale ; La coordinence moyenne de ces assemblages bidimensionnels est d’environ  $\mathcal{Z}(p = 10 \text{ MPa}) \approx 4.3$ .

Pour obtenir des profils de contraintes représentatifs, nous avons moyenné les fonctions réponses sur un grand nombre de réalisations, près d’une cinquantaine, ce qui est nettement supérieur à la moyenne des systèmes de friction non nulle, où seulement une dizaine de réalisations étaient suffisantes pour obtenir des profils appréciables.

Les réarrangements granulaires étant facilités par l’absence de friction entre les grains, ceci explique la nature très bruitée des profils pour une seule réalisation, d’où la nécessité de moyennner la réponse sur un grand nombre de systèmes.

## Profils de contraintes

Sur la figure 5.31 (a), nous présentons les profils de contraintes  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$  remis à l'échelle élastique; ils se superposent très bien à toutes les profondeurs  $y$  conformément à cette remise à l'échelle. Pour obtenir un profil de contraintes encore plus lisse, nous avons moyenné les deux demi-profils  $\Delta\sigma_{22}(x < 0, y)$  et  $\Delta\sigma_{22}(x > 0, y)$ , ce qui est justifiable de part la nature anisotrope des empilements considérés et la symétrie horizontale du problème.

## Largeur des profils

Nous avons ensuite calculé les largeurs des profils de contraintes à mi-hauteur  $W_{1/2}$  pour toutes les profondeurs  $y$ , présentées en figure 5.31 (b); à nouveau, nous avons obtenu une dépendance linéaire de la largeur des profils avec la profondeur, en accord avec les prédictions des théories élastiques; néanmoins, la pente de cette dépendance linéaire est cette fois-ci inférieure à celle des théories élastique.

## Note d'avertissement

Concernant la figure 5.31 (a), nous attirons l'attention sur le fait que, la valeur absolue des profils de contraintes  $\Delta\sigma_{22}(x, y)$  est à considérer avec précaution; en effet, nous avons un doute concernant un paramètre de normalisation numérique pour ces simulations réalisées au tout début de cette étude, et nous ne pouvons garantir l'amplitude exacte des profils; cependant, ceci ne remet pas en cause les résultats concernant la remise à l'échelle élastique et la dépendance linéaire de la largeur avec la profondeur.

## 5.3 Conclusions

Les observations expérimentales surprenantes du *Trou du tas* et du *Silo de Janssen* concernant les phénomènes d'écrantage de pression montrent l'originalité des propriétés mécaniques des matériaux granulaires. La mise en évidence, à la fois expérimentale et numérique de la structuration des forces de contact à l'échelle des grains selon des chaînes de forces dans ces matériaux, a amené à remettre en cause l'approche élastique traditionnelle au profit de nouveaux modèles granulaires; ces modèles prennent en compte la nature discrète du matériau et l'hétérogénéité des forces de contact (q-model, de nature probabiliste) mais aussi l'existence des chaînes de forces par des conditions de redirection des contraintes dans les équations d'équilibre (BCC, OSL, de nature propagative). Pour départager ces modèles, le test de la fonction réponse a été envisagé; il s'agit d'appliquer une force ponctuelle dans le matériau à l'état d'équilibre statique et de mesurer la perturbation du champ de contraintes résultant. Les différentes approches prédisent des distributions de contraintes différentes selon la nature des équations qui gouvernent l'équilibre des contraintes (elliptiques pour l'approche élastique, hyperboliques pour les modèles propagatifs et paraboliques pour les modèles probabilistes de diffusion de forces). Des études expérimentales récentes (photoélasticimétrie, mesures de pressions capacitives) ont montré des résultats en accord avec la théorie élastique et laissent donc supposer que les chaînes de forces ne seraient finalement qu'une curiosité spécifique aux petites échelles et, qu'à l'échelle des milieux continus, elles ne seraient pas importantes.

De notre côté, nous avons conduit des simulations numériques de la fonction réponse d'assemblages granulaires denses bidimensionnels pour confirmer ces résultats expérimentaux. Nous avons également montré que la composante verticale de la fonction réponse se présente sous la

forme d'un pic de contrainte centré à toutes les profondeurs et dont la largeur est proportionnelle à la profondeur conformément à la prédiction de la théorie élastique ; la réponse du matériau n'a donc pas la forme de deux pics comme le prévoient les modèles propagatifs qui incluent redirection des contraintes. et la mise à l'échelle est de type élastique ce qui met à défaut la prédiction à caractère diffusif des modèles probabilistes.

Cependant, lorsque l'on compare les amplitudes de nos fonctions réponses numériques à l'état statique, nous constatons qu'elles sont en désaccord avec celles obtenues par l'approche élastique, les amplitudes de nos profils de contraintes sont plus faibles, ce qui laisserait supposer des processus de relaxation des contraintes dans le matériau. En effet, la réponse instantanée du matériau lors de la propagation de la perturbation est elle en accord avec les prédictions de l'élasticité.

Nous souhaitons rester prudents sur ces résultats numériques qui demandent à être confirmés ; si tel était le cas, la relaxation des grains après une perturbation infinitésimale serait une composante essentielle de la fonction réponse des milieux granulaires, relaxation qui n'est pas prise en compte par l'approche élastique. En effet, comme nous l'avons montré dans une l'étude précédente, l'origine du problème est l'impossibilité de définir un champ de déformation qui est inhomogène à l'échelle du grain et l'approche élastique repose elle sur l'hypothèse d'un champ de déformation uniforme à toutes les échelles.





# A

## Théorie Élastique de Milieu Effectif : Arrangements de Sphères Bidimensionnels et Tridimensionnels

### A.1 Modules élastiques effectifs d'un assemblage de sphères

Nous présentons dans cette annexe, le calcul des modules élastiques effectifs d'un assemblage de sphères élastiques distribuées (1) dans une géométrie tridimensionnelle, (2) dans une géométrie bidimensionnelle (arrangement "plan"); Dans ce travail de thèse, nous avons travaillé aussi bien avec des arrangements de particules à 3D (chapitre 4 et chapitre 7) et avec des arrangements "plan" (dits à 2D) (chapitre 3, chapitre 4, chapitre 5 et chapitre 6).

#### A.1.1 Vers l'état de référence $\{R\}$

Considérons un assemblage de sphères élastiques toutes identiques de rayon  $R$ , et supposons que cet assemblage occupe un volume  $V$  et contient un nombre  $N$  de particules sphériques. Dans l'état initial non déformé, le centre d'une sphère ( $k$ ) occupe la position  $\vec{x}^{(k)}$  dans un certain référentiel. Afin d'obtenir l'état déformé de référence, les frontières du système sont soumises à un déplacement  $\vec{u}$  consistant, avec une déformation compressive uniforme donnée par le tenseur de déformation macroscopique  $\bar{\epsilon}$  :

$$u_i = \epsilon_{ij}x_j, \quad (\text{A.1})$$

avec  $\epsilon_{ij}$  les composantes du tenseur de déformation (symétrique).

Si le matériau considéré était assimilable à un milieu continu (et non pas à un milieu granulaire),  $\epsilon_{ij}$  pourrait être identifié à la déformation moyenne du milieu. Malgré le fait que le milieu granulaire ne soit pas continu,  $\epsilon_{ij}$  sera quand même interprété en terme de déformation moyenne, valable à toutes les échelles (c'est une des deux hypothèses au coeur de la théorie).

Si l'on applique une telle déformation au système, le centre d'une sphère ( $A$ ) subit un déplacement  $\vec{u}^{(A)}$ , et si l'on considère une seconde sphère ( $B$ ) initialement en contact avec la sphère ( $A$ ), le centre de cette sphère subit un déplacement  $\vec{u}^{(B)}$ .

Le vecteur position du point de contact ( $C$ ) est  $\vec{x}^{(c)} = \frac{1}{2}(\vec{x}^{(A)} + \vec{x}^{(B)})$ , et par symétrie, il subit un déplacement  $\vec{u}^{(c)} = \frac{1}{2}(\vec{u}^{(A)} + \vec{u}^{(B)})$ . Relativement à ce point, les déplacements des centres des sphères sont donc  $\delta^{(BA)} = \frac{1}{2}(\vec{u}^{(B)} - \vec{u}^{(A)})$  et  $\delta^{(AB)} = \frac{1}{2}(\vec{u}^{(A)} - \vec{u}^{(B)}) = -\delta^{(BA)}$ .

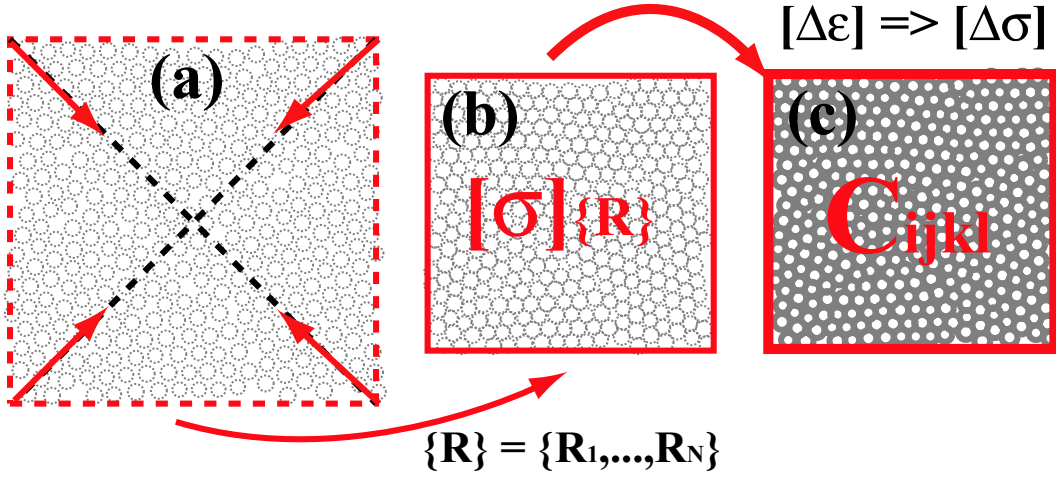


FIG. A.1 – Calcul des constantes élastiques effectives de l'assemblages de sphères : (1) Définition de l'état de référence  $\{R\}$ , (2) Application d'une déformation infinitésimale.

Pour pouvoir décomposer les déplacements relatifs selon une composante normale et une composante tangentielle, il est utile d'introduire le vecteur de contact normal unité  $\vec{n}_{(AB)}$  :

$$\vec{n}_{(AB)} = \frac{\vec{x}^{(B)} - \vec{x}^{(A)}}{2R}, \quad (\text{A.2})$$

La composante normale  $w_0$  du déplacement relatif de la sphère supérieure est donc  $\delta^{(\vec{B}A)} \cdot \vec{n}^{(\vec{A}B)}$  :

$$w_0 = \frac{1}{2}(\vec{u}^{(B)} - \vec{u}^{(A)}) \cdot \vec{n}^{(AB)}, \quad (\text{A.3})$$

La composante tangentielle s'écrit  $\vec{\delta}^{(BA)} - w_0 \cdot \vec{n}^{(AB)}$ , i.e. :

$$\vec{t}_0 = \frac{1}{2}(\vec{u}^{(B)} - \vec{u}^{(A)}) - \left[ \frac{1}{2}(\vec{u}^{(B)} - \vec{u}^{(A)}) \cdot \vec{n}^{(AB)} \right] \vec{n}^{(AB)}, \quad (\text{A.4})$$

Si deux sphères élastiques (A) et (B), constituées d'un matériau dont les paramètres de Lamé sont  $\lambda_g$  et  $\mu_g$ , sont amenées en contact par des déplacements  $\vec{w}_0$  et  $\vec{t}_0$ , il a été montré que les composantes normales  $f_n^{(C)}$  et tangentielles  $f_t^{(C)}$  de la force transmise  $\vec{f}^{(C)}$  par la surface de contact  $S^{(C)}$  sont :

$$\begin{cases} f_n^{(C)} = \frac{4R^{1/2}w_0^{3/2}}{3\pi B}, & ; \\ f_t^{(C)} = \frac{8t_0(Rw_0^{1/2})}{3\pi(2B+C)}, & . \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

où les constantes  $B$  et  $C$  sont fonction de  $\lambda_g$  et  $\mu_g$  et valent :

$$B = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{1}{\mu_g} + \frac{1}{\lambda_g + \mu_g} \right\}, C = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{1}{\mu_g} - \frac{1}{\lambda_g + \mu_g} \right\}, \quad (\text{A.6})$$

il s'ensuit l'expression de la force totale  $\vec{f}^{AB} = f_n^{(C)} \vec{n}^{AB} + f_t^{(C)} \vec{t}^{AB}$  sur la sphère A due à son contact avec la sphère B :

$$\vec{f}^{AB} = \frac{4R^{1/2}w_0^{3/2}}{3\pi B} \vec{n}^{AB} + \frac{8(Rw_0)^{1/2}}{3\pi(2B+C)} \left( \frac{1}{2}(\vec{u}^B - \vec{u}^A) - w_0 \vec{n}^{AB} \right), \quad (\text{A.7})$$

A ce stade, nous devons faire une hypothèse quant à l'expression du déplacement  $\vec{u}$ ; nous supposons que le déplacement des centres des sphères ( $A$ ) et ( $B$ ) est consistant avec le champ de déformation macroscopique appliqué  $\bar{e}$ , c'est (1) **l'approximation de déformation affine** (Affine Motion) :

$$u_i^{(X)} = e_{ij}x_j^{(X)}. \quad (\text{A.8})$$

En insérant cette forme de champ de déplacement  $\vec{u}^{(X)}$  pour les particules ( $A$ ) et ( $B$ ) dans l'expression de la force  $f^{\vec{A}B}$  on aboutit à l'expression suivante pour ses composantes :

$$f_i^{(AB)} = -\frac{4R^2}{3\pi B(2B+C)} \{2B(-e_{pq}n_p^{(AB)}n_q^{(AB)})^{1/2}e_{ij}n_j^{(AB)} - C(-e_{pq}n_p^{(AB)}n_q^{(AB)})^{3/2}n_i^{(AB)}\}, \quad (\text{A.9})$$

Nous avons donc maintenant, la relation qui lie la force sur la sphère ( $A$ ) due à son contact avec la sphère ( $B$ ) en terme du champ de déformation uniforme appliqué  $\bar{e}$  et des positions initiales des deux sphères via le vecteur normal de contact  $\vec{n}^{(AB)} = \vec{n}^{(C)}$ .

Dans le cas particulier où la déformation appliquée correspond à une déformation hydrostatique, on peut écrire  $e_{ij} = e\delta_{ij}$  (avec pour convention  $e < 0$  pour une compression) ce qui réduit l'expression de la force  $\vec{f}^{(AB)} = \vec{f}^{(C)}$  à :

$$\vec{f}^{(AB)} = \frac{4R^2(-e)^{3/2}}{3\pi B}\vec{n}^{(AB)}, \quad (\text{A.10})$$

L'objectif final de ce calcul est de relier la contrainte moyenne dans le milieu  $\langle\bar{\sigma}\rangle$  au champ de déformation appliqué  $\bar{e}$ .

Si  $V$  est le volume occupé par l'assemblage des  $N$  sphères partageant  $n$  contacts entre elles, la contrainte moyenne nous est donnée par :

$$\langle\sigma_{ij}\rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij}dV, \quad (\text{A.11})$$

On se rapportera au chapitre 2, où la relation qui lie la contrainte moyenne  $\langle\bar{\sigma}\rangle$  à l'ensemble des forces de contact  $\vec{f}^{(C)}$  présentes dans le volume  $V$  est détaillée ; :

$$\langle\sigma_{ij}\rangle = -\frac{R}{V} \sum_{k=1}^n (f_i^{(c)}n_j^{(c)} + f_j^{(c)}n_i^{(c)}), \quad (\text{A.12})$$

L'expression de la contrainte moyenne  $\langle\bar{\sigma}\rangle$  pour une déformation hydrostatique  $e_{ij} = e\delta_{ij}$  est obtenue en insérant l'expression de la force  $\vec{f}^{(AB)}$  (équation A.10) dans l'équation A.12 précédente :

$$\langle\sigma_{ij}\rangle = \frac{8R^3}{3\pi VB(2B+C)} \sum_{k=1}^N \{B(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}[e_{ik}n_k^{(c)}n_j^{(c)} + e_{jk}n_k^{(c)}n_i^{(c)}] - C(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{3/2}[n_i^{(c)}n_j^{(c)}]\}, \quad (\text{A.13})$$

A ce stade, nous devons faire une seconde hypothèse sur l'ordre dans le système ; nous supposons que (2) **l'assemblage des sphères est statistiquement isotrope** et donc les points de contact sont distribués avec une probabilité uniforme sur la surface d'une sphère (les directions de contact sont équiprobables). Cette hypothèse justifie que l'équilibre est assuré par rapport à l'hypothèse de déformation affine précédente (1).

Comme le volume de l'assemblage  $V$  est considéré suffisamment grand et qu'il contient un nombre important de sphères, donc de contacts, la somme sur les contacts de l'expression A.13 peut donc s'écrire en terme de moyenne sur les vecteurs contacts uniformément distribués selon :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{4R^3 \mathcal{Z} N}{3\pi V B(2B+C)} (B \langle (-e_{pq} n_p^{(c)} n_q^{(c)})^{1/2} (-e_{ik} n_k^{(c)} n_j^{(c)} + e_{jk} n_k^{(c)} n_i^{(c)}) \rangle - C \langle (-e_{pq} n_p^{(AB)} n_q^{(AB)})^{3/2} n_i^{(AB)} n_j^{(AB)} \rangle), \quad (\text{A.14})$$

où  $\mathcal{Z}$  est le nombre de contacts moyen par sphère, i.e. la coordinence moyenne  $\langle \mathcal{Z} \rangle$ .

Au chapitre 3, on a défini la fraction volumique solide de l'assemblage  $\phi_s$  de volume  $V$  et contenant  $N$  sphères identiques de rayon  $R$ ; ici on néglige le volume global de l'interpénétration des sphères résultant de leur déformation, et donc :

$$\phi_s = \frac{NV^{(p)}}{V} = \frac{N4\pi R^3}{3V}, \quad (\text{A.15})$$

L'expression de la contrainte moyenne peut alors s'écrire en terme de la fraction solide  $\phi_s$  et du nombre de contacts moyen par sphère  $\mathcal{Z}$  comme :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{\phi_s \mathcal{Z}}{\pi^2 B(2B+C)} (B \langle (-e_{pq} n_p^{(c)} n_q^{(c)})^{1/2} (-e_{ik} n_k^{(c)} n_j^{(c)} + e_{jk} n_k^{(c)} n_i^{(c)}) \rangle - C \langle (-e_{pq} n_p^{(AB)} n_q^{(AB)})^{3/2} n_i^{(AB)} n_j^{(AB)} \rangle), \quad (\text{A.16})$$

Nous avons maintenant l'équation désirée qui relie la contrainte moyenne  $\langle \bar{\sigma} \rangle$  à la déformation macroscopique  $\bar{e}$ , et qui fait également apparaître la fraction volumique solide  $\phi_s$  ainsi que le nombre moyen de contacts par sphère  $\mathcal{Z}$  (propriétés statistiques de l'assemblage, supposées connues).

L'expression de  $\langle \sigma_{ij} \rangle$  pour un champ de déformation arbitraire  $e_{ij}$  est complexe, mais si nous considérons maintenant un cas simple d'intérêt pratique, une compression hydrostatique, i.e.,  $e_{ij} = e\delta_{ij}$ , alors la relation se simplifie selon :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{\phi_s \mathcal{Z} (-e)^{3/2}}{\pi^2} \langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} \rangle, \quad (\text{A.17})$$

et, pour une compression hydrostatique on a bien sûr  $\langle \sigma_{ij} \rangle = -p\delta_{ij}$ , où  $p$  est la pression moyenne dans l'assemblage de sphères; d'autre part, nous pouvons calculer la moyenne  $\langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} \rangle$  qui vaut à  $3D \frac{1}{3} \delta_{ij}$ . En remplaçant, nous obtenons la relation qui lie la pression  $p$  et la déformation  $e$  dans le cas d'une compression hydrostatique :

$$\begin{cases} p = \frac{\phi_s \mathcal{Z} (-e)^{3/2}}{3\pi^2 B} & ; \\ e = -\left(\frac{3\pi^2 B p}{\phi_s \mathcal{Z}}\right)^{2/3} & . \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

### A.1.2 Déformation incrémentale, Modules élastiques

Nous venons de caractériser un état de référence  $\{R\}$  pour un assemblage de sphères élastiques en faisant des hypothèses : (1) Déformation affine, (2) Distribution isotrope des contacts. Cet état de référence  $\{R\}$  est l'état déformé initial (voir figure A.1 (1)) qui va nous permettre de calculer les modules élastiques du matériau ( $C_{ijkl}$ ). Cet assemblage est à présent soumis à une nouvelle déformation incrémentale  $\delta e_{ij}$  (voir figure A.1 (2)).

On réitère les hypothèses précédentes : (1) le champ de déformation est uniforme (comme dans un solide élastique) et le champ de déplacement  $\delta \vec{u}$  qui résulte de cet incrément de déformation est :

$$\delta u_i = \delta e_{ij} x_j, \quad (\text{A.19})$$

Le centre de la sphère ( $X$ ) subira donc un incrément de déplacement  $\delta \vec{u}^{(X)}$ .

Si deux sphères élastiques infiniment rugueuses (pas de glissement possible, "perfect stick") amenées initialement en contact par un déplacement  $\vec{w}_0$  et  $\vec{t}_0$  subissent un déplacement incrémental  $\delta\vec{w}_0$  et  $\delta\vec{t}_0$ , il a été montré que les incréments des composantes normales  $\delta\vec{f}_n$  et tangentielles  $\delta\vec{f}_t$  de la force transmise par la surface de contact  $S^{(C)}$  sont :

$$\begin{cases} \delta f_n = \frac{2(Rw_0)^{1/2}\delta w_0}{\pi B}, & ; \\ \delta f_t = \frac{4(Rw_0^{1/2}\delta t_0)}{\pi(2B+C)}, & . \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

En suivant l'analyse de la section précédente, et pour des sphères infiniment rugueuses, la force incrémentale sur la sphère (A) due à son contact avec la sphère (B) s'écrit :

$$\delta\vec{f}^{(AB)} = \frac{(2R)^{1/2}[(\vec{u}^{(B)} - \vec{u}^{(A)}) \cdot \vec{n}^{(AB)}]^{1/2}}{2\pi B(2B+C)} (2B(\delta\vec{u}^{(B)} - \delta\vec{u}^{(A)}) + C[(\delta\vec{u}^{(B)} - \delta\vec{u}^{(A)}) \cdot \vec{n}^{(AB)}]\vec{n}^{(AB)}), \quad (\text{A.21})$$

En répétant l'analyse précédente en faisant (1) l'hypothèse de champ de déformation uniforme et (2) l'hypothèse de distribution statistiquement isotrope des sphères, on peut montrer que :

$$\langle\delta\sigma_{ij}\rangle = \frac{3\phi_s\mathcal{Z}}{2\pi^2 B(2B+C)} \{B\langle(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}(-\delta e_{ik}n_k^{(c)}n_j^{(c)} + e_{jk}n_k^{(c)}n_i^{(c)})\rangle + C\langle(-e_{pq}n_p^{(AB)}n_q^{(AB)})^{1/2}n_k^{(AB)}n_l^{(AB)}n_i^{(AB)}n_j^{(AB)}\rangle\delta\epsilon_{kl}, \quad (\text{A.22})$$

Cette équation relie l'incrément de contrainte moyenne  $\langle\delta\bar{\sigma}\rangle$  à l'incrément de déformation  $\delta\bar{\epsilon}$  et à la fraction solide  $\phi_s$  et le nombre de contacts moyen par sphère  $\mathcal{Z}$ . Cette équation va nous donner accès aux modules élastiques effectifs du matériau granulaire; en effet, le tenseur de second ordre des modules élastiques effectifs  $C_{ijkl}$  est défini par :

$$\langle\delta\sigma_{ij}\rangle = C_{ijkl}\langle\delta\epsilon_{kl}\rangle, \quad (\text{A.23})$$

On peut alors remonter à l'expression générale pour les composantes du tenseur des modules  $C_{ijkl}$  (combinaisons linéaires des modules élastiques).

$$C_{ijkl} = \frac{3\phi_s\mathcal{Z}}{4\pi^2 B(2B+C)} \{B\langle(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}n_j^{(AB)}n_k^{(AB)}\rangle\delta_{il} + B\langle(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}n_i^{(AB)}n_k^{(AB)}\rangle\delta_{jl} + B\langle(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}n_j^{(AB)}n_l^{(AB)}\rangle\delta_{ik} + B\langle(-e_{pq}n_p^{(c)}n_q^{(c)})^{1/2}n_i^{(AB)}n_l^{(AB)}\rangle\delta_{jk} + 2C\langle n_i n_j n_k n_l \rangle\}, \quad (\text{A.24})$$

L'expression complexe se simplifie dans le cas d'une déformation initiale hydrostatique  $e_{ij} = e\delta_{ij}$  selon :

$$C_{ijkl} = \frac{3\phi_s\mathcal{Z}(-e)^{1/2}}{4\pi^2 B(2B+C)} [B\langle n_j n_k \rangle\delta_{il} + B\langle n_i n_k \rangle\delta_{jl} + B\langle n_j n_l \rangle\delta_{ik} + B\langle n_i n_l \rangle\delta_{jk} + 2C\langle n_i n_j n_k n_l \rangle], \quad (\text{A.25})$$

On peut calculer les moyennes  $\langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} \rangle$  et  $\langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} n_k^{(C)} n_l^{(C)} \rangle$ ; comme la distribution des sphères est isotrope, la distribution de contact l'est également et on peut intégrer les directions de contact sur la surface d'une sphère unité :

$$\langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \dots \sin\theta d\theta = \frac{1}{3}\delta_{ij}, \quad (\text{A.26})$$

$$\langle n_i^{(C)} n_j^{(C)} n_k^{(C)} n_l^{(C)} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \dots \sin\theta d\theta = \frac{1}{15}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (\text{A.27})$$

et donc en remplaçant ces expressions dans A.25, on obtient :

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (\text{A.28})$$

où  $\lambda = \lambda_e$ , le paramètre de Lamé (élastique) effectif de l'assemblage :

$$\lambda_e = \frac{C}{10(2B + C)} \left( \frac{3\phi_s^2 \mathcal{Z}^2 p}{\pi^4 B^2} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.29})$$

et  $\mu = \mu_e$ , le module de cisaillement effectif de l'assemblage :

$$\mu_e = \frac{(5B + C)}{10(2B + C)} \left( \frac{3\phi_s^2 \mathcal{Z}^2 p}{\pi^4 B^2} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.30})$$

En 3D, le module d'incompressibilité  $K$  est lié aux deux premiers modules par la relation  $K_e = \lambda_e + 2/3\mu_e$  et donc :

$$K_e = \frac{1}{6} \left\{ \frac{3\phi_s^2 \mathcal{Z}^2 p}{\pi^4 B^2} \right\}^{1/2}, \quad (\text{A.31})$$

Et le coefficient de Poisson effectif  $\nu$  est défini selon :

$$\nu_e = \frac{\lambda_e}{2(\lambda_e + \mu_e)} = \frac{\nu_g}{2(5 - 3\nu_g)} \quad (\text{A.32})$$

### A.1.3 Arrangement "plan" de sphères

Considérons maintenant un assemblage de sphères élastiques toutes identiques de rayon  $R$  et supposons que les centres de ces sphères soient distribués sur un plan ( $P$ ) de surface ( $S$ ); cet assemblage occupe un volume  $V$  et contient un nombre  $N$  de particules.

La relation qui lie la contrainte moyenne  $\langle \sigma_{ij} \rangle$  à l'ensemble des forces de contact présentes sur la surface  $S$  est :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{R}{S} \sum_{k=1}^N \left( f_i^{(c)} n_j^{(c)} + f_j^{(c)} n_i^{(c)} \right), \quad (\text{A.33})$$

Si l'on considère une coupe à travers les  $N$  sphères passant par le plan ( $P$ ), la fraction surfacique solide  $\phi_s$  s'écrit :

$$\phi = \frac{N\pi R^2}{S}, \quad (\text{A.34})$$

Les hypothèses faites dans ce calcul sont les mêmes que celles faites dans le calcul précédent, à savoir : (1) champ de déformation uniforme appliqué (l'approximation affine) et (2) assemblage des sphères statistiquement isotrope.

D'autre part, les expressions des composantes normales  $f_n$  et tangentielles  $f_t$  de la force transmise par la surface de contact sont les mêmes que précédemment, comme on considère des contacts entre sphères et non pas entre disques.

L'expression de la contrainte moyenne peut alors s'écrire en terme de la fraction surfacique solide  $\phi_s$ , de la déformation macroscopique  $e_{ij}$ , et du nombre de contacts moyen par sphère  $n$  comme :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{4}{3} \frac{\phi_s n R}{\pi^2 B(2B + C)} \left( B \langle (-e_{pq} n_p^{(c)} n_q^{(c)})^{1/2} (-e_{ik} n_k^{(c)} n_j^{(c)} + e_{jk} n_k^{(c)} n_i^{(c)}) \rangle - C \langle (-e_{pq} n_p^{(AB)} n_q^{(AB)})^{3/2} n_i^{(AB)} n_j^{(AB)} \rangle \right), \quad (\text{A.35})$$

Et pour une compression hydrostatique :  $e_{ij} = e\delta_{ij}$ , la relation se simplifie comme :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{4 - \phi_s n R (-e)^{3/2}}{3 \pi^2} \langle n_i n_j \rangle, \quad (\text{A.36})$$

Pour une distribution  $2D$ , nous avons cette fois-ci  $\langle n_i n_j \rangle = \frac{1}{2} \delta_{ij}$  et pour une compression hydrostatique en général,  $\langle \sigma_{ij} \rangle = -p \delta_{ij}$ ; La pression s'écrit donc maintenant :

$$p = \frac{2 \phi_s n R (-e)^{3/2}}{3 \pi^2 B}, \quad (\text{A.37})$$

Une fois l'état de référence obtenu dans la géométrie de distribution plane, nous pouvons développer le calcul de la même façon pour l'incrément de déformation dans cette géométrie afin de trouver l'expression générale pour les composantes du tenseur  $C_{ijkl}$  qui se simplifie dans le cas d'une déformation initiale hydrostatique  $e_{ij} = e\delta_{ij}$  comme :

$$C_{ijkl} = \frac{\phi_s n (-e)^{1/2}}{\pi^2 B (2B + C)} [B \langle n_j n_k \rangle \delta_{il} + B \langle n_i n_k \rangle \delta_{jl} + B \langle n_j n_l \rangle \delta_{ik} + B \langle n_i n_l \rangle \delta_{jk} + 2C \langle n_i n_j n_k n_l \rangle], \quad (\text{A.38})$$

On peut calculer les moyennes dans la géométrie plane de  $\langle n_i n_j \rangle$  et  $\langle n_i n_j n_k n_l \rangle$  :

$$\langle n_i n_j \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \dots d\theta = \frac{1}{2} \delta_{ij}, \quad (\text{A.39})$$

$$\langle n_i n_j n_k n_l \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \dots d\theta = \frac{1}{8} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (\text{A.40})$$

Le tenseur  $C_{ijkl}$  s'écrit alors :

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (\text{A.41})$$

avec  $\lambda$ , le paramètre de Lamé effectif :

$$\lambda = \frac{C}{4} \frac{\phi_s n R}{\pi^2 B (2B + C)} \left( \frac{3 \pi^2 B p}{2 \phi_s n R} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.42})$$

avec  $\mu$ , le module effectif de cisaillement :

$$\mu = \frac{4B + C}{4} \frac{\phi_s n R}{\pi^2 B (2B + C)} \left( \frac{3 \pi^2 B p}{2 \phi_s n R} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.43})$$

En  $2D$ , le module d'incompressibilité est lié aux deux premiers modules par la relation  $K = \lambda + \mu$  et donc :

$$K = \frac{B + 2C}{4} \frac{\phi_s n R}{\pi^2 B (2B + C)} \left( \frac{3 \pi^2 B p}{2 \phi_s n R} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.44})$$





B

*Why Effective Medium Theory Fails  
in Granular Materials*, Physical  
Review Letter, 83, 5070, 1999

## Why Effective Medium Theory Fails in Granular Materials

Hernán A. Makse,<sup>1</sup> Nicolas Gland,<sup>1,2</sup> David L. Johnson,<sup>1</sup> and Lawrence M. Schwartz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Schlumberger-Doll Research, Old Quarry Road, Ridgefield, Connecticut 06877*

<sup>2</sup>*Ecole Normale Supérieure, Departement T.A.O., 24 Rue Lhomond, 75005, Paris, France*

(Received 6 August 1999)

Experimentally it is known that the bulk modulus  $K$  and shear modulus  $\mu$  of a granular assembly of elastic spheres increase with pressure  $p$  faster than the  $p^{1/3}$  law predicted by effective medium theory (EMT) based on Hertz-Mindlin contact forces. To understand the origin of these discrepancies, we perform numerical simulations of granular aggregates under compression. We show that EMT can describe the moduli pressure dependence if one includes the increasing number of grain-grain contacts with  $p$ . Most important, the affine assumption (which underlies EMT), is found to be valid for  $K(p)$  but breaks down seriously for  $\mu(p)$ .

PACS numbers: 81.05.Rm, 81.40.Jj

The study of nonlinear elasticity and sound propagation in unconsolidated granular matter is a topic of great current interest [1]. In the simplest experiments, a packing of spherical glass beads is confined under hydrostatic conditions and the compressional and shear sound speeds,  $v_p$  and  $v_s$ , are measured as functions of static confining pressure  $p$  [2,3]. In the long-wavelength limit, the sound speeds are related to the elastic constants of the aggregate:  $v_p = \sqrt{(K + 4/3\mu)/\rho^*}$  and  $v_s = \sqrt{\mu/\rho^*}$ , where  $\rho^*$  is the system's density. In a recent Letter [4], acoustic measurements were made on bead packs under uniaxial stress and it was suggested that long wavelength compressional waves can be described in terms of an effective medium. Thus, it would be of great value to have a reliable effective medium theory (EMT) to describe sound propagation as a function of applied stress. However, our analysis, together with the work of others, raises serious questions about the validity of the generally accepted theoretical formulation. The EMT [5] predicts that  $K$  and  $\mu$  both vary as  $p^{1/3}$  (see below), and that the ratio  $K/\mu$  is a constant (independent of pressure and coordination number) dependent only on the Poisson's ratio of the grains.

Experimentally (see Fig. 1), the bulk and shear moduli increase more rapidly than  $p^{1/3}$  and the values of  $K/\mu$  are considerably larger than the EMT prediction. These discrepancies between theory and experiment could be due to the breakdown of the Hertz-Mindlin force law at each grain contact as proposed in Ref. [6] for the case of metallic beads with an oxide layer, and in Ref. [7] for grains with sharp angularities. Alternatively, they could be associated with the breakdown of some of the assumptions underlying the EMT, for example, that the number of contacts per grain is pressure independent, which may not be the case as several authors have suggested [7,8].

In this Letter we report calculations of  $K(p)$  and  $\mu(p)$  based on granular dynamics (GD) simulations using the discrete element method developed by Cundall and Strack [9,10] for an assembly of spherical soft grains which interact via the Hertz-Mindlin force laws. We find good agreement with the existing experimental data,

thus confirming the validity of the Hertz-Mindlin contact theory to spherical grain packings. Further, we can explain the two problems with the EMT described above. First, if the calculated increase of the average coordination number with  $p$  is taken into account, the modified EMT gives an accurate description of  $K(p)$  found in the simulations; for  $\mu(p)$  we obtain a curve whose shape is in good agreement with the simulation data but whose values are seriously offset therefrom. Second, the EMT is based on the *affine* approximation in which the motion of each grain follows the applied strain. Physically, this approximation follows from the *well-bonded* assumption that two grains originally in contact remain in contact after an external load is applied. We show that, while this assumption is approximately valid for the bulk modulus, it is seriously in error for the shear modulus; this is why the EMT prediction of  $K/\mu$  differs significantly from the experimental value.

*Numerical Simulations.*—At the microscopic level the grains interact with one another via nonlinear Hertz-Mindlin normal forces and transverse forces. Our

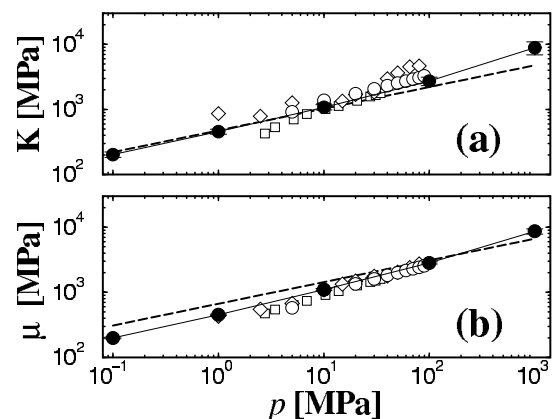


FIG. 1. Pressure dependence of the elastic moduli from GD ( $\bullet$ ), experiments [Domenico ( $\square$ ) [2], Yin ( $\diamond$ ) [3], and ours ( $\circ$ )], and EMT equations (2a) and (2b) (dashed line): (a) bulk modulus and (b) shear modulus.

approach is valid for grains in contact at a point which is not singular, and may not be applicable to packings of grains with sharp angularities, as may be present in many granular materials with a distribution of contact asperities. The normal force is  $f_n = \frac{2}{3}C_n R^{1/2} w^{3/2}$  (the 3/2 power law gives rise to the  $p^{1/3}$  dependence of the moduli), and the transverse force is given as [11]  $\Delta f_t = C_t(Rw)^{1/2}\Delta s$ . Here the grain radii are  $R_1$  and  $R_2$ ,  $R = 2R_1R_2/(R_1 + R_2)$ , the normal overlap is  $w = (1/2)[(R_1 + R_2) - |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|] > 0$ , where  $\vec{x}_1, \vec{x}_2$  are the positions of the grain centers and  $2s$  is the relative shear displacement between the two grain centers. The normal force acts only in compression,  $f_n = 0$  when  $w < 0$ .  $C_n = 4\mu_g/(1 - \nu_g)$  and  $C_t = 8\mu_g/(2 - \nu_g)$ , where  $\mu_g$  is the shear modulus, and  $\nu_g$  is the Poisson's ratio of the material from which the grains are made. In our simulations we set  $\mu_g = 29$  GPa and  $\nu_g = 0.2$ . We assume a distribution of grain radii in which  $R_1 = 0.105$  mm for half the grains and  $R_2 = 0.095$  mm for the other half. Our results are, in fact, insensitive to the choice of the distribution, as long as the distribution is not very broad. We also include a viscous damping term to allow the system to relax toward static equilibrium.

Our calculations begin with a numerical protocol designed to mimic the experimental procedure used to prepare dense packed granular materials. In the experiments the initial bead pack is subjected to mechanical tapping and ultrasonic vibration in order to increase the solid phase volume fraction  $\phi_s$ . The simulations begin with a gas of 10 000 spherical particles located at random positions in a periodically repeated cubic unit cell approximately 4 mm on a side. At the outset, the transverse force between the grains is turned off ( $C_t = 0$ ). The system is then compressed slowly until a specified value of  $\phi_s$  is attained (see dashed lines in Fig. 2). The compression is then stopped and the grains are allowed to relax. If the compression is stopped before reaching the critical volume fraction,  $\phi_s \sim 0.64$ , corresponding to random close packing (RCP) [1], the system will relax to zero pressure and zero coordination number, since the system cannot equilibrate below RCP. The compression is then continued to a point above the critical packing fraction and a target pressure is maintained with a "servo" mechanism [9] which constantly adjusts the applied strain until the system reaches equilibrium. Because there are no transverse forces, the grains slide without resistance during the relaxation process and the system reaches the high volume fractions found experimentally.

The simulated granular aggregate relaxes to equilibrium states in which the average coordination number  $\langle Z(p) \rangle$ , increases with pressure as seen in Fig. 2. For low pressures compared with  $\mu_g$ ,  $\langle Z \rangle \approx 6$ , while in two dimensions the same preparation protocol gives  $\langle Z \rangle \approx 4$ . Such low coordination numbers can be understood in terms of a constraint argument for frictionless rigid balls [12,13], which gives  $\langle Z \rangle = 2D$ , where  $D$  is the dimension.

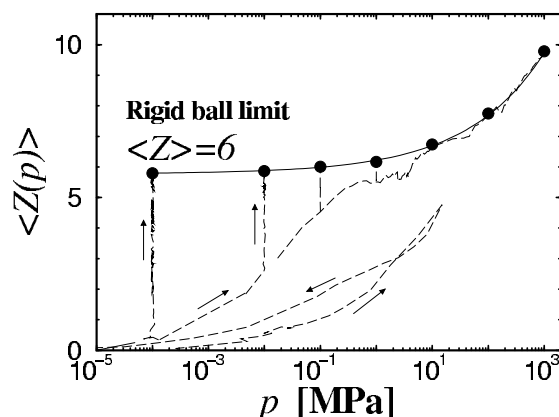


FIG. 2. Average coordination number  $\langle Z \rangle$  from GD at a given pressure  $p$  ( $\bullet$ ). The dashed lines show the various out-of-equilibrium trajectories taken by the system to reach equilibrium as described in the text. The solid line is a fit according to Eq. (1).

These values should be valid in the limit of low pressure when the beads are minimally connected near RCP [13] (or in the rigid ball limit  $\mu_g \rightarrow \infty$ ). For large values of  $p$  more grains are brought into contact, and the coordination number increases. Empirically, we find

$$\langle Z(p) \rangle = 6 + \left( \frac{p}{0.06 \text{ MPa}} \right)^{1/3}. \quad (1)$$

*Comparison with Experiment.*—Consider now the calculation of the elastic moduli of the system as a function of pressure. Beginning with the equilibrium state described above, we first restore the transverse component of the contact force interaction (finite  $C_t$ ). We then apply an infinitesimal distortion,  $\Delta \epsilon_{ij}$ , and measure the linear response [14]. The shear modulus is calculated in two ways, from a pure shear test,  $\mu = (1/2)\Delta\sigma_{12}/\Delta\epsilon_{12}$ , and also from a biaxial test,  $\mu = (\Delta\sigma_{22} - \Delta\sigma_{11})/2(\Delta\epsilon_{22} - \Delta\epsilon_{11})$ . The bulk modulus is obtained from a uniaxial compression or tension test,  $K + 4/3\mu = \Delta\sigma_{11}/\Delta\epsilon_{11}$ . Here the stress  $\sigma_{ij}$  is determined from the measured forces on the grains [9], and the strain  $\epsilon_{ij}$  is determined from the imposed dimensions of the unit cell.

In Fig. 1 our calculated values of the elastic moduli as a function of pressure are compared with EMT and with experimental data. Because there is a considerable degree of scatter in the experimental results we performed our own experiments with standard sound propagation techniques. A set of high quality glass beads of diameter  $45 \mu\text{m}$  was deposited in a flexible container of 3 cm height and 2.5 cm radius. Transducers and a pair of linear variable differential transformers (for measurement of displacement) were placed at the top and bottom of the flexible membrane, and the entire system was put into a pressure vessel filled with oil. Before starting the measurements, a series of tapping and ultrasonic vibrations were applied to the container in order to let the grains settle into the best possible packing. We then

applied confining pressures ranging from 5 to 100 MPa. The pressure was cycled up and down several times until the system exhibited minimal hysteresis. At this point, shear and compressional waves were propagated by applying pulses with center frequencies of 500 KHz. The sound speeds and corresponding moduli were obtained by measuring the arrival time for the two sound waves.

From Fig. 1 we see that our experimental and numerical results are in reasonably good agreement. Also shown are measured data from Domenico [2] and Yin [3] for spherical glass beads. Clearly, the experimental data are somewhat scattered. This scatter reflects the difficulty of the measurements, especially at the lowest pressures where there is significant signal loss. Nevertheless, our calculated results pass through the collection of available data. Also shown in Fig. 1 are the EMT predictions [5]

$$K = \frac{C_n}{12\pi} (\phi_s Z)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{C_n} \right)^{1/3}, \quad (2a)$$

$$\mu = \frac{C_n + (3/2)C_t}{20\pi} (\phi_s Z)^{2/3} \left( \frac{6\pi p}{C_n} \right)^{1/3}. \quad (2b)$$

The EMT curves are obtained using the same parameters as in the simulations; we also set  $Z = 6$  and  $\phi_s = 0.64$ , independent of pressure. At low pressures we see that  $K$  is well described by EMT. At larger pressures, however, the experimental and numerical values of  $K$  grow faster than  $p^{1/3}$ . The situation with the shear modulus is even less satisfactory. EMT overestimates  $\mu(p)$  at low pressures but, again, underestimates the increase in  $\mu(p)$  with pressure.

To investigate the failure of EMT in predicting the correct pressure dependence of the moduli, we plot  $\mu/p^{1/3}$  in Fig. 3. For such a plot, EMT predicts a horizontal straight line but we see that the numerical and experimental results are clearly increasing with  $p$ . We can explain this behavior by modifying Eq. (2b) to take into account the pressure dependence of the coordination number  $\langle Z(p) \rangle$  from Fig. 2 [Eq. (1)] and also  $\phi_s(p)$  (which is a much smaller effect).

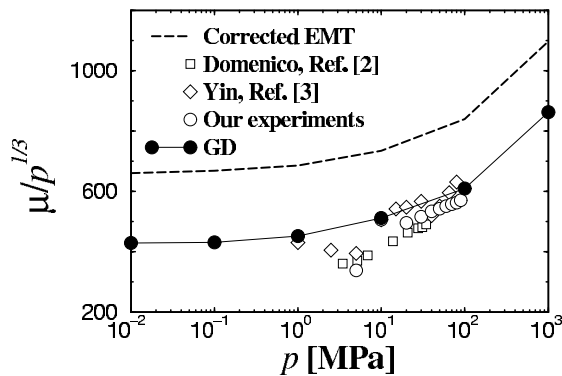


FIG. 3. Shear modulus from GD ( $\bullet$ ), experiments (open symbols as in Fig. 1), and corrected EMT (dashed line), taking into account the pressure dependence of  $\langle Z(p) \rangle$  from Fig. 2 [Eq. (1)], as well as  $\phi_s(p)$ .

188  
5072

The modified EMT is also plotted in Fig. 3, and we see that it predicts the same trend with pressure as the simulations but has a significantly larger magnitude. The experimental data also seem to be following this trend but more data over a larger pressure range are clearly needed. Not shown in Fig. 3 is a similar analysis of  $K(p)$ , but the result is that the modified EMT is in essentially exact agreement with our numerical simulations. It is for this reason that we focus on  $\mu(p)$ .

To understand why  $\mu$  is overpredicted by EMT we must examine the role of transverse forces and rotations in the relaxation of the grains. (These effects do not play any role in the calculation of the bulk modulus.) Suppose we redefine the transverse force by introducing a multiplicative coefficient  $\alpha$ , viz.,  $\Delta f_t = \alpha C_t (Rw)^{1/2} \Delta s$ ; with  $\alpha = 1$  we recover our previous results. To quantify the role of the transverse force on the elastic moduli, we calculate  $K(\alpha)$  and  $\mu(\alpha)$  at a given pressure  $p = 100$  KPa (Fig. 4a). Surprisingly,  $\mu$  becomes negligibly small as  $\alpha \rightarrow 0$ . As expected,  $K$  is independent of the strength of the transverse force. To compare with the theory we also plot the prediction of the EMT [Eqs. (2a) and (2b)] in which  $C_t$  is rescaled by  $\alpha C_t$ . We see that the EMT fails in taking into account the vanishing of  $\mu(\alpha)$  as

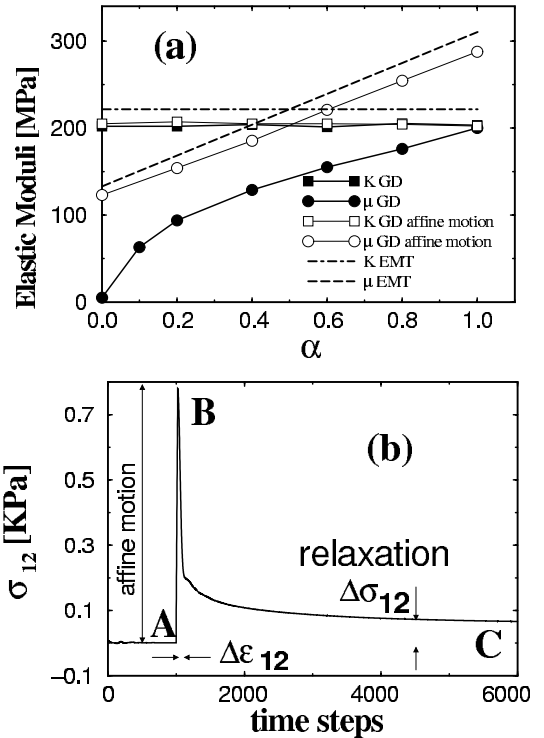


FIG. 4. (a)  $K(\alpha)$  (squares), and  $\mu(\alpha)$  (circles) versus  $\alpha$  for a fixed  $p (= 100$  KPa) calculated from GD using only the affine motion (open symbols), and using the full relaxation [nonaffine motion (solid symbols)]. We also plot the corresponding EMT prediction, [Eqs. (2a) and (2b)], as dashed lines. (b) Relaxation of the shear stress ( $B \rightarrow C$ ) after an affine motion ( $A \rightarrow B$ ) in the calculation of the shear modulus.

$\alpha \rightarrow 0$ . However, it accurately predicts the value of the bulk modulus, which is independent of  $\alpha$ .

There are two main approximations in the EMT: (1) All of the spheres are statistically the same, and an isotropic distribution of contacts around a given sphere is assumed. (2) A sphere at position  $X_j$  is moved a distance  $\delta u_i$  in a time interval  $\delta t$  according to the macroscopic strain rate  $\dot{\epsilon}_{ij}$ :  $\delta u_i = \dot{\epsilon}_{ij} X_j \delta t$  (affine approximation). The spheres are always at equilibrium due to the assumption of isotropic distribution of contacts, and further relaxation is not required.

In the GD calculation of the shear modulus an affine perturbation is first applied to the system. The shear stress increases instantaneously (from  $A$  to  $B$  in Fig. 4b), and the grains are out of equilibrium since the system is disordered. The grains then relax towards equilibrium (from  $B$  to  $C$ ), and we measure the resulting change in stress from which the modulus is calculated. To better understand the approximations involved in the EMT, suppose we repeat the GD calculations, taking into account only the affine motion of the grains and ignoring the subsequent relaxation. The resulting values of the moduli are plotted in Fig. 4a as open symbols and we see that the moduli calculated in this way are very close to the EMT predictions. Thus, the difference between the GD and EMT results in shear lies in the relaxation of the grains, this difference being largest when there is no transverse force. As noted earlier, relaxation and rearrangement of the grains violate the well-bonded assumption which underlies EMT. By contrast, grain relaxation after an applied *isotropic* affine perturbation is not particularly significant, and the EMT predictions for the bulk modulus are quite accurate.

The surprisingly small value of  $\mu$  found as  $\alpha \rightarrow 0$  can be understood as a melting of the system that occurs when the system is close to the RCP fraction. This fluidlike behavior (when  $C_t = 0$ ) is closely related to the melting transition seen in compressed emulsions [15] and foams [16]. At the RCP fraction the system behaves like a fluid with no resistance to shear. By contrast, molecular dynamics simulations of glasses, in which the atoms interact by purely longitudinal forces, predict nonvanishing shear speeds [17]. The crucial difference between these two systems is the local coordination of the particles. In the granular system, the coordination number near RCP (where the balls are nearly rigid) is  $\langle Z \rangle = 6$ ; the system is quite tenuous. In glasses, however, the number of neighbors is closer to 10 and the motion of each grain is highly constrained, even for strictly longitudinal forces.

In conclusion, our GD simulations are in good agreement with the available experimental data on the pressure dependence of the elastic moduli of granular packings. They also serve to clarify the deficiencies of EMT. Grain relaxation after an infinitesimal affine strain transformation is an essential component of the shear (but not the bulk) modulus. This relaxation is not taken into account in the EMT. The failure of EMT is attributed to the fact

that grains which are initially in contact at a given pressure can be separated under a shear perturbation, but they are likely to remain in contact under a compressional or tensional additional load. In the limit  $\alpha \rightarrow 0$  a packing of nearly rigid particles responds to an external isotropic load (compression or tension) with an elastic deformation and a finite  $K$  [14]. By contrast, such a system cannot support a shear load ( $\mu \rightarrow 0$ ) without severe particle rearrangements: The network supporting shear stress appears to be more tenuous than the network supporting compressional loads. This may indicate a “fragile” state of the system [18], where interparticle forces are organized along “force chains” (stress paths carrying most of the forces in the system) oriented along the principal stress axes. Such fragile networks support, elastically, only perturbations compatible with the structure of force chains and deform plastically otherwise. Clearly, there is a need for an improved EMT; recent work on stress fluctuations in minimally connected networks [12,13] may provide an alternative formulation and allow one to properly describe the linear response of granular materials.

We would like to thank J. Berryman, J. Dvorkin, J. St. Germain, B. Halperin, J. Jenkins, and D. Pissarenko for many stimulating discussions.

- 
- [1] *Powders and Grains 97*, edited by R.P. Behringer and J.T. Jenkins (Balkema, Rotterdam, 1997); *Physics of Dry Granular Matter*, edited by H.J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding (Kluwer, Dordrecht, 1998).
  - [2] S.N. Domenico, *Geophysics* **42**, 1339 (1977).
  - [3] H. Yin, Ph.D. thesis, Stanford University.
  - [4] X. Jia *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1863 (1999).
  - [5] K. Walton, *J. Mech. Phys. Solids* **35**, 213 (1987); P. J. Digby, *ASME J. Appl. Mech.* **48**, 803 (1981).
  - [6] P.-G. de Gennes, *Europhys. Lett.* **35**, 145 (1996).
  - [7] J.D. Goddard, *Proc. R. Soc. London A*, **430**, 105 (1990).
  - [8] P.A. Cundall, J.T. Jenkins, and I. Ishibashi, in *Powder and Grains 1989*, edited by J. Biarez and R. Gourvès (Balkema, Rotterdam, 1989); S. Roux, D. Stauffer, and H. J. Herrmann, *J. Phys.* **48**, 341 (1987).
  - [9] P.A. Cundall and O.D.L. Strack, *Géotechnique* **29**, 47 (1979).
  - [10] C. Thornton and D.J. Barnes, *Acta Mech.* **64**, 45 (1986).
  - [11] K.L. Johnson, *Contact Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1985).
  - [12] S.F. Edwards and D.V. Grinev, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5397 (1999).
  - [13] S. Alexander, *Phys. Rep.* **296**, 65 (1998); A.V. Tkachenko and T.A. Witten, *Phys. Rev. E* **60**, 687 (1999).
  - [14] Since  $K$  and  $\mu$  vanish as  $p \rightarrow 0$ ,  $\Delta \epsilon_{ij}$  (whether compression, tension, or shear) must also decrease in order to remain in the linear response regime at low  $p$ .
  - [15] M.-D. Lacasse *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3448 (1996).
  - [16] D.J. Durian, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4780 (1995).
  - [17] G.S. Grest *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1271 (1982).
  - [18] M.E. Cates *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1841 (1998).



C

*Nonlinear Elasticity of Granular  
Media*, Physica B, 279, 134, 2000





ELSEVIER

Physica B 279 (2000) 134–138

PHYSICA B

www.elsevier.com/locate/physb

## Nonlinear elasticity of granular media

David Linton Johnson<sup>a,\*</sup>, Hernán A. Makse<sup>a</sup>, Nicolas Gland<sup>a,b</sup>,  
Lawrence Schwartz<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Schlumberger-Doll Research, Old Quarry Road, Ridgefield, CT 06877-4108, USA

<sup>b</sup>Ecole Normale Supérieure, 45 rue d'ULM, F-75005, Paris, France

### Abstract

The linear and nonlinear elastic properties of granular media are analyzed within the context of effective medium theories, as well as with numerical molecular dynamic simulations, assuming the validity of the Hertz–Mindlin theory at the single contact level. There is a crucial distinction between force laws which are path independent, leading to a hyper-elastic effective medium theory, and those which are path dependent, for which the deformation history must be followed explicitly. The effective medium theories provide a reasonable description of existing experimental data, considered as a function of applied stress, but there are significant discrepancies. Numerical simulations resolve the question as to whether the problem lies with the treatment of the individual grain–grain contact or with the effective medium approximation (ema). We find that the problem lies principally with the latter: The bulk modulus is well described by the ema but the shear modulus is not, principally because the ema does not correctly allow for the grains to relax from the affine motion assumed by the ema. © 2000 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PACS: 81.06.Rm; 81.40.Ji

Keywords: Granular media; Acoustics; Nonlinear elasticity

### 1. Introduction

The elastic properties of granular aggregates, such as sedimentary rocks, can be enormously nonlinear as compared with the properties of nonporous materials [1]. The end member of such systems may be taken to be a loose/unconsolidated aggregate of glass beads which acquire a stiffness solely as a result of applied stress. This is because if two grains are just touching, the force, considered as a function of displacement, does not initially grow linearly, as with most systems, but it has a power law behavior (Eqs. (1) and (2) below). Aside from posing an interesting problem in the physics of disordered systems, these systems are unusually nonlinear in their response and they can exhibit path dependence. By this we mean that the work done in deforming the system can depend upon whether one first compresses the

system, then shears it, or first shears then compresses, or compresses and shears simultaneously, etc. The result depends upon the path taken in  $\{\varepsilon_{ij}\}$  space and not just on the final state of strain  $\{\varepsilon_{ij}(\text{final})\}$ .

Here, we review some recent theoretical research we have undertaken in an attempt to understand these systems. We first discuss effective medium theories of the elastic properties, then we present our molecular dynamic simulations, and we end with a brief summary.

### 2. Effective medium theories

The starting point is the behavior of a single grain–grain contact, which we assume to be describable by the Hertz–Mindlin theory and variations thereof. Two touching grains are displaced in compression along a line joining their centers by an amount  $2w$ . They may also suffer a transverse relative displacement of their centers

\*Corresponding author. Fax: +1-203-438-3819.

E-mail address: djohnson@SDR.SLB.com (D.L. Johnson)

by an amount  $2s$ , holding their rotational orientation fixed for the moment. The normal and transverse forces,  $f_n$  and  $f_t$  may be written in terms of  $w$  and  $s$ . The idea is that as two spheres are pressed together the circle of contact continuously grows; the result is that the contact becomes increasingly stiffer with respect to further compression. Similarly, it may be assumed, for example, that the contact circle is a no-slip zone. The more the spheres are pressed together, the stiffer the contact becomes with respect to transverse relative displacement of the sphere centers (assuming the spheres are not allowed to rotate). The relevant expressions relating the forces to the displacements may be written as

$$f_n = \frac{2}{3}C_n R^{1/2} w^{3/2}, \quad (1)$$

$$\Delta f_t = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s. \quad (2)$$

The prefactors  $C_n = 4G/(1 - \nu)$  and  $C_t = 8G/(2 - \nu)$  are defined in terms of the shear modulus  $G$  and the Poisson's ratio  $\nu$  of the individual particles.  $R$  is the harmonic mean of the radii of the two spheres.

Eq. (2) is written in differential form to emphasize the fact that the actual value of the transverse force,  $f_t$ , depends upon the deformation path taken in  $\{w, s\}$  space and not simply on the final values of  $w$  and  $s$ . Thus  $f_t$  depends upon the entire history of the trajectory:  $f_t = f_t[\{w(\xi)\}, \{s(\xi)\}]$  where  $\xi$  is some conveniently chosen parameter (see Refs. [2,3] and references therein). Along a given trajectory there is no hysteresis, meaning the grain–grain contact is exactly reversible along that trajectory. But one does different amounts of work depending upon the trajectory taken; if one releases the forces along a trajectory different than the one in which they were established, there will be a net loss of energy. This behavior of a single grain–grain contact leads directly to the path dependence of the macroscopic ensemble, considered as a function of applied strain,  $\{\varepsilon_{ij}\}$ .

The basic idea of the effective medium theories relevant to these problems is that the macroscopic work done in deforming the system is set equal to the sum of the work done on each grain–grain contact and that the latter is replaced by a suitable average. There are two assumptions: (1) The center of each grain displaces according to the dictates of the macroscopic strain tensor,  $\varepsilon_{ij}$ :

$$u_i = \varepsilon_{ij} X_j, \quad (3)$$

where  $X$  is the initial position of the center of the grain. When the deformation is describable by a symmetric deformation,  $\nabla \times \mathbf{u} = 0$ , none of the grains rotate. This is called the “assumption of affine motion”. (2) Each grain experiences essentially the same environment as any other grain. On average, the distribution of contacts is spherically symmetric. Under these assumptions, the total work done on the system may be written in terms of angular averages of the work done on a single contact.

This sort of “effective medium theory” is simpler than the conventional Bruggeman type of ema [4] (see also Ref. [5]) in that it is more analogous to a simple average of the non-linear spring constants.

As written, the transverse force, Eq. (2), was derived under the assumption that once the grains are pressed together, there is perfect sticking of the contact circles. This force is path dependent, meaning that whether the grains are first pressed and then sheared, or vice versa, makes a difference in the work done on the contact. The numerical value of  $f_t$  depends upon the path taken in  $(w, s)$  space. Were we to assume, on the other hand, that there is perfect slippage of the particles,  $f_t \equiv 0$  instead of Eq. (2), then the resulting forces are path independent. The practical result of this path independent assumption is that the resulting work done in deforming the system is now a function of the state of strain and is not dependent upon the way in which the strain is applied. The path independent forces lend themselves to the development of a macroscopic strain energy density, and thus to a well-defined theory of hyper-elasticity, whereas the path dependent forces need to be treated specially. We consider these two cases in turn. A cautionary note: In reality the contact may slip over an annular ring if the coefficient of friction is finite [6]. In the limit of infinitesimal  $\Delta s$  we either neglect the slippage altogether or we assume complete slip, as the case may be. In any case, the forces are conservative in the sense that if the deformation path, whatever it may be, is reversed exactly, the total work done is zero.

### 2.1. Path independent forces

If the work done on a single contact is independent of the order in which the normal and transverse forces are applied, i.e. they are path independent, then the system as a whole is said to be hyper-elastic. An energy density,  $U(\{\varepsilon_{ij}\})$ , can be defined in terms of the macroscopic strain tensor,  $\varepsilon_{ij}$ , and it can usefully be expanded in powers thereof. For any isotropic system this expansion takes the form [7]:

$$U(\{\varepsilon_{ij}\}) = U_0 - p\varepsilon_{ii} + \frac{1}{2}[K - \frac{2}{3}\mu]\varepsilon_{ii}^2 + \mu\varepsilon_{ij}^2 + \frac{1}{3}A\varepsilon_{ij}\varepsilon_{jk}\varepsilon_{ki} + B\varepsilon_{ik}^2\varepsilon_{ii} + \frac{1}{3}C\varepsilon_{ii}^3 + \dots \quad (4)$$

Here,  $p$  is the static pressure and the strain tensor,  $\varepsilon_{ij}$ , is measured relative to the system in its reference state at pressure  $p$ . The second-order elastic constants are  $K$ , the bulk modulus, and  $\mu$ , the shear modulus; they determine the speeds of small amplitude sound:

$$V_p = \sqrt{[K + (4/3)\mu]/\rho} \quad (5)$$

is the compressional sound speed and

$$V_s = \sqrt{\mu/\rho} \quad (6)$$

is the shear speed. ( $\rho$  is the density.) The third-order elastic constants,  $A, B, C$  describe how the speeds of sound change to first order in an additional applied stress,  $\Delta\sigma_{ij}$ , and they also describe such nonlinear effects as second harmonic generation, shock wave formation, etc. For the path-independent model described above (i.e. when we set  $f_t \equiv 0$ ), it is straightforward to carry out this expansion to derive analytic expressions for the various moduli [2]. Indeed, the path-independent models can be generalized slightly to include those in which the beads are first welded together over a radius  $b > 0$  [8].

Theoretical predictions of the speeds of sound from this path-independent model for different values of  $b$  are plotted in Fig. 1, taken from Ref. [2]. One of the third-order constants from this model is plotted in Fig. 2. (Here, the third order constants are in the ratio  $A:B:C::8:4:1$  so it is necessary to plot only one of them.)

For the case in which  $b = 0$  (i.e. unconsolidated beads) the ema predictions can be simply expressed as functions of the pressure:

$$K = \frac{C_n}{12\pi} [(1 - \phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3}, \quad (7)$$

$$\mu = \frac{C_n}{20\pi} [(1 - \phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3}, \quad (8)$$

$$A = -\frac{C_n}{70\pi} [(1 - \phi)Z]^{4/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{-1/3}. \quad (9)$$

Here,  $Z$  is the average coordination number and  $\phi$  is the porosity.

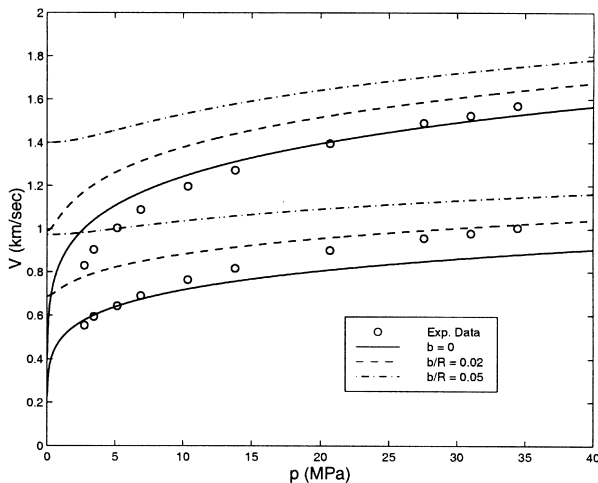


Fig. 1. Path independent ema predictions of pressure dependent sound speeds of granular media with welded contacts. The experimental data of Domenico [9] should be compared against the  $b = 0$  curves. A coordination number  $Z = 9$  was assumed (from Ref. [2]).

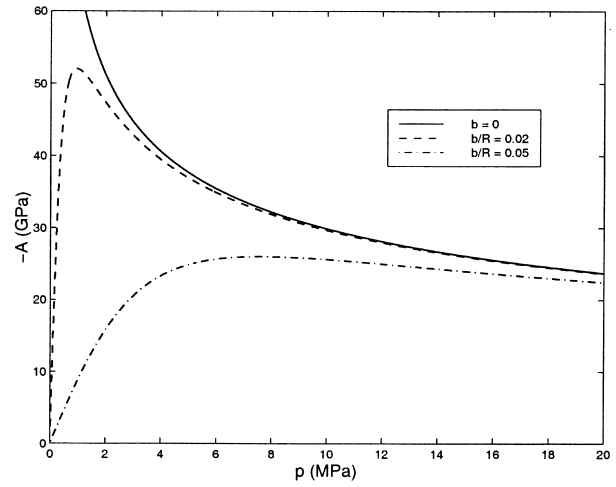


Fig. 2. Path independent ema for one of the third-order elastic constants of frictionless glass beads, as a function of confining pressure.

From Eqs. (7)–(9) as well as from Figs. 1 and 2, we see that, for unconsolidated beads, the second-order constants decrease to zero as the confining pressure decreases to zero but the third-order (and higher) elastic constants actually diverge. It is in this sense that unconsolidated granular media can be said to be extremely nonlinear. The presence of a welded contact,  $b > 0$ , acts to cut-off the divergence, but even so these systems can be orders of magnitude more nonlinear than ordinary, non-granular materials, such as metals, glasses, plastics, etc., for which the third-order constants are of the same order of magnitude as the second.

## 2.2. Path dependent forces

When the transverse force is given by Eq. (2), the work done in deforming the system is dependent upon the order (path) in which this is done. An expansion such as Eq. (4) therefore does not exist. Nonetheless, it is possible to develop an effective medium theory in which one keeps track of the order (path) in which the deformation is applied. The resulting stress tensor,  $\sigma_{ij}$ , depends upon the path taken in arriving at the final state of strain,  $\varepsilon_{ij}$ . As it turns out, the second-order elastic constants are in fact, well-defined path-independent quantities which depend only upon the final state of strain. In a typical experiment, however, the sound speeds may be measured as a function of applied stress,  $\sigma_{ij}$ , not applied strain,  $\varepsilon_{ij}$ , and so the sound speeds, considered as a function of applied stress, depend upon the order in which those stresses are applied. If the deformation path can be parameterized by some known functions,  $\{\varepsilon_{ij}(\xi)\}$  where  $\xi$  is a convenient parameter, the relationship between sound speeds and applied stress can be derived [2].

For the special case of loose beads in which the system is hydrostatically compressed to its final pressure,  $p$ , the ema expressions for  $K$  and  $\mu$  are particularly simple.  $K$  is unchanged from Eq. (7) and  $\mu$  is changed by virtue of the transverse forces:

$$K = \frac{C_n}{12\pi} [(1 - \phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3}, \quad (10)$$

$$\mu = \frac{C_n + (3/2)C_t}{20\pi} [(1 - \phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3}. \quad (11)$$

We see that  $K$  is predicted to be independent of  $C_t$  and  $\mu$  is predicted to be linearly dependent upon  $C_t$ , a point to which we return later.

The ema can be applied to any stress protocol, not just hydrostatic stress. In Fig. 3 we show the results of measurements of sound speeds on loose glass beads confined to a rigid cylinder. This is the so-called uniaxial strain test. The speeds are plotted as a function of applied stress,  $\sigma_{zz}$ . We show the predictions of the effective medium theory, in which certain reasonable assumptions about some of the parameters were made. (See Ref. [10] for details.) We see that the application of non-hydrostatic stress breaks the symmetry of the system, with the result that the speed of a longitudinal wave traveling along the direction of the applied stress increases more rapidly than that propagating perpendicular to it. Additionally, a transverse wave propagating perpendicular to the direction of applied stress can have two inequivalent

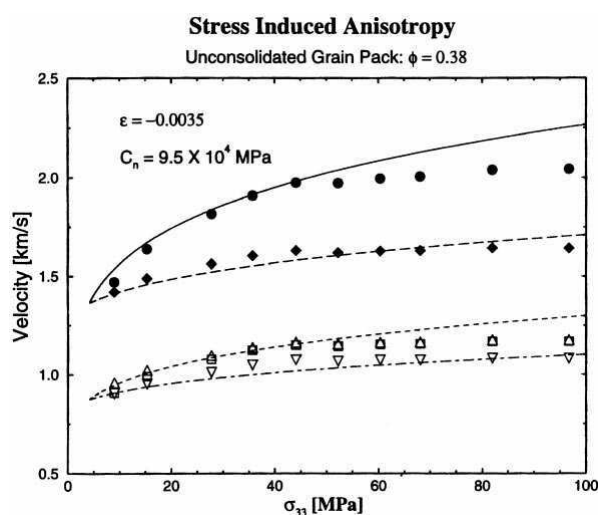


Fig. 3. A comparison of the experimentally determined speeds of sound in a uniaxial strain test, as a function of applied stress. The solid symbols are compressional speeds parallel and perpendicular to the stress direction, and the open symbols are the shear speeds, parallel to the stress direction and perpendicular to it, both polarizations. The continuous lines are the predictions of the ema (from Ref. [10]).

polarizations each of which is different than that of a transverse wave parallel to the direction of applied stress. The effective medium theory for the different sound speeds is in rough accord with the experimental data.

### 3. Molecular dynamics simulations

With reasonable choices of the relevant parameters, the effective medium theories described above can give a good approximate description of the acoustic properties of granular media, as in Fig. 1, but there are problems, even for the simplest case of unconsolidated beads: (1) The effective medium theory predicts that the second order moduli vary with confining pressure as  $p^{1/3}$ , regardless of the values of coordination number,  $Z$ , and regardless of the values of  $C_n$  or  $C_t$ . It is clear from Fig. 1 that the real data do not obey this power law. (2) Absent a molecular dynamics simulation, one does not know the appropriate value of the average coordination number,  $Z$ , to use in Eqs. (10) and (11). (3) The ratio  $K/\mu$ , or, equivalently  $V_p/V_s$ , is predicted from Eqs. (10) and (11) to be independent of pressure. Experimentally the ratio  $K/\mu$  is indeed roughly constant but with a value which is intermediate between the two ema predictions, Eqs. (7) and (8) on the one hand, and Eqs. (10) and (11) on the other. Thus the implication is that  $C_t$  (in Eq. (11)) is much smaller in real systems than expected from the Mindlin theory, Eq. (2), or that the ema is wrong.

These facts have motivated us to undertake molecular dynamics simulations [11]. In Fig. 4 we show the existing experimental data for  $K$  and  $\mu$  on loose glass beads along with predictions of the effective medium theory (Eqs. (10) and (11)). From the simulations we find that the numerical value of the average coordination number is  $Z \approx 6$  (not  $Z = 9$  as in Fig. 1) for pressures less than 100 MPa, so this is the value we use in Eqs. (10) and (11). We also show the results for our simulations. Although there is

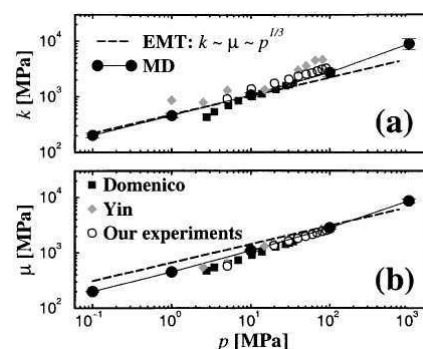


Fig. 4. Pressure dependence of the elastic moduli from MD, experiments, and path dependent ema: (a) bulk modulus, and (b) shear modulus. The data are from Refs. [9,11,12].

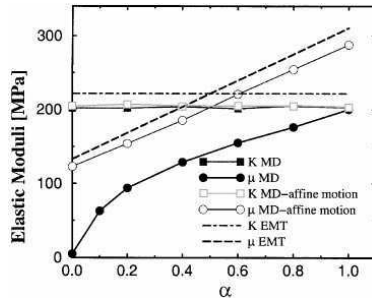


Fig. 5. Bulk modulus,  $K$ , and shear modulus,  $\mu$ , vs.  $\alpha$  for a fixed pressure,  $p = 100$  kPa. The effective medium theory is compared against the unrestricted numerical simulations. For comparison, we also show the results of simulations in which the displacement of each grain is restricted to affine motion and rotation is disallowed.

scatter within and disagreement between the different data sets, we see immediately that the simulations, the effective medium theory, and the data are in reasonable agreement for the bulk modulus,  $K$ . The experimental data and the simulations are in reasonable agreement for  $\mu$ . The ema, however, significantly over-predicts  $\mu$ . Our conclusions are that the assumption of the Hertz–Mindlin contact law, Eqs. (1) and (2), is not seriously in error, the ema is quite accurate in predicting  $K$ , and it is quite inaccurate in predicting  $\mu$ .

According to the ema, the transverse force,  $f_t$ , contributes only to the shear modulus and not to the bulk modulus. Thus, we are motivated to examine molecular dynamic simulations in which  $C_t$  in Eq. (2) is replaced by  $\alpha C_t$  where the dimensionless parameter  $\alpha$  is varied from 0 to 1. The results for a confining pressure of  $p = 100$  kPa are shown in Fig. 5, along with the predictions of Eqs. (10) and (11). The simulations confirm that  $K$  is essentially independent of the strength of the transverse force. Astonishingly, the shear modulus is extremely sensitive in that it (nearly) vanishes as  $\alpha \rightarrow 0$ , in sharp contrast to the prediction of Eq. (11). What is the most serious problem with the ema? We believe it to be the “affine assumption” we discussed earlier. Thus, we redo the numerical simulations by forcing each ball to translate according to Eq. (3) and not rotate at all. Finally, these simulations, which are also shown in Fig. 5 are indeed in agreement with the ema predictions, Eq. (11). What is evidently happening in the unconstrained simulations, and in the experiments, is that the beads in the immediate neighborhood of each grain move around relative to the central grain in such

a way that if there are central forces only ( $C_t = 0$ ), there is a nearly complete relaxation of the system to an applied shear. The system is a fluid, or nearly so.

#### 4. Conclusions

We have found that: (1) The Hertz–Mindlin contact theory is a good approximation to the actual grain–grain contact law in real glass bead systems subjected to a known stress. (2) The very simple effective medium approximation gives a reasonable, if approximate, description of the response of the system. (3) There is a big difference between systems in which the forces may be presumed to be conservative and path independent and those for which the forces are path dependent. In the former, a hyper-elastic theory of the elastic constants may be developed whereas in the latter the third-order (and higher-order) constants are undefinable. (4) The molecular dynamic simulations establish the validity of the effective medium theory for the bulk modulus and also establish that the ema for the shear modulus is in serious error. The problem lies with the inability of the ema to correctly treat the relaxation of the surrounding grains when a shear deformation is applied.

#### References

- [1] K.W. Winkler, X. Liu, *J. Acoust. Soc. Am.* 100 (1996) 1392.
- [2] A.N. Norris, D.L. Johnson, *J. Appl. Mech.* 64 (1997) 39.
- [3] D.L. Johnson, A.N. Norris, *J. Mech. Phys. Solids* 45 (1997) 1025.
- [4] D.A.G. Bruggeman, *Ann. Phys. (Leipzig)* 24 (1935) 636.
- [5] R. Landauer, in: J.C. Garland, D.B. Tanner (Eds.), *Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media*, AIP, New York, 1977.
- [6] R.D. Mindlin, H. Deresiewicz, *J. Appl. Mech.* 75 (1953) 327.
- [7] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, Pergamon, New York, 1970.
- [8] P.J. Digby, *J. Appl. Mech.* 48 (1981) 803.
- [9] S.N. Domenico, *Geophysics* 42 (1977) 1339.
- [10] D.L. Johnson et al., *Trans. ASME* 65 (1998) 380.
- [11] H.A. Makse et al., *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), to be published.
- [12] H. Yin, *Acoustic velocity and attenuation of rocks: isotropy, intrinsic anisotropy, and stress induced anisotropy*, Ph.D. Thesis, Stanford University, 1993.

D

*The Apparent Failure of Effective  
Medium Theory in Granular  
Materials*, *Physic and Chemistry of the  
Earth (A)*, 26, 107, 2001



Pergamon

Phys. Chem. Earth (A), Vol. 26, No. 1–2, pp. 107–111, 2001

© 2001 Elsevier Science Ltd

All rights reserved

1464-1895/01/\$ - see front matter

PII: S1464-1895(01)00033-3

## The Apparent Failure of Effective Medium Theory in Granular Materials

H. A. Makse<sup>1</sup>, N. Gland<sup>1,2</sup>, D. L. Johnson<sup>1</sup> and L. Schwartz<sup>1</sup><sup>1</sup>Schlumberger-Doll Research, Old Quarry Road, Ridgefield, CT 06877<sup>2</sup>Ecole Normale Supérieure, 45 rue d'ULM, F-75005, Paris, France

Received 25 April 2000; accepted 13 November 2000

**Abstract.** The linear and nonlinear elastic properties of granular media are analyzed within the context of effective medium theories, as well as with numerical molecular dynamic simulations, assuming the validity of the Hertz-Mindlin theory at the single contact level. There is a crucial distinction between force laws which are path independent, leading to a hyper-elastic effective medium theory, and those which are path dependent, for which the deformation history must be followed explicitly. The effective medium theories provide a reasonable description of existing experimental data, considered as a function of applied stress, but there are significant discrepancies. Numerical simulations resolve the question as to whether the problem lies with the treatment of the individual grain-grain contact or with the effective medium approximation (*ema*). We find that the problem lies principally with the latter: The bulk modulus is well-described by the *ema* but the shear modulus is not, principally because the *ema* does not correctly allow for the grains to relax from the affine motion assumed by the *ema*.

© 2001 Elsevier Science Ltd. All rights reserved.

### 1 Introduction

The elastic properties of granular aggregates, such as sedimentary rocks, can be enormously nonlinear as compared with the properties of non-porous materials (Winkler and Liu, 1996). The end member of such systems may be taken to be a loose, “unconsolidated”, aggregate of glass beads which acquire a stiffness solely as a result of applied stress. This is because if two grains are just touching, the force, considered as a function of displacement, does *not* initially grow linearly, as with most systems, but it has a power law behavior [Eqs. (1) and (2) below]. Aside from posing an interesting problem in the physics of disordered systems, these systems are unusually nonlinear in their response and they can exhibit path dependence. By this we mean that the work done in deforming the system can depend upon whether one first compresses

the system, then shears it, or first shears then compresses, or compresses and shears simultaneously, etc. The result depends upon the path taken in  $\{\epsilon_{ij}\}$  space and not just on the final state of strain  $\{\epsilon_{ij}(\text{final})\}$ .

Here we review some recent theoretical research we have undertaken in an attempt to understand these systems. We first discuss effective medium theories of the elastic properties, then we present our molecular dynamic simulations, and we end with a brief summary.

### 2 Effective Medium Theories

The starting point is the behavior of a single grain-grain contact, which we assume to be describable by the Hertz-Mindlin theory and variations thereof. The normal and transverse forces,  $f_n$  and  $f_t$  may be written in terms of the relative normal and transverse displacements of two spheres,  $w$  and  $s$ :

$$f_n = \frac{2}{3} C_n R^{1/2} w^{3/2} \quad (1)$$

$$\Delta f_t = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s \quad (2)$$

The prefactors  $C_n = 4G/(1 - \nu)$  and  $C_t = 8G/(2 - \nu)$  are defined in terms of the shear modulus  $G$  and the Poisson's ratio  $\nu$  of the individual particles.  $R$  is the radius of the grain. The normal component of the force,  $f_n$ , is a simple function of the relative positions of the two spheres, i.e. it is a simple function of  $w$ . The transverse force,  $f_t$ , is written in differential form to emphasize that its numerical value depends upon the trajectory taken in  $(w, s)$  space. In general, this part of the force is said to be path dependent. See Norris and Johnson (1997) and references therein.

The basic idea of the effective medium theories relevant to these problems is that the macroscopic work done in deforming the system is set equal to the sum of the work done on each grain-grain contact and that the latter is replaced by a

Correspondence to: D. L. Johnson

suitable average. There are two assumptions: (1) The center of each grain displaces according to the dictates of the macroscopic strain

$$u_i = \epsilon_{ij} X_j, \quad (3)$$

where  $\mathbf{X}$  is the initial position of the center of the grain. When the deformation is describable by a symmetric deformation,  $\nabla \times \mathbf{u} = 0$ , none of the grains rotate. This is called the "assumption of affine motion". (2) Each grain experiences essentially the same environment as any other grain. On average, the distribution of contacts is spherically symmetric. Under these assumptions, the total work done on the system may be written in terms of angular averages of the work done on a single contact. This sort of "effective medium theory" is simpler than the conventional Bruggemann type of *ema* (Bruggemann, 1935) in that it is more analogous to a simple average of the non-linear spring constants.

As written, the transverse force, Eq. (2), was derived under the assumption that once the grains are pressed together, there is perfect sticking of the contact circles. This force is path dependent, meaning that whether the grains are first pressed and then sheared, or vice-versa, makes a difference in the work done on the contact. The numerical value of  $f_t$  depends upon the path taken in  $(w, s)$  space. Were we to assume, on the other hand, that there is perfect slippage of the particles,  $\mathbf{f}_t \equiv 0$  instead of Eq. (2), then the resulting forces are path independent. The practical result of this path independent assumption is that the resulting work done in deforming the system is now a function of the state of strain and is *not* dependent upon the way in which the strain is applied. The path independent forces lend themselves to the development of a macroscopic strain energy density, and thus to a well-defined theory of hyper-elasticity, whereas the path dependent forces need to be treated specially. We consider these two cases in turn. A cautionary note: In reality the contact may slip over an annular ring if the coefficient of friction is finite (Mindlin and Deresiewicz, 1953). In the limit of infinitesimal  $\Delta s$  we either neglect the slippage altogether or we assume complete slip, as the case may be. In any case, the forces are conservative in the sense that if the deformation path, whatever it may be, is reversed exactly, the total work done is zero.

### 2.1 Path Independent Forces

If the work done on a single contact is independent of the order in which the normal and transverse forces are applied i.e. they are path independent, then the system as a whole is said to be *hyper-elastic*. An energy density can be defined in terms of the macroscopic strain tensor,  $\epsilon_{ij}$ , and it can usefully be expanded in powers thereof. For any isotropic system this expansion takes the form (Landau and Lifshitz, 1970)

$$U(\{\epsilon_{ij}\}) = U_0 - p\epsilon_{ii} + \frac{1}{2}[K - \frac{2}{3}\mu]\epsilon_{ii}^2 + \mu\epsilon_{ij}^2 + \frac{1}{3}A\epsilon_{ij}\epsilon_{jk}\epsilon_{ki} + B\epsilon_{ik}^2\epsilon_{ii} + \frac{1}{3}C\epsilon_{ii}^3 + \dots \quad (4)$$

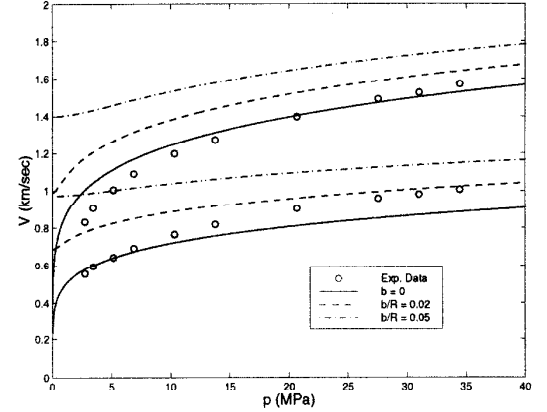


Fig. 1. Path independent *ema* predictions of pressure dependent sound speeds of granular media with welded contacts. The upper three curves and the upper data set refer to compressional wave speeds, whereas the lower curves and data set refer to transverse wave speeds. The experimental data of Domenico (1977) should be compared against the  $b = 0$  curves. A coordination number  $Z = 9$  was assumed. From Norris and Johnson (1997).

Here,  $p$  is the static pressure and the strain tensor,  $\epsilon_{ij}$ , is measured relative to the system in its reference state at pressure  $p$ . The second order elastic constants are  $K$ , the bulk modulus, and  $\mu$ , the shear modulus; they determine the speeds of small amplitude sound:

$$V_p = \sqrt{[K + (4/3)\mu]/\rho} \quad (5)$$

is the compressional sound speed and

$$V_s = \sqrt{\mu/\rho} \quad (6)$$

is the shear speed. ( $\rho$  is the density.) The third-order elastic constants,  $A, B, C$  describe how the speeds of sound change to first order in additional applied stress,  $\Delta\sigma_{ij}$ , and they also describe such nonlinear effects as second harmonic generation, shock wave formation, etc. For the path independent model described above (i.e. when we set  $\mathbf{f}_t \equiv 0$ ), it is straightforward to carry out this expansion to derive analytic expressions for the various moduli (Norris and Johnson, 1997). Indeed, the path independent models can be generalized slightly to include those in which the beads are first welded together over a radius  $b > 0$  (Digby, 1981). Theoretical predictions of the speeds of sound from this path independent model for different values of  $b$  are plotted in Fig.(1), taken from Norris and Johnson (1997). One of the third order constants from this model is plotted in Fig.(2). (Here, the third order constants are in the ratio  $A : B : C :: 8 : 4 : 1$  so it is necessary to plot only one of them.)

For the case in which  $b = 0$  (i.e. unconsolidated beads) the *ema* predictions can be simply expressed as functions of the pressure:

$$K = \frac{C_n}{12\pi} [(1 - \phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3} \quad (7)$$



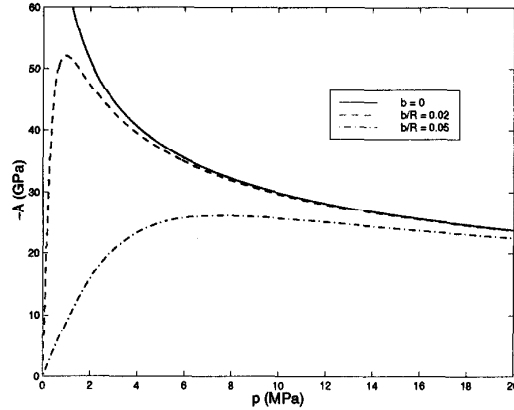


Fig. 2. Path independent *ema* for one of the 3rd order elastic constants of frictionless glass beads, as a function of confining pressure.

$$\mu = \frac{C_n}{20\pi} [(1-\phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3} \quad (8)$$

$$A = -\frac{C_n}{70\pi} [(1-\phi)Z]^{4/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{-1/3} \quad (9)$$

Here,  $Z$  is the average coordination number and  $\phi$  is the porosity.

From Equations (7)-(9) as well as from Figures (1) and (2), we see that, for unconsolidated beads, the second order constants decrease to zero as the confining pressure decreases to zero but the third order (and higher) elastic constants actually diverge. It is in this sense that unconsolidated granular media can be said to be extremely nonlinear. The presence of a welded contact,  $b > 0$ , acts to cut-off the divergence, but even so these systems can be orders of magnitude more nonlinear than ordinary, non-granular materials, such as metals, glasses, plastics, etc., for which the third order constants are of the same order of magnitude as the second.

## 2.2 Path Dependent Forces

When the transverse force is given by Eq.(2), the work done in deforming the system is dependent upon the order (path) in which this is done. An expansion such as Eq.(4) therefore does not exist. Nonetheless, it is possible to develop an effective medium theory in which one keeps track of the order (path) in which the deformation is applied. The underlying idea is the same as in Eq. (4) in the sense that one looks at the work done on the system as a function of additional incremental strain starting from a specific state of stress/strain. By equating the macroscopic expression for this work to the sum of the work done in all the individual contacts, one can derive expressions, which are path dependent, for the stress, the 2nd order elastic constants, and quantities which generalize the 3rd order constants. The resulting stress tensor,  $\sigma_{ij}$ , depends upon the path taken in arriving at the final state of

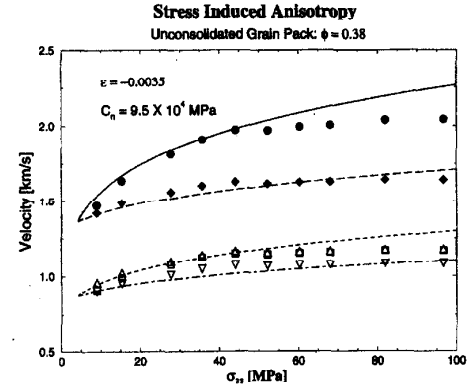


Fig. 3. A comparison of the experimentally determined speeds of sound in a uniaxial strain test, as a function of applied stress. The solid symbols are compressional speeds parallel and perpendicular to the stress direction, and the open symbols are the shear speeds, parallel to the stress direction and perpendicular to it, both polarizations. The solid lines are the predictions of the *ema*. From Johnson *et al.* (1998).

strain,  $\epsilon_{ij}$ . As it turns out, the second order elastic constants are in fact, well-defined path independent quantities which depend only upon the final state of strain. In a typical experiment, however, the sound speeds may be measured as a function of applied stress,  $\sigma_{ij}$ , not applied strain,  $\epsilon_{ij}$ , and so the sound speeds, considered as a function of applied stress, depend upon the order in which those stresses are applied. If the deformation path can be parameterized by some known functions,  $\{\epsilon_{ij}(\xi)\}$  where  $\xi$  is a convenient parameter, the relationship between sound speeds and applied stress can be derived (Norris and Johnson, 1997).

For the special case of loose beads in which the system is hydrostatically compressed to its final pressure,  $p$ , the *ema* expressions for  $K$  and  $\mu$  are particularly simple.  $K$  is unchanged from Eq.(7) and  $\mu$  is changed by virtue of the transverse forces:

$$K = \frac{C_n}{12\pi} [(1-\phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3} \quad (10)$$

$$\mu = \frac{C_n + (3/2)C_t}{20\pi} [(1-\phi)Z]^{2/3} \left[ \frac{6\pi p}{C_n} \right]^{1/3} \quad (11)$$

We see that  $K$  is predicted to be independent of  $C_t$  and  $\mu$  is predicted to be linearly dependent upon  $C_t$ , a point to which we return later.

The *ema* can be applied to any stress protocol, not just hydrostatic stress. In Fig. (3) we show the results of measurements of sound speeds on loose glass beads confined to a rigid cylinder. This is the so-called uniaxial strain test. The speeds are plotted as a function of applied axial stress,  $\sigma_{33}$ . We show the predictions of the effective medium theory, in

which certain reasonable assumptions about some of the parameters were made. Specifically, it is assumed that after the sample is cycled several times, as in the actual experiments, there is a remanent hydrostatic strain, with numerical value  $\epsilon$ , as indicated in Figure (3). See (Johnson *et al.*, 1998) for details. We see that the application of non-hydrostatic stress breaks the symmetry of the system, with the result that the speed of a longitudinal wave traveling along the direction of the applied stress increases more rapidly than that propagating perpendicular to it. Additionally, a transverse wave propagating perpendicular to the direction of applied stress can have two inequivalent polarizations each of which is different than that of a transverse wave parallel to the direction of applied stress. (This effect is sometimes referred to as shear-wave splitting.) The effective medium theory is in rough accord with the experimental data.

### 3 Molecular Dynamics Simulations

With reasonable choices of the relevant parameters, the effective medium theories described above can give a good approximate description of the acoustic properties of granular media, as in Fig. (1), but there are problems, even for the simplest case of unconsolidated beads. (1) The effective medium theory predicts that the second order moduli vary with confining pressure as  $p^{1/3}$ , regardless of the values of coordination number,  $Z$ , and regardless of the values of  $C_n$  or  $C_t$ . It is clear from Figure (1) that the real data do not obey this power law. (2) Absent a molecular dynamics simulation, one does not know the appropriate value of the average coordination number,  $Z$ , to use in Eqs. (10) and (11). (3) The ratio  $K/\mu$ , or, equivalently  $V_p/V_s$ , is predicted from Eqs.(10) and (11) to be independent of pressure. Experimentally the ratio  $K/\mu$  is indeed roughly constant but with a value which is intermediate between the two *ema* predictions, Eqs.(7) and (8) on the one hand and Eqs.(10) and (11) on the other. Thus the implication is that  $C_t$  (in Eq.(11)) is much smaller in real systems than expected from the Mindlin theory, Eq.(2), or that the *ema* is wrong.

These facts have motivated us to undertake molecular dynamics simulations. One starts with a random distribution of a large number of spheres in a unit cell which is periodically repeated throughout space. The equations of motion for each sphere are numerically integrated using the forces given by Eqs. (1) and (2); the rotational motion is accounted by the torques implied by Eqs. (1) and (2). In addition, a viscous damping force is added, so that the particles eventually come to rest if the dimensions of the unit cell are held constant. The positions, velocities, and forces on all the spheres are continually updated until certain convergence criteria are satisfied. The first step is to compress the system so that a dense random packing of spheres is established corresponding to a predetermined value of the pressure. Next, an incremental compression or shear is applied to the unit cell and the change in the stress tensor is measured/computed, once

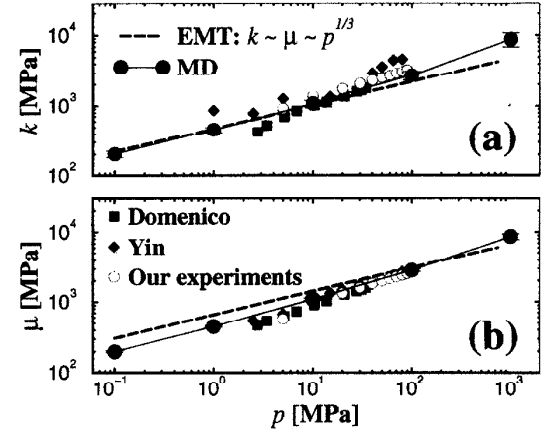


Fig. 4. Pressure dependence of the elastic moduli from molecular dynamics simulations, experiments, and path dependent *ema*: (a) bulk modulus, and (b) shear modulus. The data are from Domenico (1977), Yin (1993), and Makse, *et al.* (1999).

the system re-equilibrates. In this manner the bulk and shear moduli, respectively, can be determined for the system at each confining pressure. See Makse, *et al.* (1999) for details.

In Figure (4) we show the existing experimental data for  $K$  and  $\mu$  on loose glass beads along with predictions of the effective medium theory, Eqs. (10) and (11). From the simulations we find that the numerical value of the average coordination number is  $Z \approx 6$  (not  $Z = 9$  as in Figure (1)) for pressures less than 100 MPa, so this is the value we use in Eqs. (10) and (11). We also show the results for our simulations. Although there is scatter within and disagreement between the different data sets, we see immediately that the simulations, the effective medium theory, and the data are in reasonable agreement for the bulk modulus,  $K$ . The experimental data and the simulations are in reasonable agreement for  $\mu$ . The *ema*, however, significantly over-predicts  $\mu$ . Our conclusions are that the assumption of the Hertz-Mindlin contact law, Eqs. (1) and (2), is not seriously in error, the *ema* is quite accurate in predicting  $K$ , and it is quite inaccurate in predicting  $\mu$ .

According to the *ema*, the transverse force,  $f_t$ , contributes only to the shear modulus and not to the bulk modulus. Thus we are motivated to examine molecular dynamic simulations in which  $C_t$  in Eq. (2) is replaced by  $\alpha C_t$  where the dimensionless parameter  $\alpha$  is varied from 0 to 1. The results for a confining pressure of  $p = 100\text{kPa}$  are shown in Figure (5), along with the predictions of Eqs.(10) and (11). The simulations confirm that  $K$  is essentially independent of the strength of the transverse force. Astonishingly, the shear modulus is extremely sensitive in that it (nearly) vanishes as  $\alpha \rightarrow 0$ , in sharp contrast to the prediction of Eq.(11). What is the most serious problem with the *ema*? We believe it to be the ‘‘affine assumption’’ we discussed earlier. Thus, we redo the numerical simulations by forcing each ball to trans-

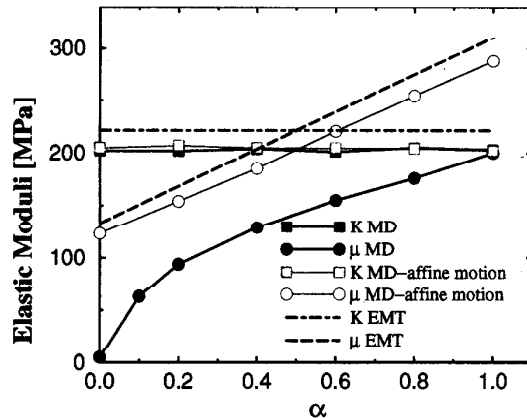


Fig. 5. Bulk modulus,  $K$ , and shear modulus,  $\mu$ , vs.  $\alpha$  for a fixed pressure,  $p=100\text{kPa}$ . The effective medium theory is compared against the unrestricted numerical simulations. For comparison, we also show the results of simulations in which the displacement of each grain is restricted to affine motion and rotation is disallowed.

late according to Eq. (3) and not rotate at all. Finally, these simulations, which are also shown in Fig. (5) are indeed in agreement with the *ema* predictions, Eq.(11). What is evidently happening in the unconstrained simulations, and in the experiments, is that the beads in the immediate neighborhood of each grain move around relative to the central grain in such a way that if there are central forces only ( $C_t = 0$ ), there is a nearly complete relaxation of the system to an applied shear. The system is a fluid, or nearly so.

#### 4 Conclusions

We have found that: (1) The Hertz-Mindlin contact theory is a good approximation to the actual grain-grain contact law in real glass bead systems subjected to a known stress. (2) The

very simple effective medium approximation gives a reasonable, if approximate, description of the response of the system. (3) There is a big difference between systems in which the forces may be presumed to be conservative and path independent and those for which the forces are path dependent. In the former, a hyper-elastic theory of the elastic constants may be developed whereas in the latter the third order (and higher order) constants are undefinable. (4) The molecular dynamic simulations establish the validity of the effective medium theory for the bulk modulus and also establish that the *ema* for the shear modulus is in serious error. The problem lies with the inability of the *ema* to correctly treat the relaxation of the surrounding grains when a shear deformation is applied.

#### References

- D. A. G. Bruggemann, "Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten des Mischkörper aus isotropen Substanzen", *Ann. Phys. (Leipzig)* **24** 636-664 (1935); see also R. Landauer in "Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media", J. C. Garland and D. B. Tanner, eds. (AIP, New York, 1977).
- P. J. Digby, "The Effective Elastic Moduli of Porous Granular Rocks", *J. Appl. Mech.* **48**, 803-808 (1981).
- S. N. Domenico, "Elastic Properties of Unconsolidated Porous Sand Reservoirs", *Geophysics* **42**, 1339-1368 (1977).
- D. L. Johnson, *et al.*, "Linear and Nonlinear Elasticity of Granular Media: Stress-Induced Anisotropy of a Random Sphere Pack", *Trans. ASME* **65**, 380-388 (1998).
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz, "Theory of Elasticity", (Pergamon, NY, 1970).
- H. A. Makse, *et al.*, "Why Effective Medium Theory Fails in Granular Materials", *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5070-5073 (1999).
- R. D. Mindlin and H. Deresiewicz, "Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces", *J. Appl. Mech.* **75**, 327-344 (1953).
- A. N. Norris and D. L. Johnson, "Nonlinear Elasticity of Granular Media", *J. Appl. Mech.* **64**, 39-49 (1997).
- K. W. Winkler and X. Liu, "Measurements of Third-Order Elastic Constants in Rocks", *J. Acoust. Soc. Am.* **100**, 1392-1398 (1996).
- H. Yin, "Acoustic Velocity and Attenuation of Rocks: Isotropy, Intrinsic Anisotropy, and Stress Induced Anisotropy", PhD thesis, Stanford Univ. (1993).

Troisième partie

Déformation et Endommagement des  
Matériaux Granulaires



# Processus de déformation dans un matériau granulaire non cohésif

## Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>205</b>
6.1.1	Plasticité et localisation de la déformation	205
6.1.2	Analyse de stabilité : enveloppe élastique et rupture plastique	206
6.1.3	Résultats expérimentaux et numériques antérieurs	207
6.1.4	Conditions initiales des tests de compression biaxiale	208
<b>6.2</b>	<b>Simulations Numériques</b>	<b>208</b>
6.2.1	Préparation des échantillons numériques	208
6.2.2	Les données mécaniques caractéristiques	212
6.2.3	Les propriétés des réseaux de contacts et de forces	217
6.2.4	La localisation de la déformation	220
6.2.5	Effets de la pression de confinement	237
<b>6.3</b>	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>239</b>

---

## 6.1 Introduction

### 6.1.1 Plasticité et localisation de la déformation

Aux petites échelles expérimentales du laboratoire comme aux grandes échelles des formations géologiques, la déformation que l'on rencontre est rarement de nature élastique et répartie de façon homogène dans le matériau ; on est plus souvent confronté à une déformation inélastique et localisée souvent de façon intense (c'est-à-dire de forts gradients) ; cette déformation inélastique ou plastique qui est par nature irréversible (au contraire de la déformation élastique) peut se présenter, et c'est le plus souvent le cas, de façon inhomogène. Ces zones de localisation de la déformation peuvent se présenter sous des formes très différentes selon les matériaux considérés (micro-fissures, joints de contacts, fractures, dissolution chimique) ; elles affectent de façon majeure les propriétés mécaniques et même les propriétés de transport de fluides dans les matériaux poreux.

Il est important de comprendre comment la présence des inhomogénéités et leur développement va affecter les paramètres constitutifs des matériaux. Il a été montré que le phénomène de localisation de la déformation implique de nombreux processus, depuis la croissance de défauts

microscopiques distribués, l'interaction mécanique qui en résulte sur une échelle mésoscopique et finalement la coalescence qui entraîne la localisation macroscopique de la déformation.

Si les objets microscopiques peuvent être modélisés théoriquement de façon assez rigoureuse, le passage à l'échelle macroscopique requiert bien souvent une analyse mathématique complexe et d'autre part nécessite, pour la résolution, de poser des hypothèses qui sont parfois simplificatrices ou peu raisonnables pour l'application d'étude finale.

Pour contourner ce problème, l'approche basée sur des lois phénoménologiques simples est utilisée. Dans le domaine fragile, on va rencontrer la rupture par fracturation macroscopique du matériau qui se présente sous la forme d'une déformation très localisée ; dans le domaine ductile, on peut rencontrer à la fois de la déformation homogène ou bien localisée.

### 6.1.2 Analyse de stabilité : enveloppe élastique et rupture plastique

Bien souvent, le domaine de déformation élastique (réversible) d'un matériau est réduit, c'est-à-dire borné dans l'espace des contraintes appliquées. On définit alors un critère de rupture macroscopique au-delà duquel, le matériau ne se comporte plus de façon élastique mais de manière plastique.

Lorsqu'un matériau est soumis à des contraintes suffisamment faibles, la déformation résultante est petite et élastique, c'est-à-dire réversible. Lorsque la contrainte appliquée dépasse un seuil "de résistance", des déformations irréversibles apparaissent dans le matériau ; le régime de déformation devient plastique ; ces déformations irréversibles naissent à la micro-échelle et vont conduire à la rupture macroscopique du matériau. Si les mécanismes microscopiques de déformation à l'origine de cette plasticité sont multiples, ils peuvent être englobés dans un modèle mécanique de comportement macroscopique unique ; en conséquence, il est souvent difficile de faire le lien entre une phase de comportement plastique macroscopique et la sollicitation d'un ou plusieurs processus plastiques microscopiques.

Si  $\bar{\sigma}$  est le tenseur des contraintes appliquées et  $\bar{\epsilon}$  le tenseur des déformations, la réponse du matériau s'exprime par sa rhéologie contenue dans le tenseur élasto-plastique  $C$  ; on lie alors la déformation à la contrainte selon :

$$\bar{\epsilon} = C\bar{\sigma}, \quad (6.1)$$

La stabilité du matériau est alors donnée par la valeur de la déformation incrémentale  $d\bar{\epsilon}$  résultante de l'application d'un incrément de contrainte  $d\bar{\sigma}$ . Le critère conventionnel de stabilité caractérisant le passage du régime de déformation élastique au régime de déformation plastique est le critère de Mohr-Coulomb. On obtient ce critère en traçant la courbe qui relie la valeur maximum du déviateur des contraintes  $Q$  (c'est-à-dire au point de rupture) à la contrainte moyenne appliquée  $p$  ; l'enveloppe élastique est donc représentée dans un espace des contraintes réduit, l'espace  $(p, Q)$  :

- $p$  est la pression effective moyenne  $p = \frac{1}{3}\sigma_{kk}$  (ou  $p = \frac{1}{2}\sigma_{kk}$  en  $2D$ , cas de l'étude qui va suivre), c'est le premier invariant du tenseur des contraintes effectives  $\sigma_{ij}^*$ .
- $Q$  est la contrainte déviatorique maximale  $Q = \sigma_{33} - \sigma_{11}$  (telle que  $\sigma_{33} > \sigma_{22} > \sigma_{11}$ ), (ou  $Q = \sigma_{22} - \sigma_{11}$  en  $2D$ ) ;  $Q$  est la racine du second invariant du tenseur des contraintes déviatoriques.
- La variation d'une des contraintes principales entraîne nécessairement la variation conjointe de  $p$  et  $Q$ .

L'enveloppe de Mohr-Coulomb, peut être approximée par une droite dont les paramètres sont la cohésion  $c$  et l'angle de frottement interne  $\varphi$  ; cette droite est tangente au cercle de Mohr-

Coulomb. Sur cette enveloppe, les contraintes normales  $\sigma_n$  et tangentielles  $\tau$  sont reliées par la relation :

$$\tau = \tan(\varphi)\sigma_n + c = \mu\sigma_n + c, \quad (6.2)$$

où  $\mu$  est le coefficient de frottement interne du matériau.

Selon que le matériau considéré possède un comportement plastique associé ou non (donné par des propriétés de symétrie du tenseur élasto-plastique  $C$ ), le critère de Mohr Coulomb pourra rendre compte de l'angle de la surface de rupture macroscopique du matériau lorsque la déformation plastique "bifurque" vers la localisation de la déformation. Dans le cas des matériaux non-associés, des instabilités apparaissent avant la limite prédite par le critère de Mohr-Coulomb ; cette chute de résistance apparaît notamment dans les matériaux granulaires non cohésifs comme les sables soumis à un état de contrainte asymétrique, c'est-à-dire en présence d'un déviateur par exemple lors d'un test de compression biaxial classique ; l'apparition de ces instabilités serait liée au fait que ces matériaux subissent des variations de leur volume en dilatation ; l'apparition de bandes de cisaillement dans ces matériaux s'accompagne d'une augmentation de son volume. Il faudrait alors définir d'autres critères de stabilité pour rendre compte de ces comportements. Ce n'est que par la compréhension des conditions d'apparition des bandes de cisaillement et des mécanismes microscopiques mis en jeu lors de cette déstabilisation, qu'une analyse de stabilité adéquate pourrait être développée. Il faut donc étudier et faire le lien entre la localisation de la déformation et les variables microscopiques d'un matériau granulaire ; c'est dans cette perspective que nous conduisons cette étude numérique en modélisant des tests de compression biaxiale sur des échantillons granulaires numériques.

### 6.1.3 Résultats expérimentaux et numériques antérieurs

Dans un test mécanique de type déformation plane, un matériau granulaire dense est dans un premier temps déformé de façon homogène. Autour du pic de contrainte, par contre, la déformation se localise soudainement selon de fines bandes (les bandes de cisaillement), et la contrainte chute rapidement vers un état de contrainte résiduel. La localisation de la déformation est à l'heure actuelle un objet d'étude à la fois théorique mais aussi expérimental. Cependant, malgré ces nombreuses études, les mécanismes de micro-déformation qui sont à l'origine de la naissance et du développement des bandes de cisaillement n'est pas encore très bien connu. C'est en partie à cause du fait qu'il n'est pas possible d'observer les micro-processus qui prennent place au sein de la roche. C'est pourquoi les simulations numériques sont de plus en plus utilisées pour palier à cette difficulté.

Oda and Kazama [114] ont observé la microstructure des bandes de cisaillement développée dans plusieurs sables naturels ; Les résultats qu'ils ont obtenus sont les suivants : de larges espaces vides sont générés au sein des bandes de cisaillement alors que la déformation cisailant est concentrée. Les particules ont des mouvements de rotation importants dans les bandes de cisaillement de telle sorte que de forts gradients de rotation sont générés. Chaque particule peut se déplacer par rapport à une particule voisine soit par glissement soit par roulement. Le rôle dominant du glissement a été considéré avec succès dans les théories de résistance et de dilatance des sols granulaires. Des résultats expérimentaux nous montrent cependant que, plutôt que le glissement, le roulement est un mécanisme de micro-déformation dominant entraînant une dilatance importante du matériau granulaire.



### 6.1.4 Conditions initiales des tests de compression biaxiale

Dans ce chapitre, nous allons étudier les micro-mécanismes de déformation qui conduisent à la localisation sous forme de bandes de 'cisaillement'; les résultats présentés sont préliminaires; Du fait de soucis matériels liés au cluster de calcul de l'ENS, nous n'avons pu réaliser que 3 jeux de simulations pour cette étude; Ce sont donc des simulations qui ne sont pas parfaitement calibrées du point de vue des conditions initiales, surtout au niveau de la pression de confinement. En effet, les systèmes que nous utilisons ont été équilibrés initialement à une pression de 10 MPa; or, nous souhaitons réaliser une étude des effets de la pression de confinement sur les processus de déformation; il aurait donc été nécessaire d'équilibrer pour chaque pression de confinement un échantillon pour que les conditions initiales soient le plus propres possible; Aux conditions initiales de chargement, nous avons donc appliqué aux échantillons équilibrés à 10 MPa des pressions de confinement inférieures ou supérieures; le résultat est une période transitoire où le système se dilate ou se comprime selon la pression de confinement appliquée; très rapidement, les systèmes atteignent les conditions d'état de contrainte souhaitée et le chargement suit son cours.

## 6.2 Simulations Numériques

### 6.2.1 Préparation des échantillons numériques

#### Propriétés de l'assemblage et protocole de préparation

L'assemblage initial se compose d'un mélange bidisperse de 10000 particules; la déviation de rayon  $\delta_R$  est de 10% par rapport au rayon moyen d'une valeur de  $\langle R \rangle = 0.1mm$ ; la densité des particules est fixée à  $2500 kgm^{-3}$ . Les propriétés mécaniques de l'assemblage initial dépendent avant tout des constantes physiques de contact, c'est-à-dire des rigidités normales  $k_n$  et tangentielles  $k_t$ ; elles sont fonction du modèle de contact utilisé; c'est le modèle de contact de Hertz-Mindlin qui est utilisé dans cette étude et les rigidités de contacts sont fonction des propriétés élastiques des grains modélisés, en l'occurrence, un module de cisaillement  $\mu_g = 30 GPa$  et un coefficient de Poisson  $\nu_g = 0.2$  mais également du taux de déformation normale au contact puisque le modèle de contact est non-linéaire ( $\propto w^{1/2}$ ). Le choix de ces constantes est de grande importance, surtout si l'on souhaite comparer les résultats des simulations à des résultats issus de tests sur des échantillons granulaires réels en laboratoire.

Le protocole de préparation initial des échantillons numériques à l'équilibre statique est le même que celui décrit dans les chapitres précédents. On rappelle que cette préparation est constituée d'une première phase de compaction à partir d'un gaz granulaire et d'une autre phase de *densification* pour atteindre un équilibre statique à une pression  $p$  déterminée ou bien à un état de fraction solide  $\phi_s$  donné. Pour réaliser la meilleure densification possible au cours de cette préparation initiale du système, premièrement les grains sont choisis comme étant non frottants, c'est-à-dire que le coefficient de friction entre les particules est nul ( $\mu_f^{(c)} = 0$ ), et un mécanisme numérique de servo-contrôle sur le taux de déformation macroscopique  $\bar{\epsilon}$  du système périodique est utilisé (se référer au Chapitre 4).

Les échantillons granulaires numériques ont donc été *consolidés* sous une contrainte uniforme  $p_0 = \frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22})$ , sans friction, et sans prise en compte de la gravité; par conséquent, les échantillons obtenus sont parfaitement isotropes

Une fois l'état d'équilibre statique obtenu ( $\langle \mathcal{Z} \rangle \rightarrow 0, p \rightarrow p_d, \phi_s \rightarrow \phi_s, \langle \dot{x} \rangle \rightarrow 0, \langle \omega \rangle \rightarrow 0$ ), les conditions de frontières périodiques (se référer au Chapitre 1) vont être supprimées dans toutes

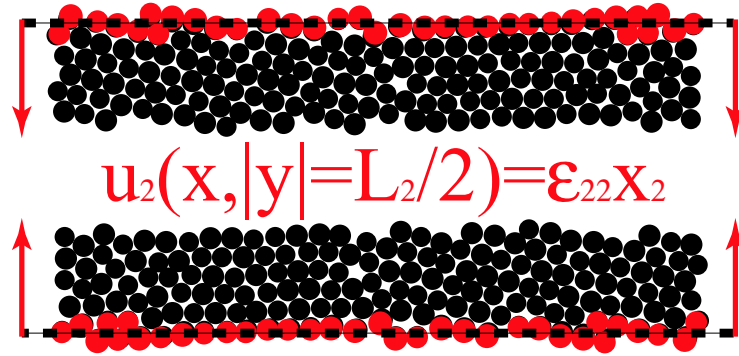


FIG. 6.1 – Conditions aux limites verticales de l'échantillon pour un test de chargement biaxial : construction de parois rigides par interception de particules avec deux droites horizontales proches des limites inférieures et supérieures de l'échantillon ; les particules interceptées auront un mouvement de translation rigide selon des vitesses fixées par le taux de déformation macroscopique imposé au système.

les directions de l'espace et remplacées par de nouvelles conditions. La déformation ultérieure de l'échantillon de particules est contrôlée par quatre conditions couplées deux à deux, verticalement, en haut et en bas, et horizontalement, à gauche et à droite.

### Les conditions aux frontières

**Les parois granulaires rigides de chargement** Les conditions de frontières périodiques inférieures et supérieures sont donc supprimées et remplacées par des conditions de mouvement rigide ; toutes les particules dont les positions des centres vérifient  $|y - y_B| < R$  et  $|y - y_T| < R$  seront considérées comme ayant le mouvement d'un seul et même corps rigide ; à l'état initiale, les particules interceptées ont un déplacement nul  $\vec{u} = 0$  ; de cette façon l'équilibre statique de l'échantillon est conservé. Par la suite, au moment où nous commencerons le test de chargement biaxial, ces parois granulaires rigides se déplaceront dans le plan vertical pour appliquer le chargement à l'échantillon ; le mouvement de ces parois peut être dicté soit par une condition de contrainte imposée  $\bar{\sigma}$  soit par une condition de déformation imposée  $\bar{\epsilon}$  ; dans cette étude, nous travaillerons à déformation imposée. Les particules encadrées par les parois rigides constituent notre échantillon granulaire, et les particules à l'extérieur sont supprimées du système numérique.

**Les membranes latérales flexibles de confinement** Les membranes flexibles granulaires ont été introduites pour simuler l'action des membranes flexibles réelles utilisées dans les tests triaxiaux expérimentaux pour transmettre la pression de confinement de l'huile sur l'échantillon de façon imperméable. Les frontières latérales de l'échantillon sont composées de particules liées sur une chaîne par des liens virtuels et peuvent être en contact localement les unes avec les autres ou non ; elles sont directement en contact avec les particules qui composent l'échantillon granulaire. Des forces centrales horizontales sont appliquées sur ces particules appartenant à la membrane qui seront transmises à l'échantillon par les forces de contact ; l'intensité des forces extérieures est globalement fixée par la valeur donnée à une pression de confinement  $p_c$  et localement par la longueur des segments qui lient les particules voisines sur la chaîne que constitue la membrane (voir figure 6.2(b)).

$$\vec{f}_1^m = \frac{L_1}{2} \sigma_{11} \vec{n}_1 + \frac{L_2}{2} \sigma_{11} \vec{n}_1 \quad (6.3)$$

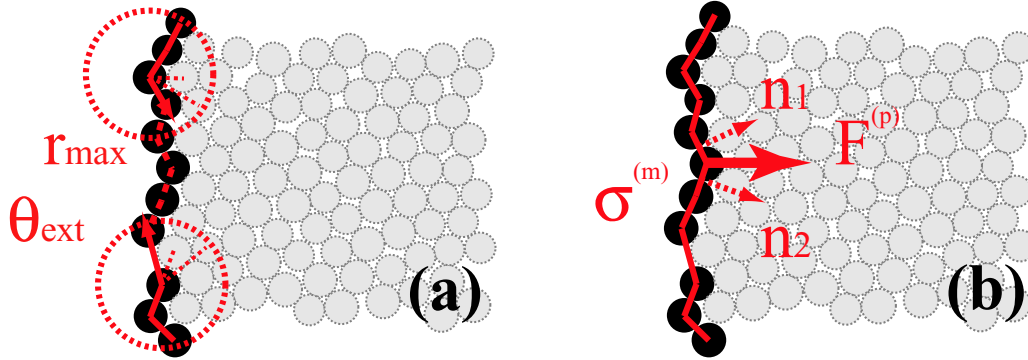


FIG. 6.2 – Conditions aux frontières latérales pour un test de chargement biaxial : (a) méthode de construction des membranes granulaires latérales *flexibles* par un double critère de sélection des particules sur les bords, à la fois de distance et angulaire ; (b) force  $f_m^{(p)}$  s'appliquant sur la particule  $(p)$  de la membrane  $m$ , dont la direction est horizontale et le module est contrôlé localement par les longueurs des deux segments de membranes auxquels appartient la particule  $(p)$ , et plus généralement par l'intensité de la composante horizontale du tenseur de contraintes  $p_c = \bar{\sigma}_{11}^{ext}$ .

où  $\sigma_{ij}$  est le tenseur des contraintes prescrit et  $n^1$  et  $n^2$  sont les vecteurs unités normaux des deux segments de membranes auxquels appartient la particule  $(p)$ .

Techniquement, ces membranes sont donc composées de particules connectées entre elles selon la direction verticale et forment une chaîne qui prend son origine à la base de l'échantillon au niveau de la paroi rigide inférieure et s'étend verticalement jusqu'au sommet de l'échantillon au niveau la paroi rigide supérieure.

A la manière du comportement mécanique du matériau flexible qui constitue les membranes expérimentales en laboratoire, cette membrane granulaire est elle aussi flexible dans la mesure où elle peut se dilater ou se comprimer par insertion ou exclusion locale de particules.

Pour générer numériquement ces membranes latérales à partir des particules *les plus extérieures* de l'échantillon granulaire, il n'y a qu'un paramètre à définir, il s'agit de la distance  $r^m$  qui correspond à la longueur maximale que pourront avoir les segments de membranes définies là les centres de deux particules voisines appartenant à cette membrane (voir figure 6.2(a)).

Si nous considérons une particule  $(k)$  quelconque de la membrane, pour déterminer quelle sera la particule suivante  $(k+1)$  à inclure dans la chaîne de particules, il faut parcourir l'ensemble des particules dans le voisinage immédiat de la particule  $(k)$  défini par le cercle de rayon  $r^m$ . Parmi toutes ces particules, une seule sera choisie, et ce sera celle dont :

- (1) la position du centre forme avec le centre de la particule  $(k)$  un angle  $\theta$  vers l'extérieur par rapport à l'axe de référence verticale ( $\theta = \pi/2$ ) le plus grand possible.
- (2) la distance  $|x_k, x_{k+1}|$ , bornée par  $r_m$  soit la plus grande possible.

En suivant ce protocole depuis la paroi granulaire rigide de chargement inférieure, on remonte de particule en particule à la paroi supérieure, et la chaîne est construite. Ce protocole de génération des membranes flexibles que nous avons implémenté s'est révélé particulièrement robuste au cours des simulations ; la membrane s'adapte correctement aux déformations de l'échantillon en se dilatant ou en se contractant.

Il y a deux façons de s'assurer qu'une fois la membrane initiale construite, celle-ci s'adapte correctement au cours de la déformation aux déviations locales de la forme de l'échantillon :

- (1) Soit il faut mettre à jour relativement *souvent* la liste des segments de membrane pour

s'assurer que certaines particules puissent quitter ou bien intégrer la membrane. Cette technique a été mise en oeuvre cependant, elle s'est révélée trop pénalisante en terme de temps de calcul si elle est réalisée à chaque cycle de calcul, ou bien trop complexe pour définir un critère simple de rafraîchissement ; une solution peut consister à rafraîchir la liste après un certain nombre de cycles de calcul.

- (2) L'autre méthode consiste simplement à générer *de zéro* les membranes depuis les parois à chaque cycle ou bien après un certain temps (une fois encore le critère n'est pas simple à définir). Pour cela, il faut générer alternativement la membrane depuis la base de l'échantillon, puis depuis son sommet ; en effet, ceci permet d'adapter très légèrement la surface de la base ou du sommet de l'échantillon granulaire au court de la déformation ( de l'ordre d'un 1 ou 2 grains en fonction de l'intensité du chargement ) ; dû à la déformabilité locale de la membrane, au plus proche des parois rigides, il se peut que localement le mouvement de certains grains vers l'extérieur devienne délicats à gérer à partir de la particule d'origine de la membrane ; il faut alors définir la particule voisine extérieure comme la nouvelle origine de la membrane. En alternant le sens vertical de la construction de la membrane (bas  $\rightarrow$  haut, haut  $\leftarrow$  bas), c'est la procédure de construction au cycle  $n$  qui se charge de choisir la particule de la paroi rigide qui sera la nouvelle origine de la construction en sens opposé au cycle suivant  $n + 1$ . Cette technique s'est révélée efficace.

### Les propriétés de friction de contacts

Si les particules étaient considérées comme non frottantes au cours du protocole de préparation de l'échantillon afin d'obtenir une densification maximale ; les contacts n'opposant pas de résistances transversales, les particules peuvent se réorganiser dans un état très dense. Par contre, lors des tests de chargement biaxiaux, la friction est rétablie au contact de toutes les particules, pour modéliser le comportement rugueux des contacts dans les agrégats granulaires réels. Le coefficient de friction est identique pour tous les contacts entre particules de l'échantillon numérique tel que  $\mu_f = 0.3$ .

Au niveau des frontières du système, on peut par contre choisir d'autres conditions de friction si on le souhaite :

- Au niveau des deux parois granulaires rigides de chargement, le coefficient de frictions de contacts entre les particules de l'échantillon et celles des parois granulaires  $\mu_f^{paroi}$  est choisi à une valeur identique au coefficient de friction des autres contacts de l'échantillon, c'est-à-dire à  $\mu_f = 0.3$ .
- En ce qui concerne les propriétés de contacts au niveau des frontières latérales, aucune friction n'a été posée aux contacts entre les particules internes de l'échantillon et les particules solidaires de la membrane, pour modéliser les caractéristiques lisses des membranes réelles.

### Les conditions de chargement biaxial

Les axes du repère orthogonal de référence sont les suivants : l'axe 1 est l'axe horizontal correspondant à la direction d'application des forces de confinement  $\vec{f}^m$  (soit  $f_1^m, f_2^m = 0$ ) sur les particules composant les membranes flexibles ; l'axe 2 est l'axe vertical, celui qui correspond à la direction de chargement axial du système par le déplacement imposé des particules composant les parois rigides (soit  $\dot{\epsilon}_{22}^p, \dot{\epsilon}_{11}^p = 0$ ).

En réalisant un test biaxial de la sorte, au sein de l'échantillon granulaire, la contrainte verticale  $\sigma_{22}$  est augmentée alors que la contrainte horizontale  $\sigma_{11}$  est conservée constante à  $p_c$ , si la pression d'équilibration initiale du système  $p_0$  a la valeur de la pression de confinement. Si

ce n'est pas le cas,  $\sigma_{11}$  diminuera ou augmentera au démarrage du test biaxial pour se stabiliser dans un délai raisonnable à la valeur de  $p_c$ . Cependant, il est préférable d'avoir des conditions *propres* pour la réalisation des essais et par conséquent, il serait souhaitable d'avoir autant d'échantillons numériques équilibrés aux pressions  $p_0$  que d'expériences numériques aux pressions de confinement  $p_c$ . Dans le cadre de cette étude, à cause de contraintes de temps et de capacités de calculs à notre disposition, nous n'avons pas préparé autant d'échantillons que de conditions de pressions de confinement étudiées ; un échantillon préparé à la pression  $p_0 = 10 \text{ MPa}$  a été utilisé pour tous les essais biaxiaux. Aux pressions inférieures ou supérieures, un état transitoire d'ajustement de la pression horizontale  $\sigma_{11}$  (influe sur  $\sigma_{22}$ ) est donc à prendre en considération. Cette étude, comme nous l'avons mentionné, a un caractère de travail préliminaire fournissant des résultats intéressants mais, qui nécessiterait d'être réalisée dans un cadre plus propre du point de vue des conditions de pressions initiales.

En ce qui concerne les conditions de chargement par les parois rigides, un taux de déformation  $\dot{\epsilon}_{22}$  a été choisi, permettant d'atteindre  $\approx 4\%$  de déformation axiale en un délai de calcul raisonnable (de l'ordre de  $10^5$  cycles, suivant les simulations). La déformation axiale  $\epsilon_{22}$  est donc égale au déplacement relatif entre les frontières inférieures et supérieures divisé par la hauteur initiale de l'assemblage de référence.

Nous adopterons les conventions de contraintes compressives positives et déformations compactantes positives, ce qui correspond à un raccourcissement et à une réduction de la porosité et comme nous l'avons vu, nous choisirons  $\sigma_{22}$  pour la composante de contrainte principale maximum et  $\sigma_{11}$ , pour la composante de contrainte principale minimum

## 6.2.2 Les données mécaniques caractéristiques

Nous allons tout d'abord présenter les résultats des simulations numériques de tests biaxiaux réalisés à des pressions de confinement  $p_c$  les plus proches de la pression d'équilibre de préparation de l'échantillon de référence ( $p_0 = 10 \text{ MPa}$ ), c'est-à-dire  $8 \text{ MPa}$  et  $10 \text{ MPa}$ . Regardons les résultats sur les données mécaniques classiques, à savoir sur les courbes de contrainte-déformation, et sur l'évolution des volumes.

### Les courbes de contrainte-déformation

Sur la figure 6.3, on présente l'évolution des contraintes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  en fonction de la déformation  $\epsilon_{22}$  pour deux tests biaxiaux réalisés à des pressions de confinement proches  $p_c = 8 \text{ MPa}$  et  $p_c = 10 \text{ MPa}$ . Les courbes sont très similaires en forme ; dans les deux tests, les échantillons voient leurs contraintes axiales augmenter alors que la déformation augmente ; ils atteignent tous les deux un pic de contrainte dont le rapport avec la pression de confinement est d'environ 2 à 2.5. Immédiatement après ce pic, la contrainte chute ; cet adoucissement est généralement associé à un phénomène de localisation de la déformation dans les agrégats granulaires denses. On constate que la chute est plus marquée pour le test réalisé à la pression de confinement la plus élevée.

Contrairement à des travaux récents de *Oda*, nous n'incluons pas dans notre modèle de résistance à la rotation des particules ; ils ont montré qu'en introduisant cette résistance, il était possible d'augmenter de façon conséquente la résistance de l'échantillon en terme d'intensité de la contrainte axiale au pic (rapport de 4 entre les contraintes axiales et horizontales).

Sur la figure, nous constatons également que la transmission de la pression de confinement à l'échantillon granulaire à travers les membranes flexibles fonctionne correctement ; Tout au long du chargement et de l'augmentation de la déformation,  $\sigma_{11}$  reste très proche de la valeur de  $p_c$ .

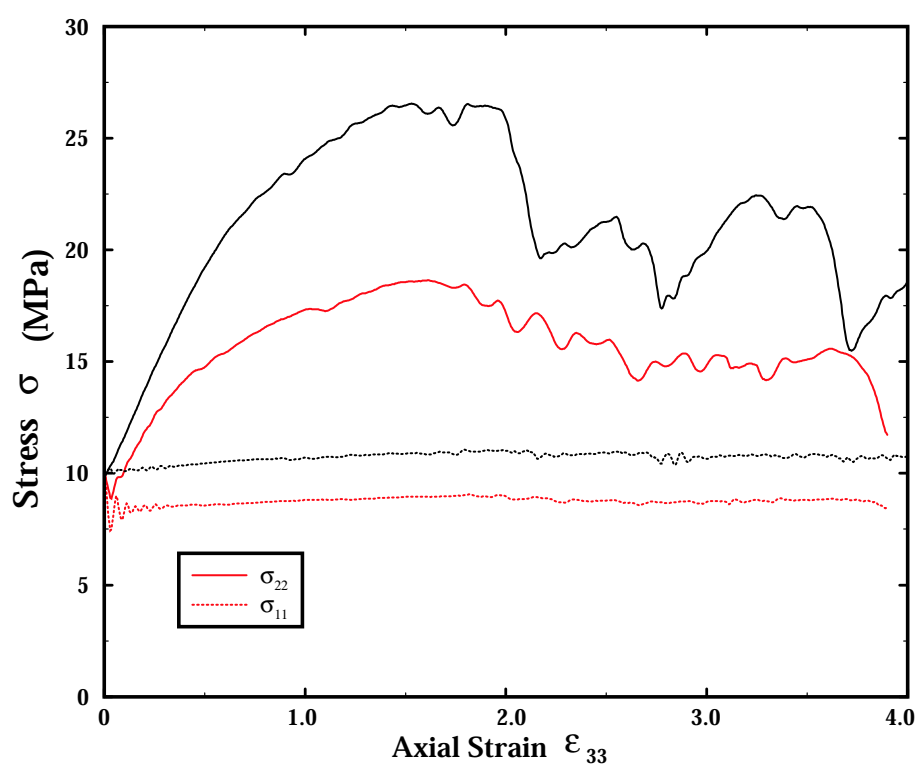


FIG. 6.3 – Courbes de contraintes (horizontale  $\sigma_{11}$  et verticale  $\sigma_{22}$ ) - déformation (axiale  $\epsilon_{22}$ ) au cours d'un chargement biaxial sous une pression de confinement  $P_c = \sigma_{11}^{ext} = 8 \text{ MPa}$  et  $10 \text{ MPa}$  dans un échantillon granulaire composé approximativement de  $N \approx 7500$  grains. La contrainte axiale augmente jusqu'à atteindre un pic pour un rapport de contrainte de 2 (pics à  $\approx 18,5 \text{ MPa}$  à 1.5% de déformation et  $26 \text{ MPa}$  à 2.0% de déformation) à 2.5 selon la pression de confinement, ensuite la contrainte chute; cet adoucissement est communément attribué à la localisation de la déformation.

Nous observons une légère oscillation initiale avant stabilisation pour l'échantillon à la pression de confinement  $p_c = 8 \text{ MPa}$ . Comme nous l'avons évoqué, ceci vient des conditions initiales de pression  $p_0$  de l'assemblage de référence; l'échantillon granulaire ajuste sa contrainte depuis  $p_0 = 10 \text{ MPa}$  à  $\sigma_{11} = p_c$  d'où les oscillations initiales qui s'amortissent rapidement.

### Effets du chargement sur les volumes

L'autre donnée mécanique généralement étudiée dans les essais biaxiaux se rapporte aux volumes; on suit par exemple l'évolution de la déformation volumique  $\epsilon_s$  qui est égale au changement de volume divisé par le volume de référence initiale; En faisant l'hypothèse que la déformation de la matrice est négligeable, on associe cette évolution de volume de l'échantillon au changement de porosité. Cependant, dans un matériau granulaire, on pourrait penser que la déformation aux contacts des grains n'est pas négligeable; nous confirmerons que les deux quantités, changement de volume et changement de porosité sont bien associées et que le volume de la matrice granulaire est donc bien constant.

**Problème posé** Contrairement aux autres études que nous avons menées et que nous avons présentées dans les chapitres précédents, le calcul du volume du matériau granulaire était relativement simple en effet, en conditions de frontières périodiques, les frontières sont caractérisées par des objets géométriques bien définis (ligne, plan) tel que  $S = L_1 * L_2$ ; dans cette étude, nous avons modifié les conditions aux frontières; si les frontières horizontales restent bien définies par des plans, ce n'est plus le cas des frontières latérales qui sont par natures flexibles et donc de géométrie courbe. Comment dans ces conditions calculer le volume du matériau granulaire qui se déforme.

- (1) Une technique intéressante serait de construire une triangulation de Delaunay dont les noeuds seraient les centres de toutes les particules de l'assemblage. Ce pavage triangulaire de l'espace nous permettrait alors de calculer la surface totale du matériau même déformé par sommation de l'ensemble des surfaces des éléments triangulaires. Cette méthode est tout à fait envisageable, et nous l'avons d'ailleurs implémenté dans le programme numérique que nous avons développé; cependant, ces simulations étant préliminaires, nous n'avons pas eu le loisir lors des simulations de calculer les surfaces par cette méthode. Nous avons donc réalisé un post-traitement comme nous allons l'expliquer pour accéder à la même information.
- (2) La technique que nous avons utilisée est la suivante; pour visualiser le déroulement de nos simulations et interpréter les résultats des données, il est souvent intéressant de construire une représentation visuelle des données; c'est ce que nous avons fait en générant des *images* dans un format vectoriel (ceci permet d'agrandir l'image sans perdre en qualité); nous avons par exemple généré des images des échantillons granulaires en représentant chaque particule et les segments de membrane flexible membrane au cours de la déformation. Finalement, nous pouvons traiter ces images numériques comme le ferait un expérimentaliste sur des images de lames minces. Les images étant vectorielles nous pouvons augmenter la résolution dans la limite de la mémoire de l'ordinateur (meilleure est la résolution, meilleure est la précision sur les valeurs des volumes). En calculant la surface occupée en pixels par les particules (les objets vectoriels) et celle occupée par la totalité de l'échantillon (lignes de pixels entre les membranes flexibles), nous avons accès à la surface de la phase solide et à la surface totale; ces deux informations nous permettent donc de calculer, le changement de volume et le changement de porosité du matériau. Mais tout d'abord, il est nécessaire de calibrer la méthode pour s'affranchir des effets de résolutions.

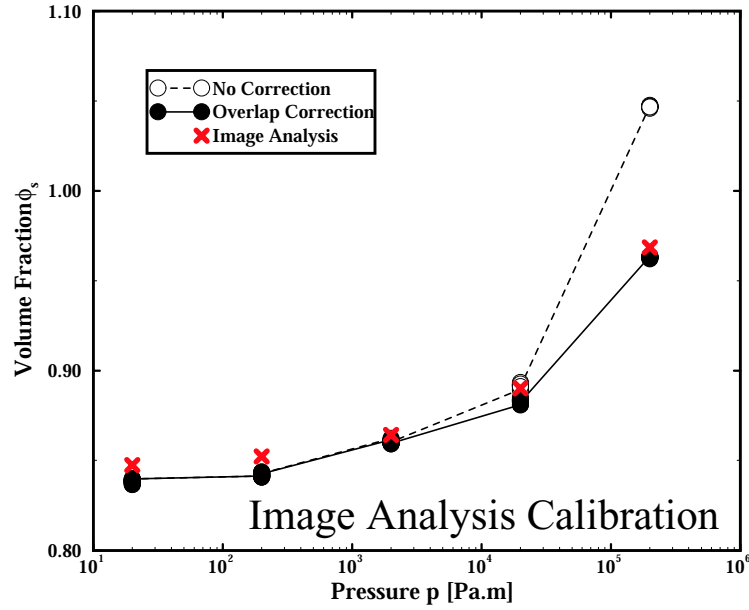


FIG. 6.4 – Calibration de la méthode de détermination de la porosité de surface  $\phi$  par analyse d'images sur des assemblages granulaires compressés à des pressions croissantes ( $\phi = \phi(p)$ , voir Chapitre 4) ; les images vectorielles (PostScript) générées à partir des positions des particules sont pixélisées avec une résolution suffisante ( $>300$  pixels/cm) pour pouvoir procéder à un comptage de pixels fiable ; la méthode analytique (conditions de frontières périodiques) et la technique d'analyse d'image sont en excellent accord.

**Calibration de la méthode** Sans objet géométrique simple, il n'est plus possible de définir la porosité comme  $\phi = 1 - \frac{S_g}{S_T}$ , car on ne sait plus définir  $S_T$  comme  $L_x \times L_y$ ,  $L_x$  n'ayant plus de sens, les frontières étant flexibles ; nous avons  $L_x = L_x(y)$ , nous avons donc recours à l'analyse des images vectorielles générées.

- Nous pixelisons ces images à l'aide du logiciel Adobe PhotoShop avec différentes résolutions et en jouant sur les contrastes et la luminosité, nous passons l'image en dégradé de gris dans un format binaire (noir et blanc), l'histogramme de l'image nous fournit le nombre  $n_n$  de pixels noirs correspondant à la matrice. Le nombre de pixels blancs ne correspond pas uniquement à la porosité, car l'image est plus large que l'échantillon.
- Pour accéder à la porosité, il faut donc accéder au volume de l'échantillon ; en utilisant un outil de remplissage, nous colorions l'extérieur et cette fois nous avons accès au nombre  $n_b$  de pixels blancs.

La surface de la matrice est donc  $n_n$  (c'est-à-dire surface des  $N$  particules sphériques moins la surface d'interpénétration), celle de la porosité  $n_b$  et la surface de l'échantillon est  $n_n + n_b$  ; pour calibrer les surfaces, nous connaissons la surface d'un grain qui donne la dimension. Cependant, la porosité peut être obtenue simplement par :

$$\phi = 1 - \frac{n_n}{n_b + n_n}, \quad (6.4)$$

et

$$\Delta S = \frac{(n_b + n_n(\epsilon_{22}) - n_b + n_n)(\epsilon_{22} = 0)}{n_b + n_n \epsilon_{22} = 0}. \quad (6.5)$$



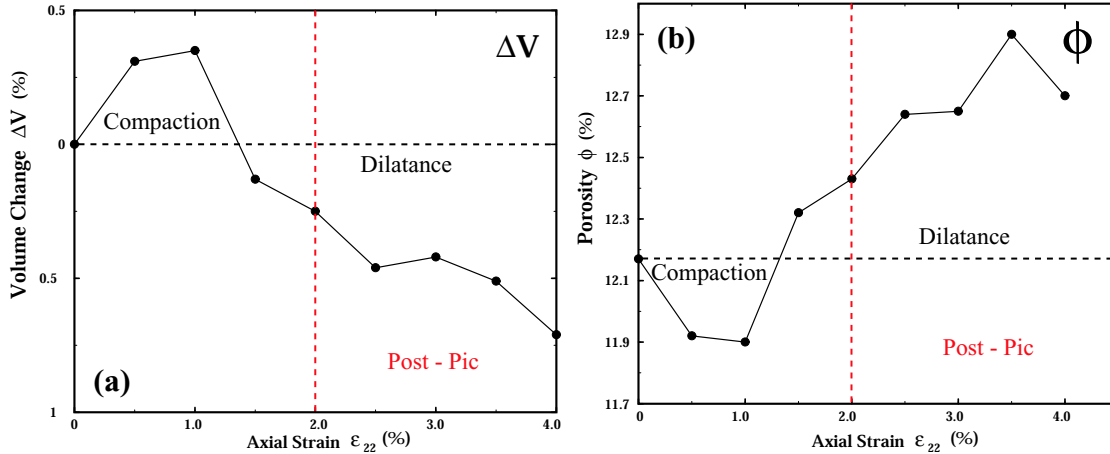


FIG. 6.5 – Evolution de la surface  $S$  de l'échantillon et de la porosité surfacique  $\phi$  au cours du chargement, calculées par post-traitement d'images vectorielles générées ; après une première phase de compaction jusque 20000 – 30000 cycles, (0.3% de volume et 0.3% de porosité on vérifie ainsi l'hypothèse de matrice homogène, l'interpénétration n'évolue pas  $\phi_s \approx cste$ ), l'échantillon se dilate (à la fin du chargement, on a  $-0.7\%$  de surface et  $-0.7\%$  de porosité).

Nous avons testé et vérifié cette technique d'estimation de la porosité sur les échantillons numériques  $2D$  préparés en conditions de frontières périodiques et présentés au chapitre 4 (voir figure 6.4) ; ces échantillons ont été préparés avec des conditions de frontières périodiques et leurs dimensions sont donc connues ; la dépendance en pression de la porosité donnée par la définition de la porosité  $\phi = 1 - \frac{N4\pi R^3}{3L_1L_2}$  est en bon accord avec les valeurs que nous obtenons avec la méthode de calcul par analyse d'image que nous venons de détailler.

Nous possédons donc un moyen fiable pour estimer a posteriori la porosité locale dans nos simulations de tests biaxiaux utilisant la condition de frontière de membrane flexible en tirant parti des images vectorielles générées.

**Evolution du volume et de la porosité** Sur la figure 6.5, on présente l'évolution de la déformation surfacique ainsi que de la porosité surfacique de l'échantillon granulaire préparé à la pression  $p_0 = 10 MPa$  et soumis au chargement biaxial. La déformation est compressive dans une première phase qui correspond à l'augmentation de la contrainte déviatorique en figure 6.3, jusqu'au pic de contrainte. On a donc une diminution à la fois de la surface et de la porosité de l'échantillon. Lorsqu'on approche du pic de contrainte, l'évolution des volumes se traduit par de la dilatance, et au niveau du pic, l'échantillon retrouve globalement le niveau des surfaces initiales ; la dilatance se poursuit de façon régulière après le pic pendant la phase d'adoucissement et de fluctuation de la contrainte axiale.

Comme on peut le voir également sur les simulations d'Oda, les minimums de volume ne correspondent pas exactement au maximum de contrainte ; il intervient un peu avant, lorsque la courbe de contrainte commence à s'infléchir par rapport à son évolution initiale. Il y a donc un phénomène pré-pic qui tend à faire à la fois diminuer l'augmentation de la contrainte et à faire passer l'échantillon dans un mode de dilatance. Pour comprendre ces phénomènes, nous allons étudier les propriétés *géométriques* des réseaux de contacts et de forces auxquels nous avons accès dans nos simulations numériques.

### 6.2.3 Les propriétés des réseaux de contacts et de forces

#### Evolution de la coordinance moyenne

Sur la figure 6.7, on peut voir que globalement, la coordinance moyenne des échantillons granulaires chute de 5% à 10% selon la phase de déformation que l'on regarde. Aux conditions initiales  $\epsilon_{22} = 0$ , on observe une petite diminution de coordinance qui correspond à la mise en place des conditions de frontières rigides horizontales des parois granulaires ; en effet, ces parois sont composées de particules qui à l'extérieur de l'échantillon ne sont plus en contact avec aucune autre particule, d'où la diminution de  $\langle Z \rangle$  observée vers depuis 4.2 vers 4.1 et 4.

Lors de la montée initiale en charge, on observe une très légère augmentation du nombre de contacts pour l'échantillon préparé à 10 MPa de l'ordre de 1% à 4.1 ; pour l'échantillon préparé à 8 MPa, on n'observe pas d'augmentation mais une fluctuation due à l'ajustement initiale à la pression de confinement  $p_0 \rightarrow p_c$ . Ensuite la coordinance chute jusqu'au niveau des pics de contrainte de 5% à 10% selon les échantillons ; c'est, nous l'avons vu, pendant cette phase que la déformation passe du mode compactant au mode dilatant et que l'évolution de la contrainte s'infléchit. Au-delà des pics de contrainte, on n'observe plus d'évolution de la coordinance sauf pour de légères fluctuations autour de 3.7 ; nous avons vu que, pendant cette phase, la déformation restait dilatante.

#### Evolution de la texture granulaire

Alors que la probabilité d'orientation des directions de contacts  $P(\theta)$  était homogène à l'état statique, l'application d'un chargement axial entraîne l'apparition de directions de contacts privilégiées dans la direction verticale de chargement bien sûr mais aussi dans les deux directions intermédiaires à 45 degrés comme on le voit sur la figure 6.8 ; lorsque le chargement est poursuivi, on n'observe pas de réelles modifications de la texture granulaire.

#### Evolution de la distribution des forces de contact

Nous avons calculé l'évolution des fonctions de distribution des intensités des forces  $\mathcal{P}(f/\langle f \rangle)$  présentées en figure 6.9, en fonction de la déformation axiale. En observant ces distributions, nous n'observons pas de changements importants au cours du chargement ; en revanche, nous observons une différence significative de l'allure de ces distributions avec la distribution de l'assemblage initial à l'état statique qui suit une loi gaussienne ; pour les distributions, pendant le chargement, nous remarquons que certains assemblages ont des forces dont les intensités sont très hétérogènes et obéissent à une loi qui ressemble à une loi exponentielle :

$$\mathcal{P}(f/\langle f \rangle) = \mathcal{P}(f/\langle f \rangle = 1) \exp[\beta(1 - f/\langle f \rangle)], \quad (6.6)$$

où a été déterminée une valeur  $\beta \approx 1.40$ , tandis que les faibles forces obéissent plutôt à une loi puissance :

$$\mathcal{P}(f/\langle f \rangle) = \mathcal{P}(f/\langle f \rangle = 1) (f/\langle f \rangle)^{-\alpha}, \quad (6.7)$$

où a été déterminée à la valeur  $\alpha \approx 0.15$ .

#### Interprétation

Contrairement à l'état statique initial, où la direction des forces de contact est homogène, dès que l'on applique le chargement, les directions de contacts se réorientent ; une direction de

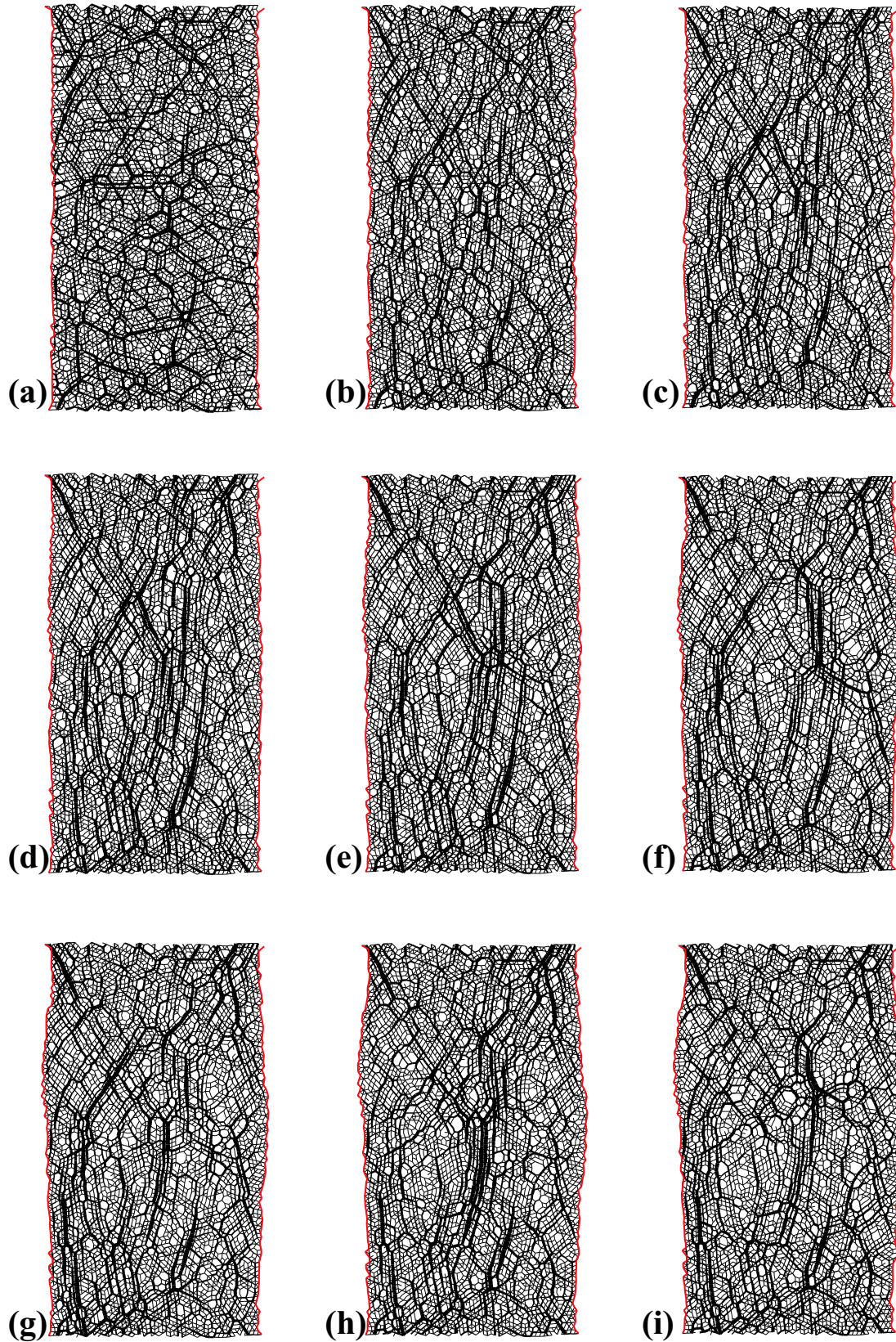


FIG. 6.6 – Evolution du réseau de forces normales de contacts  $f_n^{(c)}$  à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a)  $\approx 0\%$ , (b)  $0.5\%$ , (c)  $1.0\%$ , (d)  $1.5\%$ , (e)  $2.0\%$ , (f)  $2.5\%$ , (g)  $3.0\%$ , (h)  $3.5\%$ , (i)  $\approx 4.0\%$ , lors d'un test de compression biaxial pour une pression de confinement  $p_c = 8 \text{ MPa}$ ; la largeur du segment qui relie les centres des particules en contact est proportionnelle à l'intensité de la force.

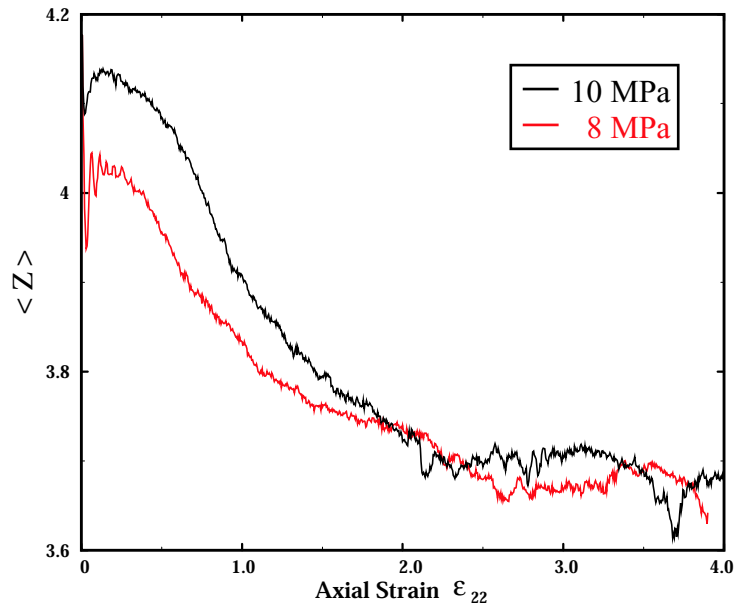


FIG. 6.7 – Evolution de la coordinnce moyenne  $\langle Z \rangle$  des échantillons granulaires en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour des tests de chargement biaxiaux réalisés à des pressions des confinement  $P_c = 8 \text{ MPa}$  et  $P_c = 10 \text{ MPa}$ .

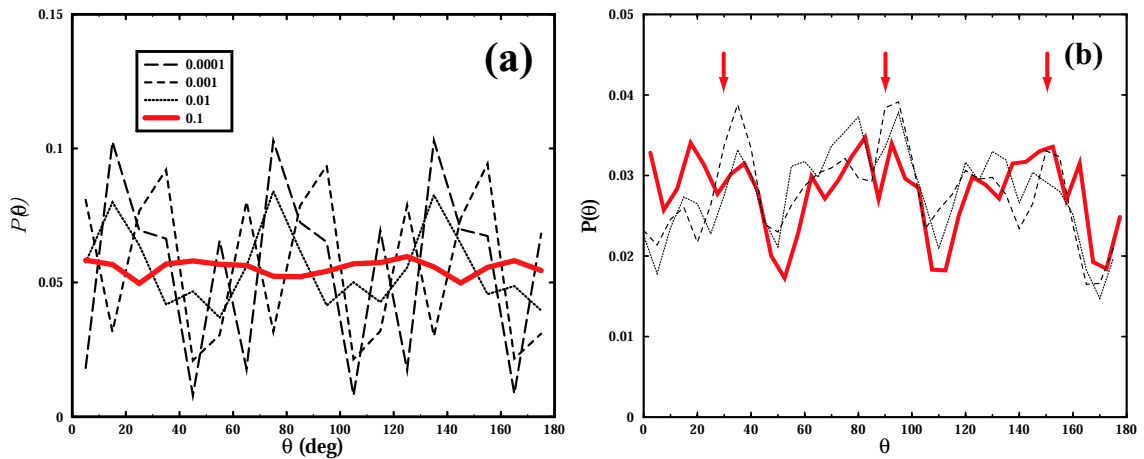


FIG. 6.8 – Evolution de la probabilité d'orientation des directions de contacts  $P(\theta)$  ( $\pi$ -périodique) au cours du chargement : (a) texture initiale à l'équilibre statique, (b) modification de la texture lors du chargement (1) aussitôt qu'on applique le chargement on voit apparaître trois directions privilégiées, dans la direction axiale de chargement et dans les deux directions à 45 degrés, (2) et (3) par la suite, la texture n'évolue pas de manière significative.

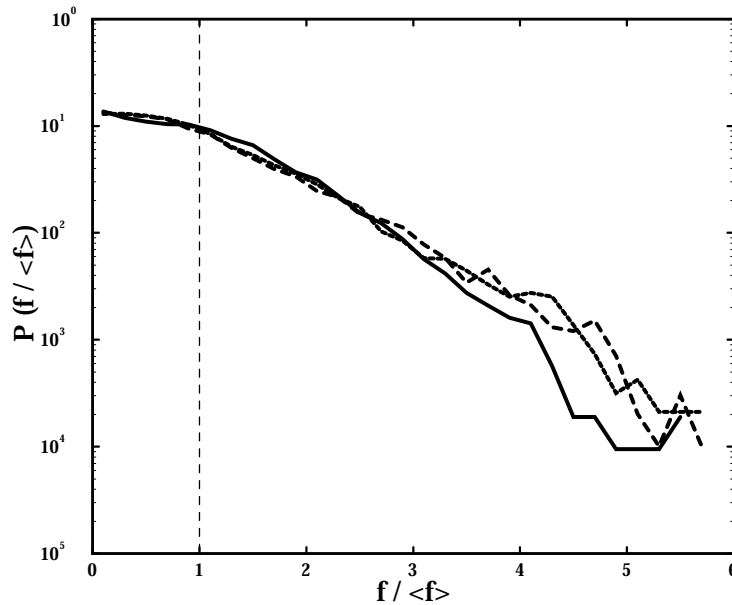


FIG. 6.9 – Evolution de la distribution des forces de contact  $\mathcal{P}(f/\langle f \rangle)$  dans un échantillon soumis à un test de chargement biaxial pour une pression de confinement de  $P_c = 8 \text{ MPa}$ .

contact privilégiée correspond à la direction de la contrainte principale  $\sigma_{22}$  et les deux autres directions sont globalement à 45 degrés de cette direction. Si l'on s'intéresse au réseau des forces (voir figure 6.6), on voit que la contrainte axiale n'est pas supportée de façon uniforme par toutes les particules, mais est plutôt transmise verticalement de façon hétérogène par une structure de chaînes de forces dont l'élongation correspond à la direction verticale ; on a donc des colonnes de particules qui concentrent les contraintes et supportent le chargement du système.

Ces phénomènes de structuration des réseaux de forces, pour supporter un chargement, ont été observés dans les matériaux granulaires réels et dans d'autres études numériques et sont une propriété commune à ces matériaux.

Il est probable que cette restructuration des réseaux de contacts joue un rôle important dans l'évolution des propriétés comme la chute de la coordinence moyenne ; si des directions de contacts sont privilégiées, on doit avoir création de contacts selon ces directions mais aussi ouverture selon d'autres directions puisque globalement  $\langle Z \rangle$  diminue pendant le chargement.

De façon intéressante, on observe que les chaînes de forces s'infléchissent en certains endroits du matériau lorsque la déformation devient plus importante, nous allons voir que cette évolution est intimement liée à la localisation de la déformation dans le matériau granulaire.

## 6.2.4 La localisation de la déformation

### Indicateurs de ruptures

**Evolution du champ de vitesse** Sur les figures 6.10 et 6.11 sont présentées les directions des vecteurs de vitesses instantanées des particules à différents stades de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour différentes pressions de confinement  $p_0 = 1 \text{ MPa}$  et  $p_0 = 10 \text{ MPa}$ .

Pour le cas où la pression de confinement est faible,  $p_0 = 1 \text{ MPa}$ , on constate que, après une première phase de déformation très courte ( $\approx 0.5\%$ ) où le champ de vitesse dans l'échantillon est relativement homogène, la localisation de la déformation apparaît au sein de deux bandes de faibles épaisseurs orientées perpendiculairement l'une par rapport à l'autre ; une des bandes



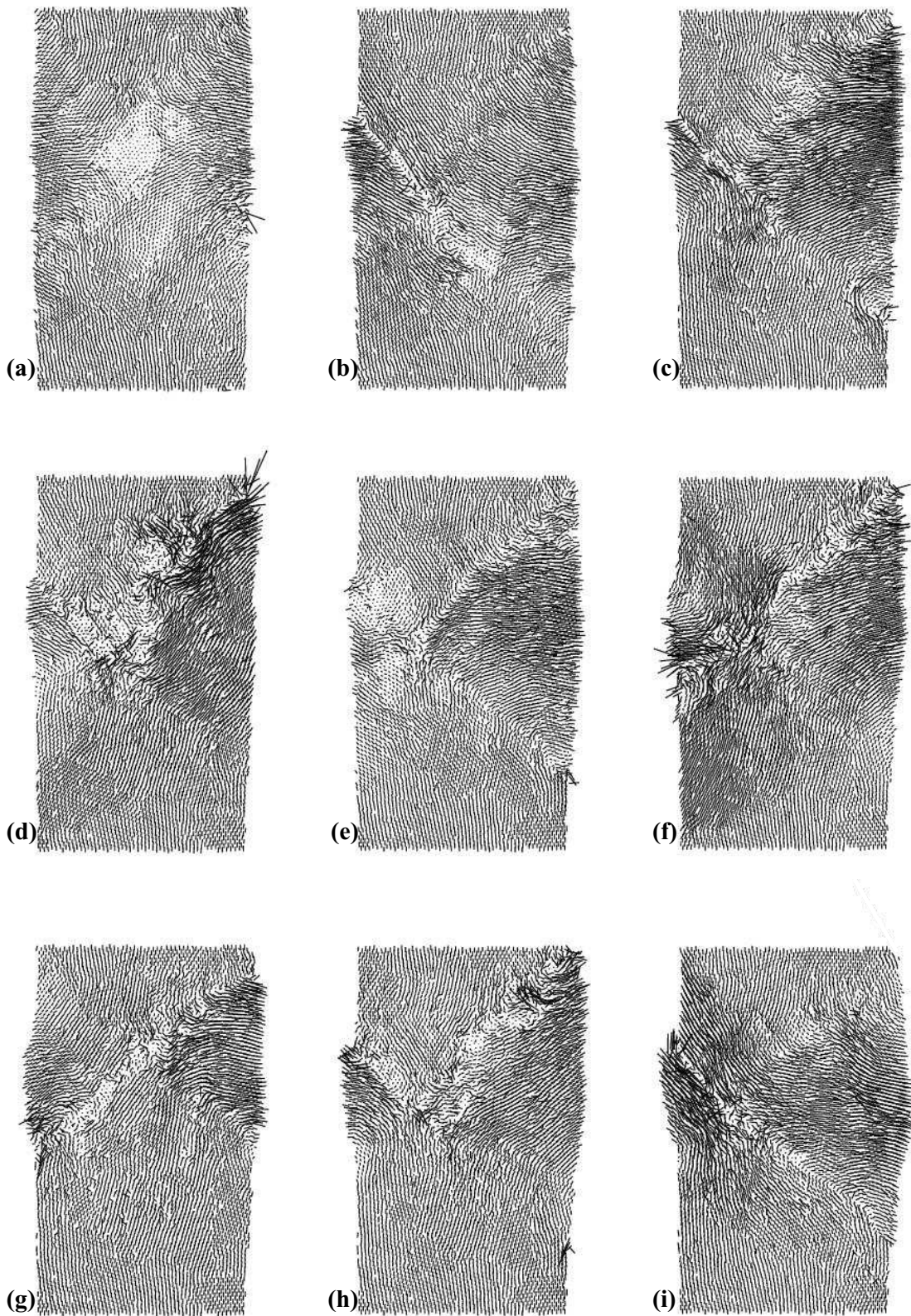


FIG. 6.10 – Vitesses translationnelles des grains à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a)  $\approx 0\%$ , (b) 0.5%, (c) 1.0%, (d) 1.5%, (e) 2.0%, (f) 2.5%, (g) 3.0%, (h) 3.5%, (i) 4.0%) pour un test de compression biaxial sous une pression de confinement de  $P_c = 1 \text{ MPa}$ ; le segment  $\vec{v}$  indique la direction du mouvement et sa longueur est proportionnelle à la vitesse.

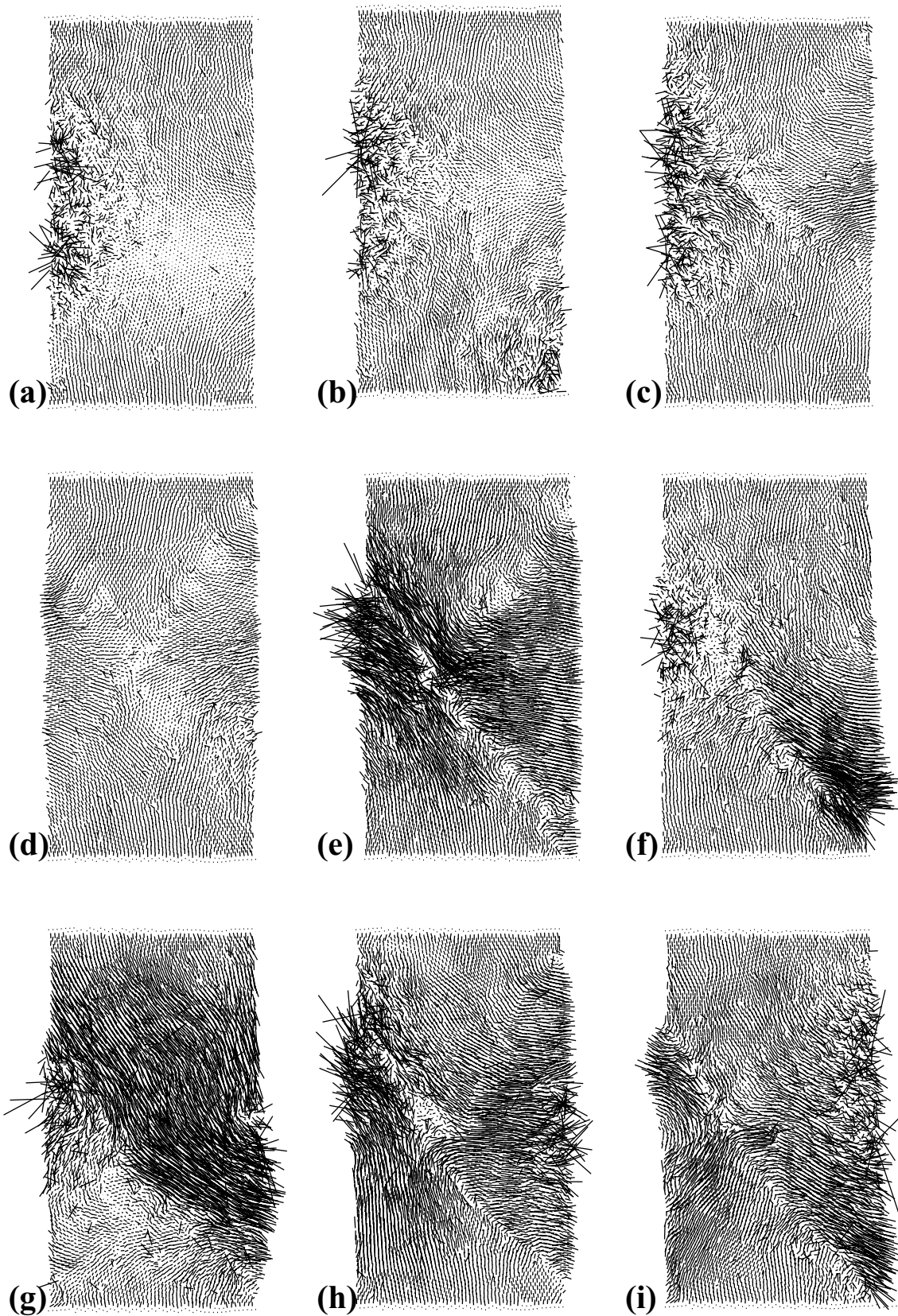


FIG. 6.11 – Vitesses translationnelles des grains à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a)  $\approx 0\%$ , (b)  $0.5\%$ , (c)  $1.0\%$ , (d)  $1.5\%$ , (e)  $2.0\%$ , (f)  $2.5\%$ , (g)  $3.0\%$ , (h)  $3.5\%$ , (i)  $\approx 4.0\%$  pour un test de compression biaxial sous une pression de confinement de  $P_c = 10 \text{ MPa}$ ; le segment donne la direction du mouvement et sa longueur est proportionnelle à la vitesse.

prend son origine dans le coin supérieur droit de l'échantillon et se termine de l'autre côté à gauche dans la partie intermédiaire; l'angle que fait cette bande avec l'horizontale est d'environ 45 degrés; une autre bande traverse l'échantillon dans sa largeur depuis la partie supérieure gauche vers la partie inférieure droite de l'échantillon; l'angle que fait cette seconde bande avec l'horizontale vaut également 45 degrés. On constate que suivant l'intensité de la déformation axiale, une bande apparaît plus tôt que l'autre; elles semblent donc *jouer* alternativement l'une après l'autre pour localiser la déformation.

Les grains présents dans la partie supérieure de l'échantillon se déplacent en diagonale vers le bas et ceux présents dans la partie inférieure se déplacent en diagonale vers le haut, et selon la bande mobilisée, la composante latérale de leurs déplacements est opposée de part et d'autre de cette frontière. C'est à l'extérieur de ces zones de faibles épaisseurs qu'il y a un mouvement relatif significatif des grains alors que dans la bande les mouvements semblent très faibles et un peu désordonnés en direction. Si l'on traçait un profil de vitesse qui traversait la bande, on observerait des gradients de vitesses faibles loin de la bande et des gradients élevés au plus proche de la bande. Si on repère en moyenne le nombre de grains qui ont une vitesse négligeable à travers cette bande, on peut dire que son épaisseur moyenne est de l'ordre de 3 – 5 tailles de grains selon les endroits, c'est-à-dire de 3% à 5% de la dimension verticale de l'échantillon.

Dans le cas où la pression de confinement est plus importante, pour  $p_0 = 10 \text{ MPa}$ , on constate également que, après une seconde phase de déformation de 0% à  $\approx 2.0\%$  où le champ de vitesse dans l'échantillon est relativement homogène, la localisation de la déformation apparaît cette fois-ci au sein d'une seule bande de faible épaisseur également orientée à  $\approx 50$  degrés de l'horizontale; elle prend son origine dans le coin inférieur droit et traverse l'échantillon dans sa largeur en diagonale. L'épaisseur de la bande est plus difficile à calculer dans ce cas; par endroit, elle a l'air de se réduire à *l'épaisseur d'un contact uniquement*, et en d'autre endroit, nous observons des champs de vitesses courbés dans la bande sur une épaisseur de quelques grains. Ce qui est par contre très net ce sont les fluctuations très importantes du champ de vitesses. Par instant, la mobilisation des grains de part et d'autre de la bande est faible et, à d'autre moment, on observe des pics d'activité; c'est ce que nous allons voir en étudiant la mobilisation des particules et des contacts au cours de la déformation.

Dans le modèle de rupture de Mohr Coulomb, les zones de rupture sont supposées être des plans de glissement orientés selon un angle qui minimise la force de cisaillement ce qui donne un angle d'à peu près 30 degrés par rapport à la verticale. Dans nos simulations nous observons des angles un peu plus forts de l'ordre de 40 – 45 degrés.

**Evolution de l'énergie cinétique** Nous traçons l'évolution de l'énergie cinétique moyenne translationnelle des grains  $\langle E_c^T \rangle$  calculée comme :

$$\langle E_c^T \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} m^k v^k \cdot v^k, \quad (6.8)$$

où  $m^k$  et  $v^k$  sont respectivement la masse et la vitesse de la particule  $k$ .

Sur la figure 6.12, on observe tout d'abord initialement une très forte augmentation de l'énergie cinétique des particules; ceci est dû à la perturbation de l'assemblage granulaire lors de l'application des conditions de membranes flexibles; on peut en effet vérifier qu'il existe un état transitoire (même si le système a été préparé à la pression  $p_0$  correspondante à la pression de confinement appliquée) au cours duquel, les particules sur les bords de la membrane s'ajustent aux nouvelles conditions de contraintes locales. Très rapidement, l'énergie cinétique décroît pour se stabiliser à une valeur minimale aux environs de 0.5% de déformation axiale; ensuite, au cours



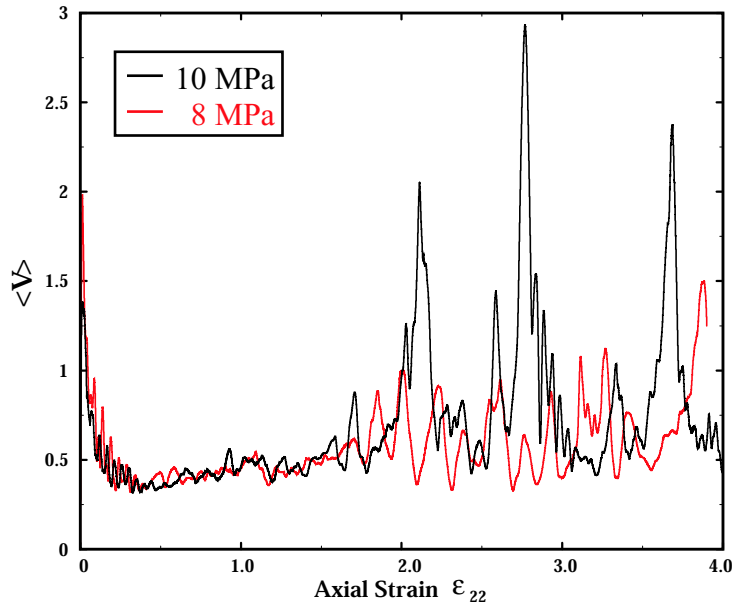


FIG. 6.12 – Evolution de l'énergie cinétique translationnelle moyenne  $\langle E_c^T \rangle$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour un test de compression biaxial sous des pressions de confinement de  $P_c = 8 \text{ MPa}$  et  $P_c = 10 \text{ MPa}$ .

de la montée en charge avant d'atteindre le pic de contrainte, on observe une succession de pics d'énergie d'amplitudes croissantes, qui sont la signature de réarrangements rapides de l'empilement par rapport à ce que serait une augmentation plus régulière. Nous mettrons en relation ces réarrangements de particules avec l'intermittence de la force de frottement au cours de cette phase de chargement avant la *rupture*.

Ces mouvements microscopiques à l'échelle des grains pourraient être interprétés comme des événements de mouvements majeurs macroscopiques. Ici, les réarrangements mettant en jeu une énergie cinétique croissante peuvent être envisagés comme des précurseurs de la formation de la localisation macroscopique de la déformation.

Lorsque le pic de contrainte est atteint, et que la localisation de la déformation se produit, on observe une brusque augmentation de l'énergie cinétique. On y distingue la phase de déclenchement et l'accélération; Néanmoins, l'énergie cinétique ne reste pas très longtemps très importante, rapidement, on observe une phase de décélération et l'énergie cinétique revient à un niveau un peu plus élevé duquel elle était partie et continue à fluctuer pendant un certain temps alors que le chargement est poursuivi et, à un moment, on observe alors un nouveau pic d'énergie cinétique puis un troisième. Cette mobilisation intermittente des particules est à mettre en relation avec la courbe de contrainte déformation de la figure 6.3 où après chaque événement de rupture majeur (chute de la contrainte déviatorique), on observe une nouvelle montée en contrainte plus faible qui sera à son tour suivie d'une rupture. Cette succession de phénomène de rupture majeur semble avoir une certaine périodicité au cours du chargement.

## Micro-mécanismes de formation de la localisation

### Les rotations

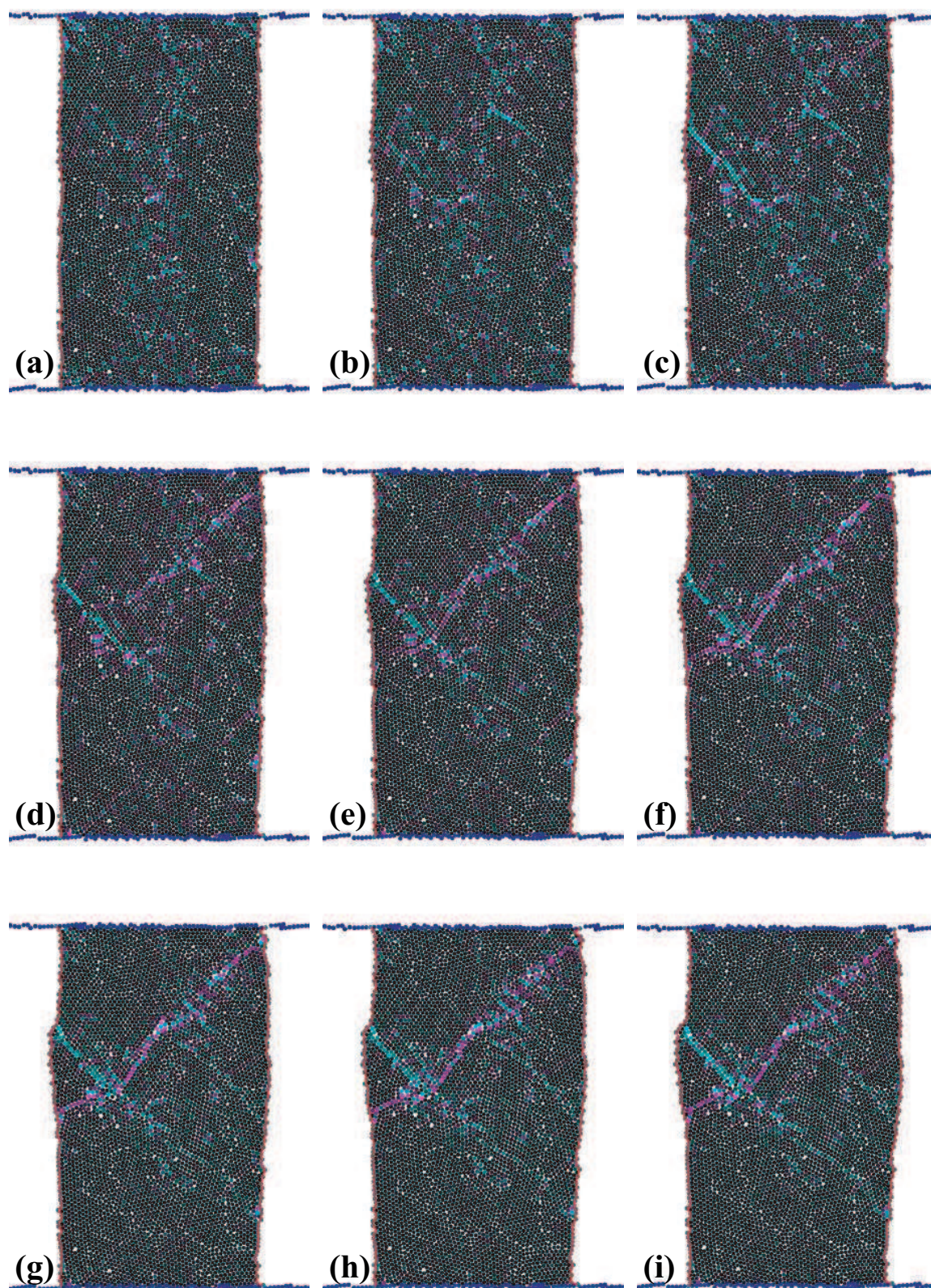


FIG. 6.13 – Vitesses angulaires des grains à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a)  $\approx 0\%$ , (b)  $0.5\%$ , (c)  $1.0\%$ , (d)  $1.5\%$ , (e)  $2.0\%$ , (f)  $2.5\%$ , (g)  $3.0\%$ , (h)  $3.5\%$ , (i)  $\approx 4.0\%$ ) pour un test de compression biaxial sous une pression de confinement de  $P_c = 1 \text{ MPa}$ ; l'échelle de couleur correspond à la vitesse angulaire : (en cyan) pour le sens horaire, (en magenta) pour le sens anti-horaire.



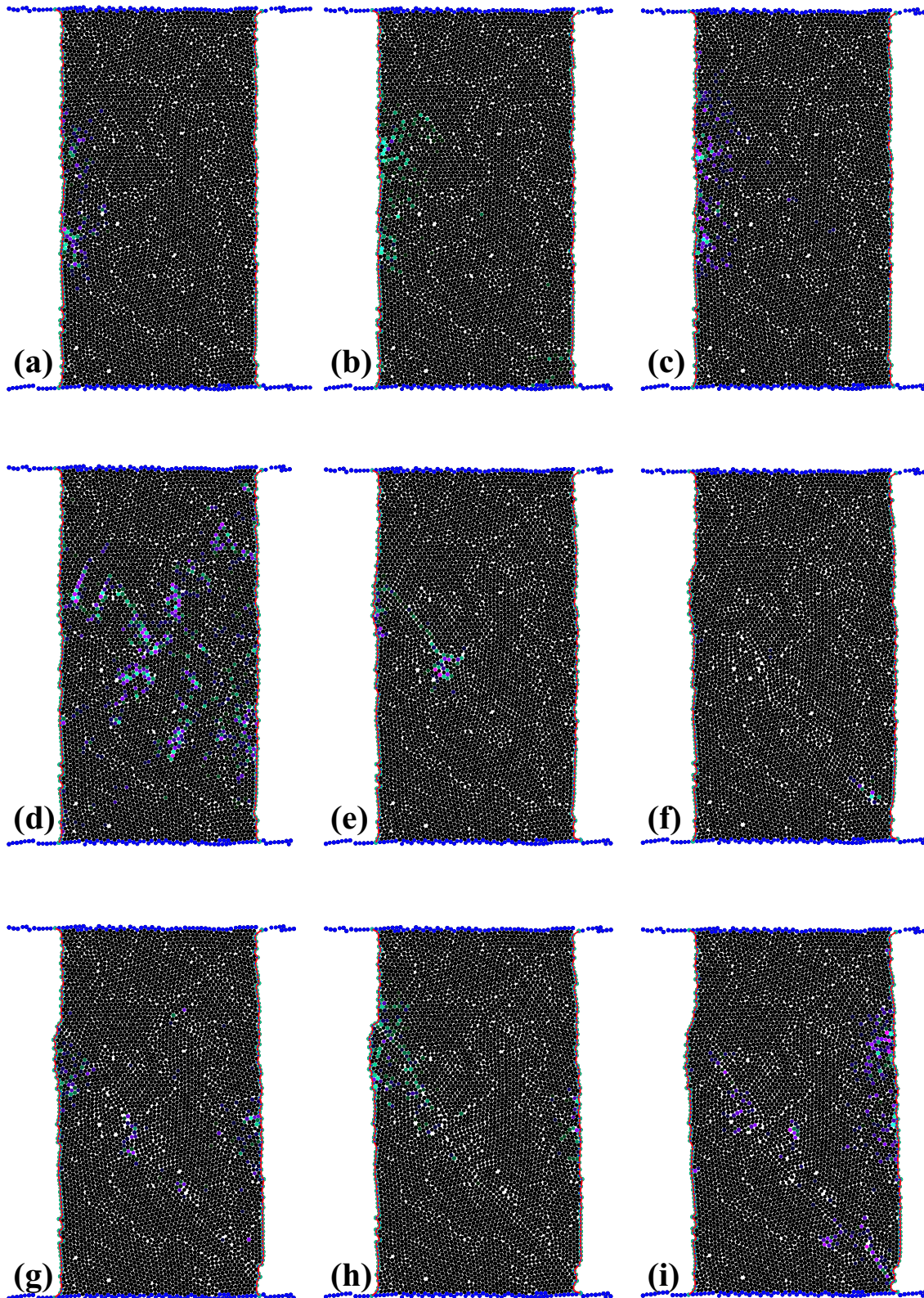


FIG. 6.14 – Vitesses angulaires des grains à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a)  $\approx 0\%$ , (b) 0.5%, (c) 1.0%, (d) 1.5%, (e) 2.0%, (f) 2.5%, (g) 3.0%, (h) 3.5%, (i)  $\approx 4.0\%$ ) pour un test de compression biaxial sous une pression de confinement de  $P_c = 10 \text{ MPa}$ ; l'échelle de couleur correspond à la vitesse angulaire : (en cyan) pour le sens horaire, (en magenta) pour le sens anti-horaire.

**visualisation** Sur les figures ?? et 6.14 sont présentées les vitesses angulaires instantanées des particules à différents stades de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour différentes pressions de confinement  $p_0 = 1 \text{ MPa}$  et  $p_0 = 10 \text{ MPa}$ .

Il est connu que les rotations des particules jouent un rôle important dans le développement des bandes de cisaillement [114] [146].

Pour les deux pressions de confinement considérées, on constate qu'après une première phase de déformation où les rotations des particules dans l'échantillon sont relativement faibles (les particules de couleurs représentent les vitesses angulaires les plus importantes), c'est au niveau des bandes de localisation de la déformation que l'on avait observé sur les champs de vitesses instantanées sur les figures 6.10 et 6.11, que les rotations des particules se concentrent. Les particules ayant les taux de rotations les plus élevés sont donc regroupées dans les bandes de faible épaisseur où la déformation cisailante est accumulée.

Les particules de couleur turquoise ont une vitesse angulaire dans le sens horaire alors que celles de couleur magenta ont une vitesse angulaire dans le sens anti-horaire. On constate que, globalement, les particules ayant une rotation horaire sont plutôt concentrées dans les bandes de cisaillement qui ont un *pendage* vers la droite alors que les particules ayant une rotation anti-horaire se retrouvent plus majoritairement dans les bandes à *pendage* vers la gauche. Néanmoins, on trouve les deux types de rotations dans chacune des bandes ; en effet, lorsqu'une rotation a lieu au niveau d'un point de contact entre deux particules, la rotation horaire d'une particule entraînera une composante de rotations anti-horaire sur l'autre particule et inversement. On comprend que tous les effets qui pourraient gêner ce phénomène de roulement entraîneraient alors la concentration des types de rotations dans les bandes dont l'état de cisaillement leur correspond. Nous pouvons penser que, à la fois la pression du système ainsi que les propriétés de contacts, sont susceptibles d'influencer les caractéristiques des rotations dans les bandes de localisation.

Le fait d'avoir une concentration de rotations complémentaires peut être très important du point de vue mécanique car dans ce cas, il est possible d'accommoder en grande partie la déformation par ces rotations complémentaires de grains ; ces configurations entraînent naturellement une diminution importante de la contrainte cisailante puisque ces mouvements n'offrent pas de résistance au cisaillement.

**Energie Rotationnelle** Nous traçons l'évolution de l'énergie cinétique moyenne rotationnelle des grains  $\langle E_c^R \rangle$  calculée comme :

$$\langle E_c^R \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} I_k w_k^2, \quad (6.9)$$

où  $I^k$  et  $w^k$  sont respectivement le moment d'inertie et la vitesse de rotation de la particule  $k$ .

Sur la figure 6.15, on observe comme pour l'énergie cinétique translationnelle moyenne initialement une forte augmentation de l'énergie cinétique rotationnelle des particules ; ceci est également dû à la perturbation locale de l'assemblage granulaire lors de l'application des conditions de membranes flexibles et les particules s'ajustent aux nouvelles conditions locales et rapidement, l'énergie cinétique décroît à son tour pour se stabiliser à une valeur minimale aux environs de 0.5% de déformation axiale. Une fois la phase d'ajustement transitoire passée, on peut constater que durant la montée en charge avant d'atteindre le pic de contrainte, on observe comme pour l'énergie cinétique translationnelle une succession de pics d'énergie d'amplitudes croissantes. Les mouvements de rotations marquent donc aussi les réarrangements rapides des grains et ils

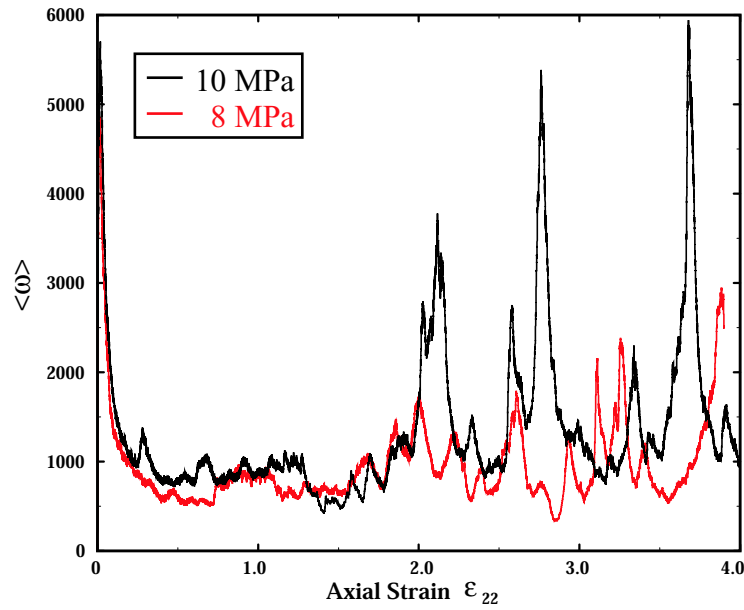


FIG. 6.15 – Evolution de l'énergie cinétique rotationnelle moyenne  $\langle E_c^R \rangle$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour des tests de compression biaxiaux sous des pressions de confinement de  $P_c = 8 \text{ MPa}$  et  $P_c = 10 \text{ MPa}$ .

peuvent également être interprétés comme des précurseurs événements de mouvements majeurs macroscopiques mettant en jeu également les rotations comme nous l'avons vu.

L'énergie rotationnelle des particules est également la signature des événements de rupture majeurs dans l'échantillon ; les pics d'énergie rotationnelle comme les pics d'énergie translationnelle correspondent exactement aux pics de contrainte. On observe donc la même périodicité des événements de rupture sur l'énergie cinétique rotationnelle.

**Evolution des rotations avec la pression** Nous avons vu dans la figure 6.10, que, à faibles pressions, on pouvait rencontrer des bandes de cisaillement conjuguées qui étaient actives tour à tour par intermittence au cours de la déformation ; le mécanisme qui permet à ces deux bandes de coexister alternativement trouve son origine dans les processus de rotations complémentaires que l'on vient d'évoquer. Sur la figure 6.16(a), on constate que, si on a bien une

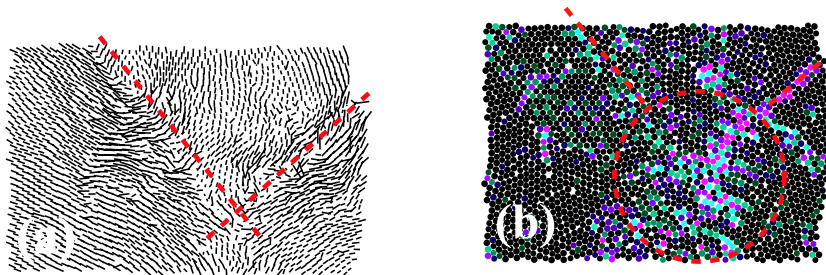


FIG. 6.16 – Rotations complémentaires aux faibles pressions (a) dans la zone d'intersection des bandes de cisaillement conjuguées (b).

concentration de rotations horaires dans la bande gauche supérieure et une concentration de rotations anti-horaires dans la bande droite supérieure, dans la région d'intersection, on trouve en quantité comparable les deux types de rotations et de plus les amplitudes de ces mouvements de rotations  $y$  sont un peu plus importants. Nous pensons que ce sont ces zones qui permettent d'accommoder le jeu des deux bandes de cisaillement.

### Le frottement inter-granulaire

**visualisation** Sur la figure 6.17 sont présentées les forces transversales de friction aux contacts des particules à différents stades de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour la pression de confinement  $p_0 = 10 \text{ MPa}$ .

Les interactions de frottement entre les particules sont dictées par une loi de frottement de Coulomb liant le déplacement relatif des particules en contact à l'intensité de la force de frottement  $f_t$  dans une forme incrémentale. Cette intensité est bornée par le seuil de Coulomb, qui dépend de la force normale  $f_n$  au contact et d'un coefficient de frottement intergranulaire  $\mu_f$ . La relation  $ft[-\mu f_n, \mu f_n]$  est constamment vérifiée et impose à la force  $\vec{f} = \vec{f}_n + \vec{f}_t$  de se trouver dans le cône de Coulomb.

Nous pouvons donc distinguer les contacts selon qu'ils transmettent une force strictement à l'intérieur du cône de Coulomb, ou dessus exactement. Dans ce dernier cas, nous avons  $|f_t| = \mu f_n$  et le seuil de frottement est atteint; le contact ne peut supporter d'incrément de charge déviatorique sans qu'un glissement entre les particules n'en résulte. Ces contacts sont sources d'instabilités locales.

Pour les deux pressions de confinement considérées, on observe que pour la première phase de chargement avant le pic de contrainte, les contacts qui ont atteint le seuil de Coulomb sont globalement distribués uniformément dans la surface de l'échantillon; ce n'est, qu'une fois que le pic de contrainte a été atteint, que l'on observe une concentration de ces contacts dans les bandes de localisation de la déformation; on a vu que c'est dans ces zones que l'on observait les gradients de déformations les plus importants, et comme la force de frottement est proportionnelle à la vitesse relative des particules en contact, il paraît naturel qu'ils atteignent avant les autres leur seuil de glissement. On a également vu que les taux de rotations des particules les plus importants se trouvaient également dans ces bandes et, comme on l'a observé, une bande de cisaillement tend à concentrer des rotations compatibles avec son état (sens) de cisaillement; les particules en contact dans ces bandes ont donc souvent des sens de rotations identiques ce qui est source de friction et de contrainte cisailante contrairement à des rotations complémentaires; ceci tend également à favoriser le glissement des contacts au seuil de Coulomb en augmentant l'intensité des forces de frottement. Comme nous allons le voir l'évolution de la concentration des contacts ayant atteint le seuil de glissement est bien corrélée aux évolutions des énergies cinétiques translationnelles et rotationnelles.

**Evolution des contacts critiques** Pour caractériser la mobilisation du frottement dans un assemblage granulaire de surface  $S$  où  $N$  particules forment  $n$  contacts entre elles, nous calculons la proportion de contacts ayant atteint leur seuil de glissement  $n_c$  dans  $S$ , c'est-à-dire le rapport de leur nombre sur le nombre total de contacts  $n$  :

$$v = \frac{n_c}{n}, \quad (6.10)$$

Le nombre de contacts dans un assemblage dense étant proportionnel à la surface de l'assemblage, pour des surfaces suffisamment grandes,  $v$  peut être envisagé comme une mesure de



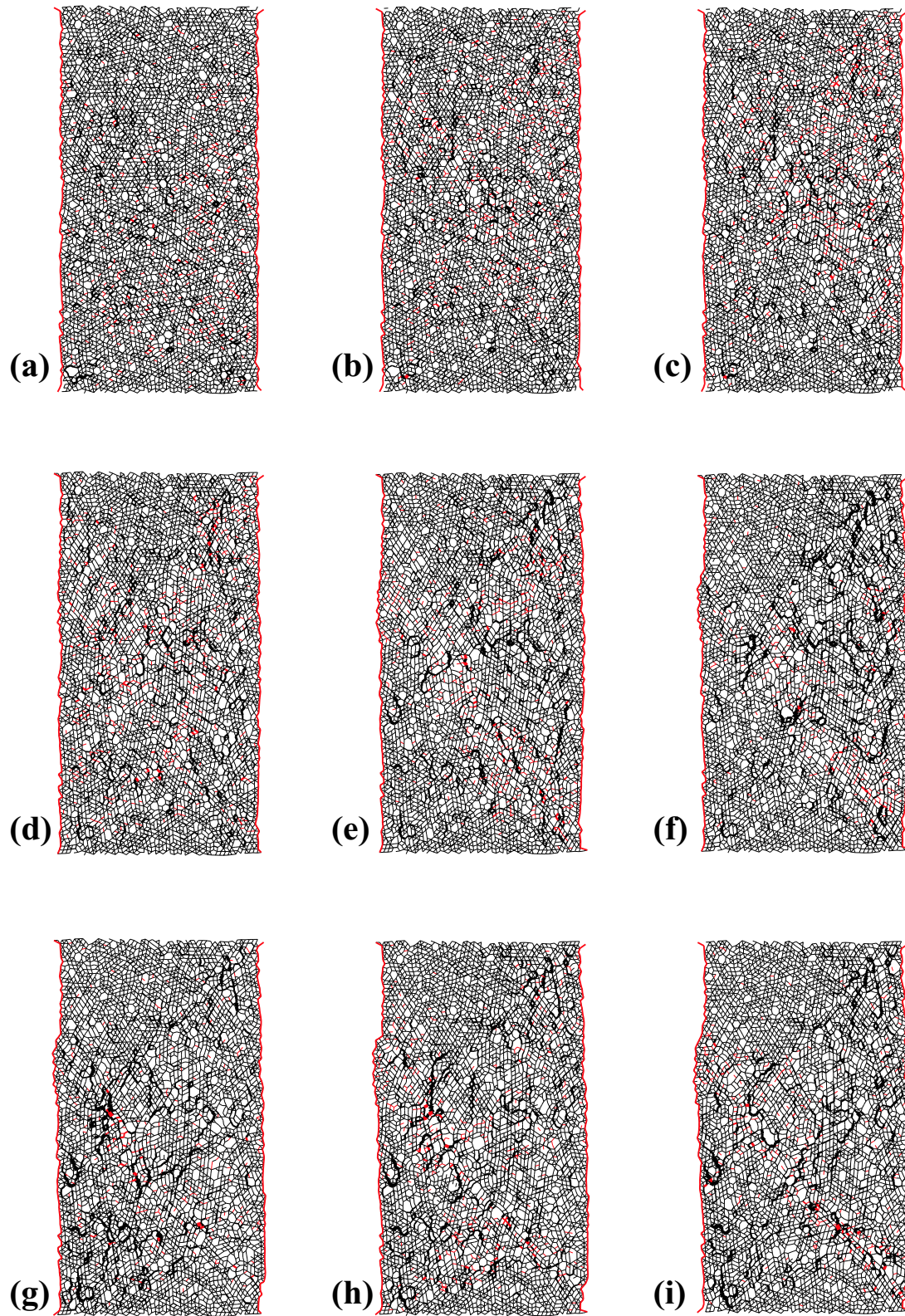


FIG. 6.17 – Forces transversales de friction et contacts critiques à différents stades de déformation axiale  $\epsilon_{22} =$  (a) 0%, (b) 0.5%, (c) 1.0%, (d) 1.5%, (e) 2.0%, (f) 2.5%, (g) 3.0%, (h) 3.5%, (i) 4.0%) pour un test de compression biaxial sous une pression de confinement de  $P_c = 10 \text{ MPa}$ ; les contacts dont la force frottement est sous le seuil de Coulomb sont représentés en noir, tandis que les contacts critiques qui sont au niveau du seuil de Coulomb en état de glissement, sont représentés en rouge.

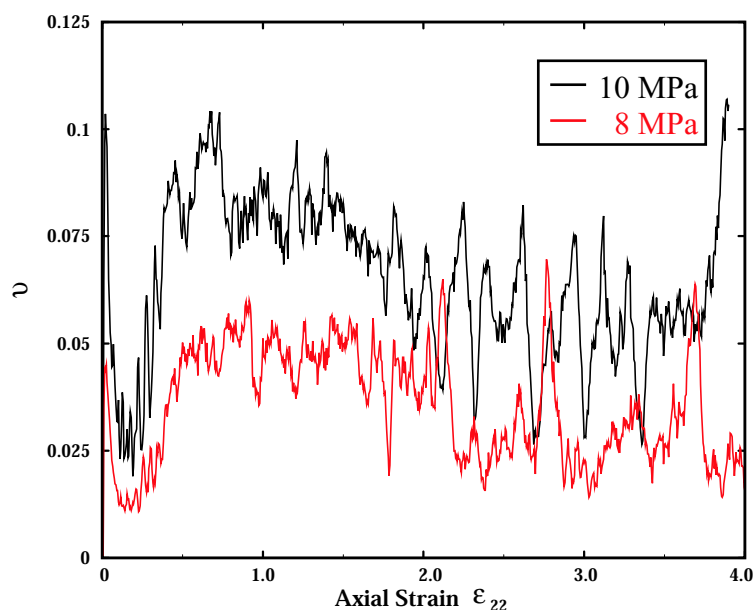


FIG. 6.18 – Evolution de la densité de contacts critiques  $v$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$  pour des tests de compression biaxiaux sous des pressions de confinement de  $p_c = 8MPa$  et  $p_c = 10MPa$ .

la densité de contacts critiques. Elle va dépendre à la fois de la surface  $S$  sur laquelle elle est évaluée et de l'état de l'assemblage par rapport à la rupture macroscopique, c'est-à-dire de son niveau de déformation.

Nous calculons la valeur de  $v$  pour la surface entière de l'échantillon et sur la figure 6.18 on présente son évolution en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{22}$ . Dès l'initiation des simulations, comme pour les énergies cinétiques, la densité des contacts augmente instantanément puis diminue aussitôt au niveau, de l'ordre du pour-cent lorsque le système s'est ajusté aux nouvelles conditions aux frontières. Contrairement aux courbes d'évolution des énergies cinétiques, où l'on observait une augmentation progressive jusqu'au pic de contrainte, dans la mesure des fluctuations instantanées d'amplitude faible par rapport au pic, ici on observe que la mobilisation du frottement est précoce et augmente bien avant la localisation; la densité de contacts critiques atteint 10% rapidement après le début du chargement. Ensuite on observe ainsi une intermittence autour de cette valeur;  $v$  varie rapidement sur  $\approx 2.5\%$ ; ce comportement traduit la succession de phase de chargement au cours desquels un certain nombre de contacts parviennent au seuil de frottement, et des phases de relaxation, qui voient disparaître en partie ces contacts critiques, qui peuvent à nouveau lentement être rechargés. Cette intermittence suppose localement la réorganisation de l'assemblage de grains et c'est ce que l'on avait conclu des évolutions des énergies cinétiques des particules à l'approche du pic de contrainte.

Au niveau du pic de contrainte et de la localisation conséquente, on va observer de très fortes fluctuations dans la densité des contacts critiques;  $v$  varie très rapidement entre  $\approx 2.5\%$  et  $\approx 7.5\%$ , ce comportement traduit les phases de rupture majeure correspondant à la localisation de la déformation; on observe plus exactement la même intermittence qui était caractéristique de réarrangements locaux; ici ce sont plutôt des couches entières de particules (dans la direction des bandes de cisaillement) qui frottent et glissent les unes sur les autres de part et d'autre de la bande de cisaillement; on observe donc plutôt des pics de grandes amplitudes pendant un court intervalle de déformation; ensuite on observe à nouveau quelques phénomènes d'intermittence



puis une nouvelle rupture majeure, lorsque la bande rejoue (ou une autre joue).

### Corrélations des processus micro-mécaniques avec la déformation

C'est maintenant l'occasion de faire un rapide récapitulatif des résultats que nous avons obtenus à partir des simulations numériques sur les mécanismes mis en jeu lors de la localisation de la déformation et de montrer leur corrélation ; Au cours de l'essai de chargement biaxial, des échantillons granulaires, nous avons montré que le pic de contrainte  $\sigma_{22}$  correspond au processus de localisation de la déformation ; nous avons pu mettre en évidence cette rupture en représentant les champs de vitesses (et la trace, non présentée ici) des particules ; Comme on le voit sur la figure 6.19(a), le champ de vitesse n'est pas homogène dans l'échantillon ; de part et d'autre d'une frontière diagonale orientée à  $\approx 50$  degrés, des blocs granulaires ont des champs de vitesses propres ; c'est la rupture macroscopique de l'échantillon par cisaillement le long d'une bande de faible épaisseur ; Nous avons montré que les mécanismes de frottement aux contacts et les mouvements de rotations étaient importants dans le processus de localisation de la déformation et la région où les taux de rotations sont les plus importants (figure 6.19(c)) et où on trouve les contacts au seuil de Coulomb (figure 6.19(b)), correspond à la zone de frontière.

On remarquera sur la figure 6.20, que l'on peut trouver localement des régions où les particules ont des taux de rotations élevés, différentes de la zone de localisation de la déformation ; néanmoins, on ne rencontre pas dans ces zones de contacts critiques ; le seul endroit où se concentrent à la fois taux de rotations élevés et contacts au seuil de frottement est la bande de cisaillement.

### Les mécanismes associés à la dilatance

Sur la figure 6.21, on a représenté l'échantillon sous la forme des particules qui le constituent avant l'application du chargement (a), puis après le processus de localisation. On observe que de larges vides ont été créés dans l'échantillon après la rupture, et ils sont concentrés dans les fines bandes de cisaillement que l'on avait observées précédemment.

On avait vu au tout début de cette étude, que la première phase de déformation a un caractère compactant, à l'approche du pic de contrainte et après la rupture, la déformation surfacique est très nettement dilatante ; on avait également vu que l'augmentation surfacique de l'échantillon correspondait exactement à l'augmentation de la porosité de l'échantillon granulaire, c'est-à-dire le volume des vides (voir figure 6.5) ; ce sont ces larges vides que nous observons sur les figures qui sont à l'origine de l'augmentation de la porosité ; on a donc une distribution de la porosité hétérogène dans l'échantillon mais également au sein de la bande de cisaillement ; ce sont en partie les larges vides locaux qui sont responsables de la dilatance du phénomène de dilatance. Mais il y a également une autre explication possible qui ferait intervenir les réarrangements locaux des grains pour satisfaire un mode de rotation complémentaire, mode qui minimise la résistance au cisaillement.

**L'inflexion des chaînes de forces** Dans la phase de montée en charge jusqu'à la rupture, nous avons vu que l'échantillon passait tout d'abord par un mode de déformation compactant puis par un mode de déformation dilatant (figure 6.5) ; de plus, pendant cette phase, les particules s'organisent selon des colonnes orientées verticalement qui supportent en grande partie la charge appliquée comme cela est montré par l'observation des chaînes de forces correspondantes (figure 6.6) ; il y a donc création et renforcement des contacts dans la direction verticale et de façon plus importante perte de contacts dans la direction horizontale entraînant globalement une chute de la coordinence moyenne (figure 6.7) à l'approche du pic ; or, avant d'atteindre le pic,

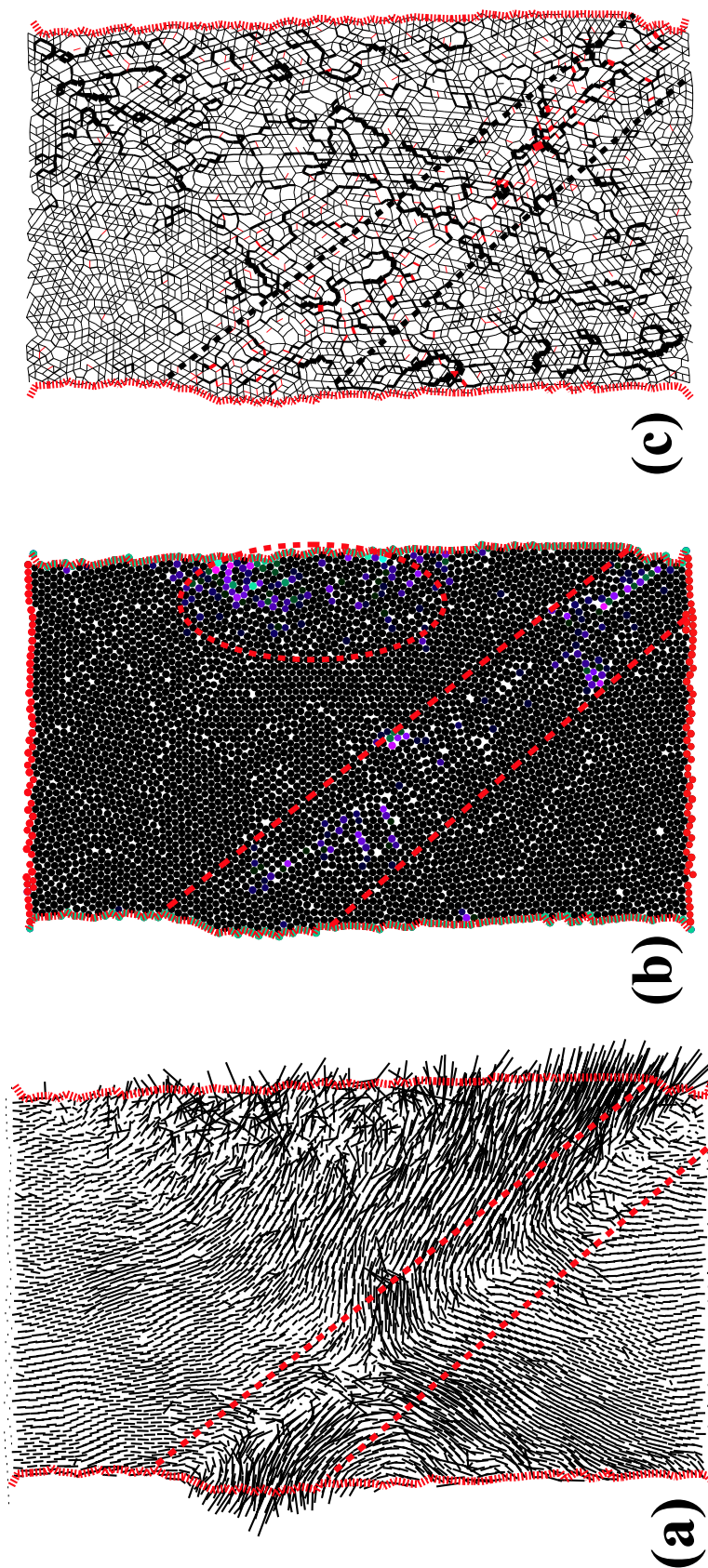


FIG. 6.19 – Rotations (b) et glissements (c) comme mécanismes d'accommodation de la déformation dans les bandes de cisaillement (a), ici pour une pression de  $P_c = 10 \text{ MPa}$ .

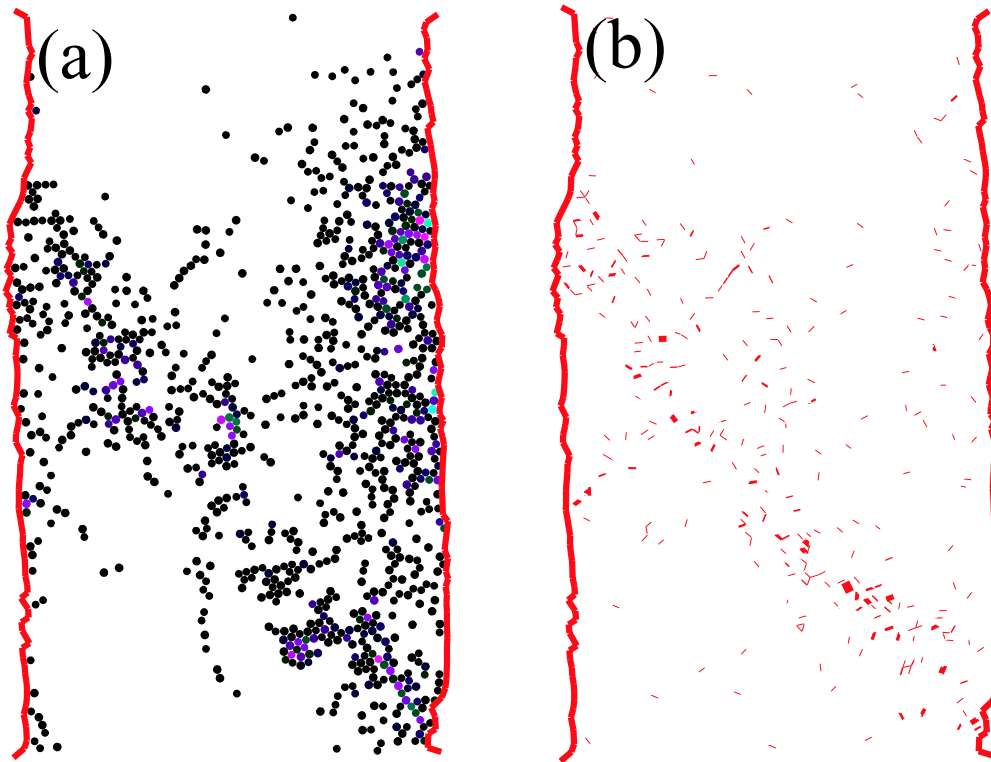


FIG. 6.20 – Taux de rotations les plus importants (a) et glissements aux contacts (b) dans une bande de cisaillement, ici pour une pression de confinement de  $P_c = 10 \text{ MPa}$ .

l'échantillon est déjà dilatant ; on a donc un *flambage* des chaînes de particules entraînant la création de porosité allongée dans la direction verticale (ellipse allongée). C'est le micro-mécanisme de dilatance avant la rupture (figures 6.22 et 6.23).

Lorsque la rupture se produit, ces structures sont déformées et cisillées au sein de la bande ; ce phénomène de kink des structures a encore tendance à augmenter le volume de vide entre les colonnes de particules ainsi cisillées.

**Les modes de rotations complémentaires** On a également montré dans cette étude que les phénomènes de rotations étaient importants dans les bandes de cisaillement ; les particules subissent un mouvement de rotation dû au cisaillement entre la couche supérieure et la couche inférieure compatible avec le sens de cisaillement ; les particules en contacts ont alors une rotation frustrée l'une par rapport à l'autre ; dans ce cas il y a une forte résistance au cisaillement. Mais nous avons aussi vu qu'en certains endroits, on peut trouver des groupes de particules ayant des rotations complémentaires (rotation horaire et anti-horaire deux à deux). Et, dans ce cas, la résistance au cisaillement devient minimale. Pour qu'une telle configuration de rotations soit possible il faut au plus 4 contacts par grains [4], en effet au-delà, plus localement l'arrangement est dense, plus le nombre de contacts augmente entre les particules et plus les configurations de rotations frustrées deviennent probables ; par exemple dans un arrangement Hexagonal Compact, chaque grain a six voisins et donc les rotations sont complètement frustrées. Avec seulement 4 voisins, la compacité locale est plus faible et les probabilités de rotations frustrées sont moins importantes. La compacité de ces deux états est  $\pi/4$  pour un arrangement cubique ( $Z=4$ ) et  $\pi/2\sqrt{3} \approx 0.90$  pour un assemblage Hexagonal Compact ( $Z=6$ ). Par conséquent, si on a des

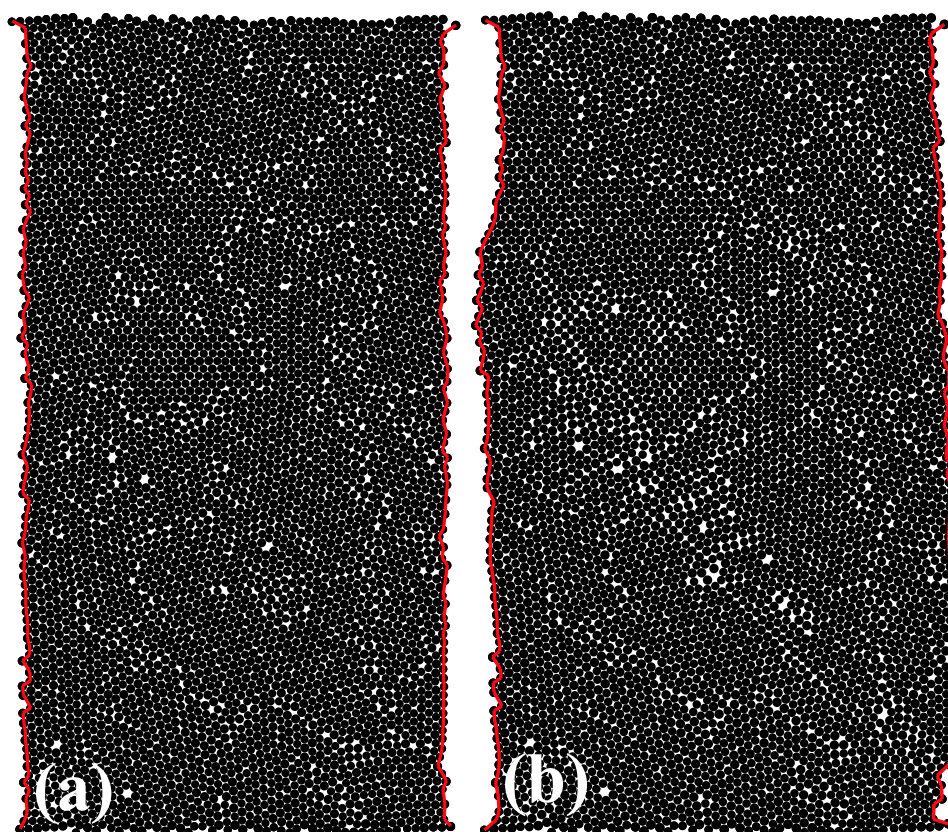


FIG. 6.21 – Distributions des vides pendant la déformation (a) avant le pic de contrainte, pendant la phase de dilatance (b) après le pic de contrainte; dans (a) et (b) on observe des zones où la surface de vide est plus importante que dans le reste de l'échantillon; dans (b) ces zones de vides s'organisent selon la direction de la bande de cisaillement.

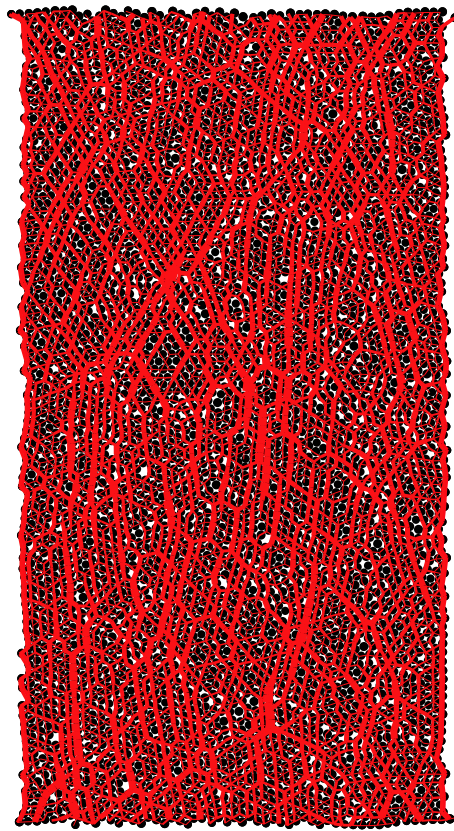


FIG. 6.22 – Modèle de dilatance pour les milieux granulaires : ouverture de porosité par *flambage* des chaînes de particules avant la localisation de la déformation.



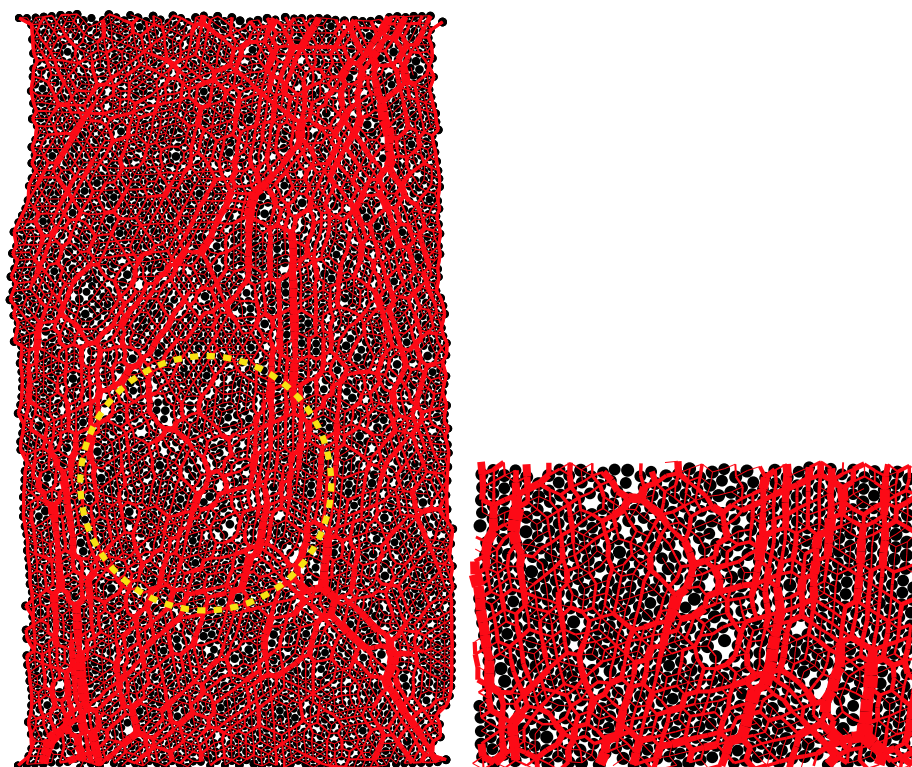


FIG. 6.23 – Modèle de dilatance pour les milieux granulaires : ouverture de porosité par *inflexion* des chaînes de particules dans la bande de cisaillement.

réorganisations locales des particules dans la bande de cisaillement pour satisfaire un état de rotations complémentaire qui diminue la résistance au cisaillement, alors la compacité locale diminue en comparaison à d'autres régions (à l'extérieur des bandes) et donc la porosité locale augmente ; par conséquent, ceci est un autre mécanisme de dilatance.

### 6.2.5 Effets de la pression de confinement

Avant de conclure cette étude, nous présentons les courbes de contrainte-déformation pour l'ensemble des simulations ; chaque simulation correspond à une pression de confinement différente, allant de très faibles pressions  $p_c = 100 \text{ KPa}$ . à des pressions beaucoup plus fortes  $p_c = 80 \text{ MPa}$ .

Comme nous l'avons déjà précisé, les conditions initiales de pression dans les échantillons n'étaient pas les meilleures possibles étant donné que nous avons utilisé le même échantillon préparé à la pression  $p_0 = 10 \text{ MPa}$ , pour l'ensemble des simulations. Le résultat, est un ajustement des conditions de pression pendant une phase transitoire (ce sont les oscillations initiales sur les valeurs de contrainte) qui est plus courte aux faibles pressions, néanmoins le pic de rupture y est atteint plus tôt ; ce réajustement initial ne semble pas être problématique, néanmoins à l'avenir, nous préparerons un échantillon pour chaque pression de confinement étudié.

On constate que plus la pression de confinement devient élevée, plus le pic de contrainte est atteint tard au cours de la déformation et plus le seuil de rupture est élevé ; ceci est totalement cohérent avec les résultats obtenus par des tests biaxiaux sur des échantillons granulaires réels. Enfin, pour les pressions de confinement les plus élevées, la déformation imposée à l'échantillon n'a pas été assez importante pour atteindre la rupture.

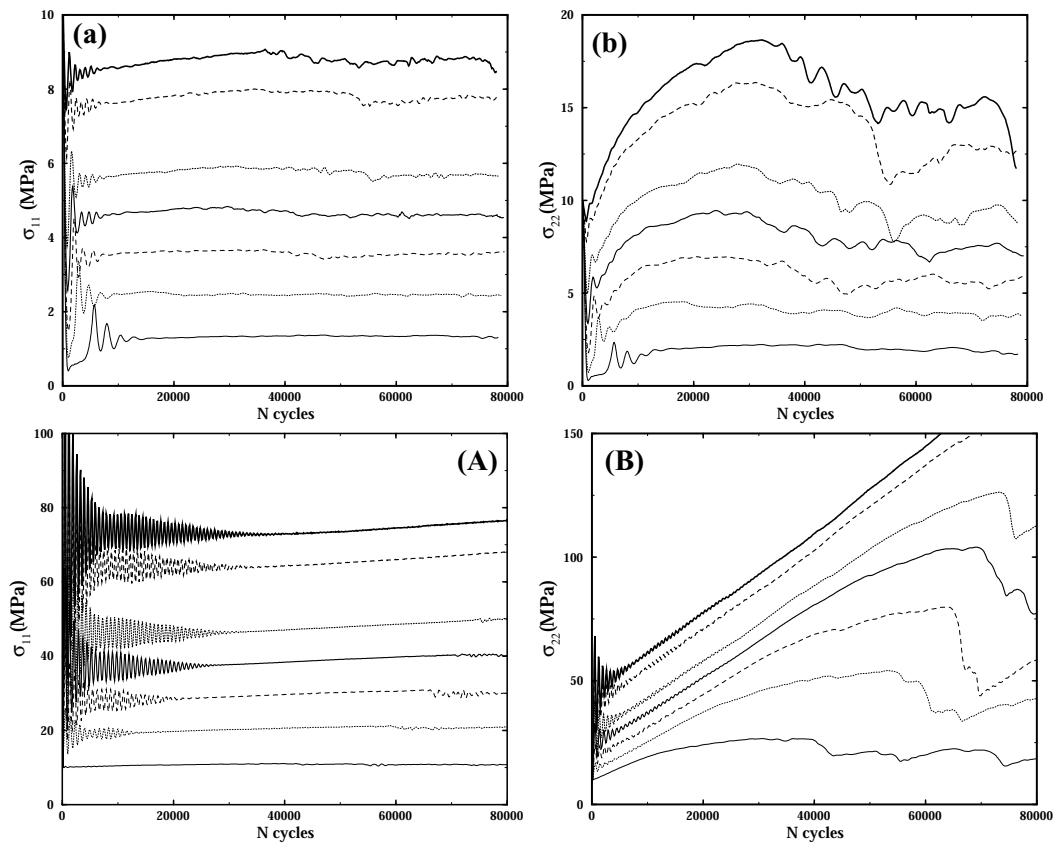


FIG. 6.24 – Courbes de contrainte (horizontale  $\sigma_{11}$  (à gauche) et verticale  $\sigma_{22}$  (à droite)) - déformation (axiale  $\epsilon_{22}$ ) (en terme de cycles de calcul) au cours de tests de chargements biaxiaux pour des pressions de confinement  $P_c = \sigma_{11}^{ext}$  allant : (en haut) de  $1MPa$  à  $8MPa$  par incrément de  $1MPa$ , (en bas) de  $10MPa$  à  $80MPa$  par incrément de  $10MPa$ , dans des échantillons granulaires composés approximativement de  $N = 5000$  grains.

## 6.3 Conclusions et perspectives

Les simulations numériques de Dynamique Moléculaire ont été utilisées pour étudier les micro-mécanismes de déformation des matériaux granulaires.

Nous avons mis en évidence au cours du chargement le phénomène de la localisation de la déformation associée au seuil de contrainte. Nous avons reproduit de façon assez correcte les données mécaniques classiques des essais de compression biaxiaux avant, pendant et après la rupture.

(1) Dans la phase initiale de montée en charge, le mode de déformation compactant a pu être reproduit ; il est probablement dû à la formation des contacts entre les grains dans la direction de chargement axiale ; cependant à partir d'un moment, on a également une ouverture des contacts dans la direction horizontale par flambage des chaînes de forces entraînant la création de porosité allongée verticalement ; c'est ce qui entraîne le passage à une déformation dilatante avant d'atteindre le seuil de rupture comme cela est également le cas dans les essais sur les sables réels.

(2) Au cours de cette phase, les particules sont mobilisées localement par intermittence en translation et en rotation comme on a pu le voir par l'étude de l'évolution de l'énergie cinétique translationnelle et rotationnelle du système ; ces réarrangements peuvent être perçus comme des précurseurs d'événements de mobilisation majeurs.

(3) Au pic de contrainte, on a observé la rupture comme la localisation de la déformation selon une bande de faible épaisseur ; l'étude des champs de vitesses, des champs de rotations et des cartes des contacts au seuil de rupture sont très bien corrélés au niveau de cette bande, ce qui montre le caractère intimement lié de ces processus dans la formation et le développement des bandes de localisation. La dilatance augmente encore pendant et après cette phase ; le cisaillement local entraîne une déformation des chaînes de particules et des forces associées générant une nouvelle augmentation de la porosité.

(4) Enfin, après la première localisation, si le chargement est poursuivi, on observe une nouvelle montée en contrainte associée avec les mêmes processus de réarrangements locaux ; à terme, on observe une nouvelle rupture sur la même bande ou sur une autre.

A faibles pressions, les processus locaux de rotations complémentaires semblent jouer un rôle important puisqu'ils permettent à plusieurs bandes de cisaillement de s'exprimer alternativement au cours de la déformation. C'est un état comme on l'a vu qui peut également être à l'origine de la dilatance de l'échantillon, lorsqu'il est accessible, il est privilégié, car il permet de réduire la résistance au cisaillement. Plus un agrégat sera compact et plus les rotations seront frustrées entre les grains (même si les grains ne sont pas sphériques) et plus la résistance au cisaillement sera importante.

La nature sphérique des grains utilisés dans cette étude est bien sûr une simplification par rapport à un matériau granulaire naturel ; les aspérités des particules auraient pour effet de gêner les rotations et ceci entraînerait une augmentation des contraintes cisailantes par rapport au matériau étudié. Une façon de prendre en compte ces aspérités serait par exemple d'introduire dans le modèle numérique une résistance aux rotations. Dans la nature, une augmentation de la contrainte cisailante pourrait avoir pour effet de fragmenter les aspérités des particules et permettrait donc de relâcher les contraintes.

Enfin, les processus de fracturation des grains ne sont pas pour le moment accessibles par le type de modèle utilisé mais, il pourrait être envisagé d'inclure une fracturation d'agrégats de particules ayant un mouvement rigide avant la rupture. Il a été montré que les processus de fracturation dans des assemblages granulaires vont dans le sens d'une réduction de la porosité par un remplissage des pores (d'effondrement de la porosité) (voir chapitre 3, les mélanges bidisperses



aux fortes hétérogénéités de taille).

# Endommagement des roches granulaires : effets des hétérogénéités de cimentation et effets d'échelle

## Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>241</b>
<b>7.2</b>	<b>Le modèle d'endommagement</b>	<b>246</b>
7.2.1	Critère d'endommagement <i>I</i>	247
7.2.2	Critère d'endommagement <i>II</i>	250
<b>7.3</b>	<b>Simulations numériques</b>	<b>252</b>
7.3.1	Modèle numérique	252
7.3.2	Evolution de la distribution d'énergie élastique et de l'endommagement	255
7.3.3	Endommagement et Pic de contrainte	257
7.3.4	Localisation de l'endommagement	259
7.3.5	Effet d'échelle de l'endommagement	266
7.3.6	Effet de la Pression de Confinement	268
7.3.7	Modèle statistique et pression	269
7.3.8	Membrane flexible aux frontières	269
<b>7.4</b>	<b>Conclusions</b>	<b>270</b>

---

## 7.1 Introduction

Les caractéristiques mécaniques des matériaux granulaires peuvent être affectées, de manière importante, par la cimentation intergranulaire. Une façon de comprendre et de quantifier le rôle et les effets de cette cimentation est d'étudier les interactions entre les grains à la micro-échelle.

Des travaux récents sur l'étude des effets de la cimentation de contact, sur le comportement élastique et inélastique des matériaux granulaires, sont des études expérimentales et numériques.

Un détail important et qui manque dans de nombreux travaux sur la cimentation, est une description théorique des lois de contact interparticulaires. Dvorkin et coll. [46], [47], [48] ont examiné la transmission des contraintes normales et tangentielles, entre des particules déformables à travers des joints de ciment également déformables sur le modèle de base élastique (ciment siliceux par exemple), ou bien de nature visqueuse [87] (sédiments marins, sables à

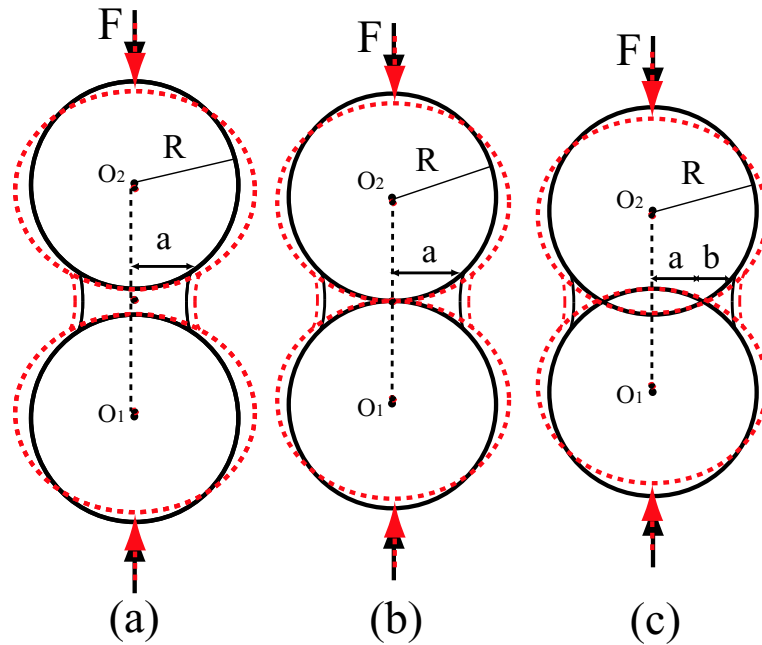


FIG. 7.1 – Différentes géométries de contact intergranulaire cimenté : (a) les deux grains sont séparés et le contact est assuré par un joint de ciment qui assure la cohésion ; les grains et le joint se déforment élastiquement sous chargement en compression (ou en traction), (b) les deux grains ont un point de contact, (c) les deux grains sont précompactés, c'est-à-dire. une surface de contact entre les grains préexiste à la cimentation qui est de type annulaire.

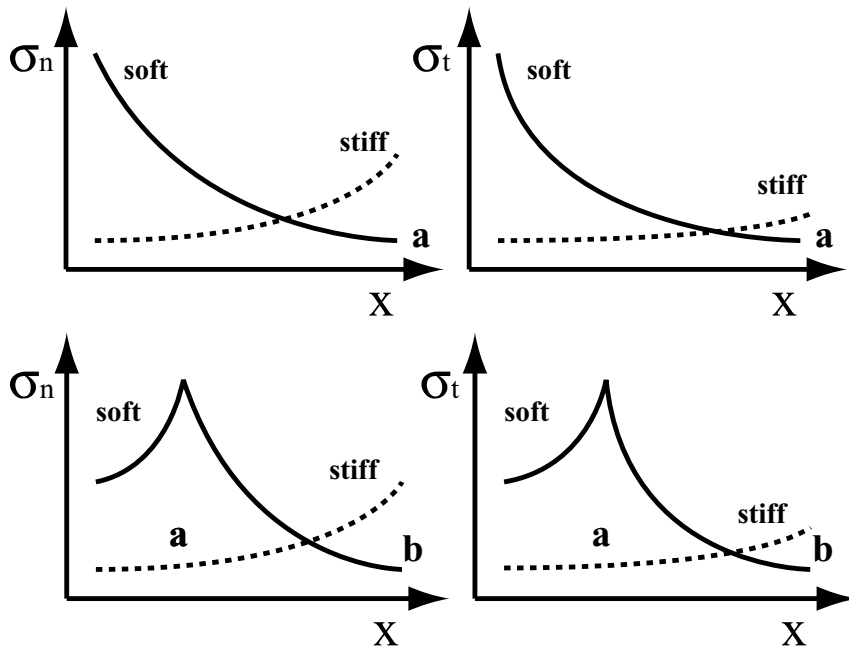


FIG. 7.2 – Profils qualitatifs des contraintes normales et tangentielles dans le ciment intergranulaire de l'intérieur vers la périphérie, (en haut) lorsque les grains sont séparés ou lorsque les grains ont un point de contact, (en bas) lorsque les grains sont précompactés, pour un ciment mécaniquement moins résistant que les grains.

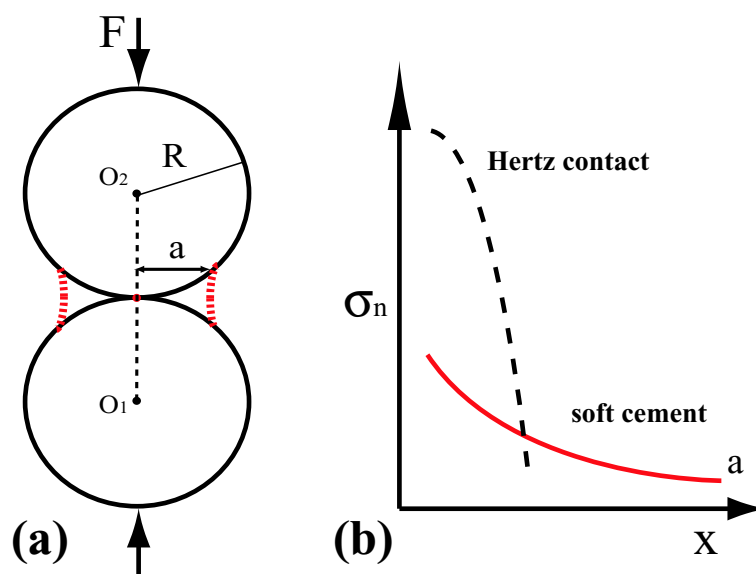


FIG. 7.3 – Profils qualitatifs des contraintes normales au contact de deux sphères : (a) dans le cas d'un contact de Hertz, la force est transmise sur une petite surface, et les contraintes sont concentrées, (b) cimentation de contact, même de faible résistance, le ciment permet d'uniformiser la distribution des contraintes au contact, et la résistance des grains à la rupture en sera renforcé.

huiles-lourdes, matériaux bitumineux). Deux grains cimentés peuvent être séparés ou bien avoir un point de contact (voir figure 7.1 (a) et (b)).

Dans ce modèle, le joint de ciment est traité comme un milieu élastique, et la taille de la zone cimentée est petite comparée à la taille de grain c'est-à-dire, le grain peut être considéré comme un milieu semi-infini ; par ailleurs il n'y a pas de glissement possible au contact des grains et aux interfaces entre le ciment et les grains.

La solution de ce problème montre une distribution des contraintes normales et tangentielles particulière (voir figure 7.2) : les contraintes sont maximum au centre de la région de contact lorsque le ciment est moins résistant que le grain, et sont maximum à sa périphérie lorsque le ciment est plus résistant que le grain.

Une autre géométrie de problème correspond au cas précompacté, où les deux grains étaient initialement en contact (voir figure 7.1 (c)). Dans un premier temps, sous l'effet d'un chargement normal des grains, une surface de contact finie entre les grains s'est développée (modèle de Hertz) ; par la suite du ciment a été déposé autour de la zone de contact préexistante.

Les hypothèses utilisées dans ce modèle sont les mêmes que dans le cas précédent. Les calculs montrent cette fois que pour le cas d'un ciment mécaniquement moins résistant que les grains, à la suite d'un nouveau chargement, les contraintes normales et tangentielles sont maximum à la périphérie de la zone de contact initial et diminuent vers la périphérie de la zone annulaire de ciment (voir figure 7.2).

Un résultat important apporté par ces études est que, le ciment intergranulaire, même s'il est de nature moins résistante que les grains, supporte une partie importante du chargement (voir figure 7.3) ; Pour un même chargement appliqué, la cimentation au contact diminue les concentrations de contrainte, en comparaison de l'interaction de contact de Hertz, car la charge est transmise sur une surface plus importante.

Ainsi, même une petite quantité de ciment faiblement résistant contribue de manière significative à prévenir la fracturation des grains ; pour un chargement équivalent, des grains qui

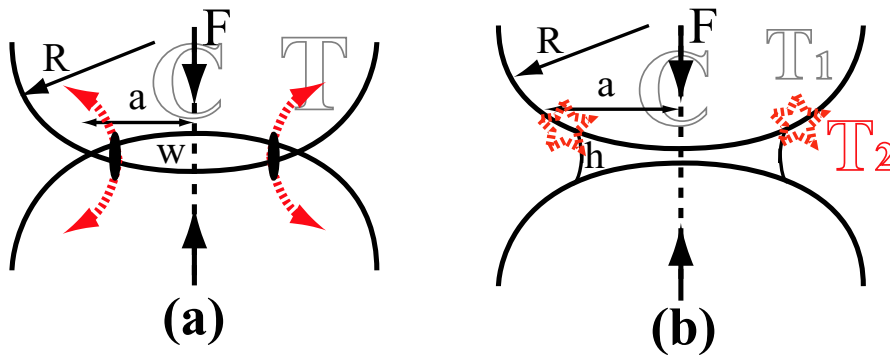


FIG. 7.4 – Schémas qualitatifs d'un contact entre deux sphères et des régions de contraintes compressives (C) et extensives (T) : (a) cas d'un contact Hertzien ; au centre, toutes les contraintes principales sont compressives (C), et à l'extérieur de cette région, une contrainte principale devient extensive (T) ; les micro-fissures peuvent alors se propager dans la direction du champ de contraintes extensif ; (b) cas d'un contact cimenté (non précompacté) ; on trouve alors deux zones en tension dans les grains, dont une très localisée près de la triple-jonction (( $T_2$ )) ; c'est dans cette zone près de la surface libre que le maximum de tension est atteint.

développent un contact non cimenté auront tendance à se fracturer, alors que des grains cimentés au contact resteront intacts et c'est le ciment inter-granulaire qui subira la rupture.

Cette prédiction issue des modèles théoriques a été confirmée par des expériences de chargement sur des roches granulaires synthétiques, assemblages de billes de verre cimentés par de l'époxy en condition hydrostatique, [166], et sables cimentés par de l'halite et du verre siliceux [6] en condition triaxiale. Dans le cas de billes de verre non cimentées, une fracturation importante a été mise en évidence pour des pressions de confinement de quelques dizaines de  $MPa$  ; c'est également ce que nous avons observé sur des jeux de billes de verre dans nos expériences de compression hydrostatique, présentées dans le chapitre 4 (rupture des billes vers  $40 MPa$  mise en évidence par les émissions acoustiques associées). Dans le cas de billes de verre cimentées à leurs contacts par de petites quantités d'époxy, celles-ci sont restées intacts alors que les contacts d'époxy ont rompu ; de même pour le cas des sables cimentés, les petites quantités de ciment déposées au niveau des contacts inter-granulaires ont augmenté de façon significative la résistance des échantillons.

Pour une force équivalente transmise, les concentrations de contraintes sont donc fortes aux contacts de grains non-cimentés, alors que des contacts cimentés permettent d'obtenir une distribution plus uniforme des contraintes réparties sur une surface de contact plus importante ; les contraintes à l'interface cimentée chutent de façon importante en comparaison du contact non cimenté.

Pour un ciment peu résistant, les grains non cimentés auront tendance à se fracturer au centre de la région de contact, alors que les grains cimentés resteront intacts ; cependant, si la cimentation inter-granulaire est présente, la fracturation des grains peut quand même avoir lieu si le ciment est fortement résistant, et la rupture aura lieu à la périphérie de la zone cimentée [47], [164]. Teng-Fong Wong et coll. [164] [144] montrent dans une modélisation d'un contact granulaire cimenté, où les modules d'Young des grains et du ciment sont comparables, que la concentration des contraintes extensives, se situe au niveau de la triple-jonction grain-ciment-pore. Dans la théorie du contact de Hertz, les contraintes maximales en extension se trouvent également aux limites de la zone de contact (voir figure 7.4).

Le travail que nous allons présenter dans ce chapitre, est inspiré à la fois des travaux expérimentaux de tests de chargement de roches granulaires modèles, et des travaux théoriques sur les lois de contact des grains cimentés. Nous proposons un modèle statistique de matériau granulaire cimenté, composé de grains élastiques et d'un ciment fragile de 'faible résistance' qui peut se trouver au contact entre les grains et assure leur cohésion.

Les hypothèses présentes dans ce modèle est que l'endommagement d'un tel matériau granulaire, sous l'effet d'un chargement mécanique externe, est contrôlé principalement par les deux facteurs suivants : (1) une distribution hétérogène de ciment au contact de grains dans l'échantillon [6] [32] et (2) une distribution de forces inter-granulaires hétérogènes, typiquement exponentielle [109] [124] [100] (voir chapitre 5), et de l'énergie élastique associée produite par la déformation macroscopique.

Ces hypothèses qui peuvent être vérifiées par des observations directes dans les roches granulaires [102], et par des études expérimentales et numériques des distributions de forces dans les milieux granulaires [109] [100], sont combinées à un simple critère de rupture pour un contact cimenté.

Une caractéristique importante du modèle proposé, est une dépendance d'échelle explicite de certains paramètres d'endommagement macroscopiques pour un matériau, avec des propriétés microscopiques fixées, et des distributions d'hétérogénéités données. Cette dépendance d'échelle pourrait être importante, pour l'interprétation de simulations numériques des matériaux granulaires utilisant un nombre limité de grains, mais aussi pour les tentatives d'extrapoler les critères d'endommagement dans les roches, depuis les expériences en laboratoire vers les grandes échelles géologiques.

Les prédictions de ce modèle statistique d'endommagement, sont confirmées qualitativement par des simulations numériques mettant en oeuvre la méthode des Eléments Discrets, adaptée pour la modélisation des matériaux granulaires cimentés dans une géométrie d'arrangement tridimensionnel.

La plupart des études en laboratoire, portant sur les propriétés mécaniques des roches, sont réalisées sur de petits échantillons de roches. A cause des contraintes expérimentales, les dimensions typiques des échantillons sont de l'ordre de quelques centimètres, ou tout au plus de quelques dizaines de centimètres.

Cependant, les hétérogénéités et les discontinuités de différentes natures dans les roches sont connues pour s'étaler sur une large gamme d'échelles, [110] ce qui pourrait poser la question de savoir si les propriétés mécaniques mesurées sur un petit échantillon peuvent être représentatives d'un volume de roche plus important.

Une telle dépendance d'échelle des propriétés mécaniques des roches a été observée expérimentalement, et un certain nombre de modèles mécaniques et statistiques a été proposé pour l'expliquer [118].

Un autre aspect de ce problème est lié à la modélisation numérique des roches utilisant une approche particulière [26]. Les limitations de puissance de calcul influant sur le nombre de particules modélisées, ceci pourrait mener ces simulations à fournir des résultats biaisés dus à des effets de taille finie.

Nous allons donc nous intéresser au problème de la dépendance d'échelle de certains paramètres d'endommagement dans, les roches granulaires cimentées. Nous l'avons étudié à l'aide d'un modèle statistique relativement simple, et nous avons vérifié les prédictions de ce modèle en utilisant des simulations numériques  $3D$  de matériaux granulaires cimentés.

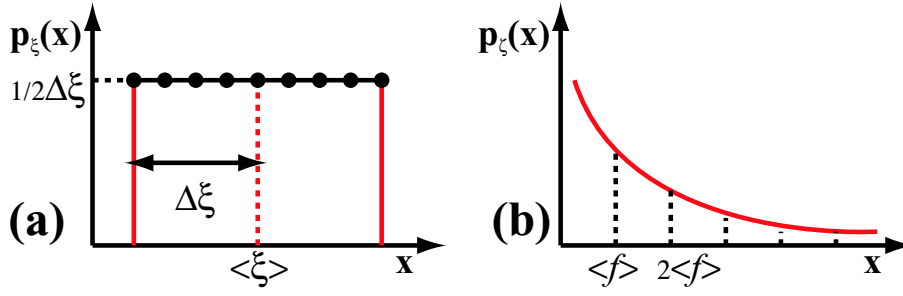


FIG. 7.5 – (a) Distribution de résistances des contacts uniformément distribuée entre  $\langle \xi \rangle - \Delta_\xi$  et  $\langle \xi \rangle + \Delta_\xi$  et (b) distribution exponentielle des forces avec une force moyenne  $\langle f \rangle$ .

## 7.2 Le modèle d'endommagement

Considérons un modèle de roche granulaire cimentée, qui consisterait en un ensemble de  $N$  sphères élastiques confinées dans un volume  $V$  de telle façon, qu'il existe  $n$  contacts entre ces sphères. Chaque contact est supposé avoir une certaine résistance aux chargements, normale et tangentielle, auxquels il est soumis; ce chargement local est hétérogène dans l'échantillon du fait du caractère désordonné de l'arrangement des particules; la résistance du ciment au contact dépend des constantes élastiques du matériau qui compose le ciment ( $\mu_c$  et  $\nu_c$ ), et de la quantité de ciment présent au contact des particules.

Nous considérons une compression triaxiale de l'échantillon soumis à une pression de confinement  $p_c$  constante; comme l'arrangement initial des particules est irrégulier, l'état de contrainte assure une distribution hétérogène des forces dans le volume de l'échantillon.

Un contact avec l'index  $k$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ) sera caractérisé dans le modèle par deux nombres aléatoires  $\xi_k$ ; la résistance du contact, (c'est-à-dire sa limite de rupture), et  $f_k$ , la force appliquée au contact.

Pour un souci de simplicité, nous ne considérons pour le moment qu'un modèle scalaire ne prenant en compte que la composante normale de la force agissant sur le contact entre deux grains  $f^k = f_n^k$ , mais le modèle pourrait être généralisé, pour prendre en compte à la fois les composantes normales et tangentielles de la force  $f_n^k$  et  $f_t^k$ , ainsi que les résistances associées  $\xi_n^k$  et  $\xi_t^k$ . Nous faisons de plus l'hypothèse que la résistance des contacts  $\xi$  est une variable aléatoire uniformément distribuée entre deux valeurs  $\langle \xi \rangle - \Delta_\xi$  et  $\langle \xi \rangle + \Delta_\xi$  :

$$P_\xi(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta_\xi}, & |x - \langle \xi \rangle| \leq \Delta; \\ 0, & |x - \langle \xi \rangle| > \Delta. \end{cases} \quad (7.1)$$

Un nombre d'études expérimentales et numériques des matériaux granulaires [109] [100] indique, que même sous une compression uniforme hydrostatique, les forces entre les grains sont distribuées dans l'échantillon de façon hétérogène (formant des chaînes de forces), et que les amplitudes des forces de contact  $f$  supérieures à la moyenne  $\langle f \rangle$ , sont bien décrites par une distribution exponentielle (pour certaines préparations) [100]. Nous supposons donc dans notre modèle que la force agissant au contact entre deux grains est une variable aléatoire  $\zeta$  ayant la distribution :

$$P_\zeta(x) = \begin{cases} \frac{1}{\langle f \rangle} e^{-\frac{x}{\langle f \rangle}}, & x \geq 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (7.2)$$

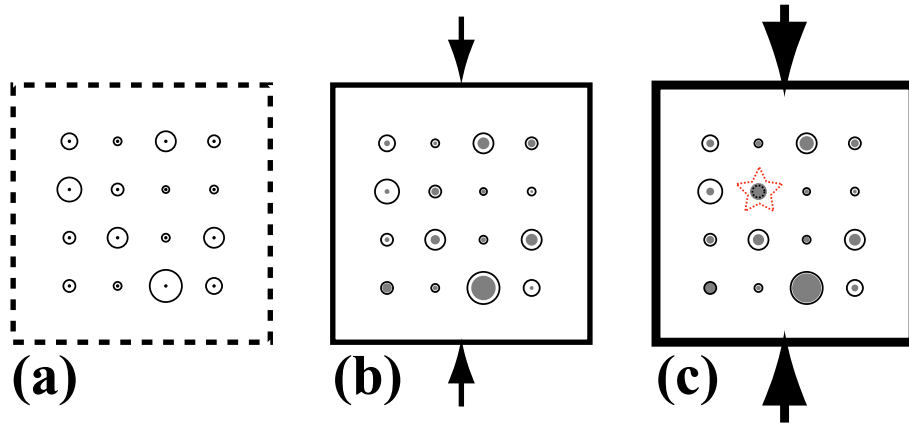


FIG. 7.6 – Représentation schématique du premier critère d'endommagement, *au moins* un contact a rompu, (il peut y en avoir plusieurs) c'est-à-dire  $\alpha \geq 1/n$  : (a) affectation d'un seuil de résistance (cercle) à chaque contact (disque), (b) sous faible chargement, les contacts en se déformant élastiquement, stockent de l'énergie et à ce stade de la déformation, aucun contact n'a encore atteint son seuil de rupture, (c) sous un chargement plus important, la déformation élastique des contacts s'intensifie, et *au moins* un contact atteint son seuil de rupture : c'est le point d'initiation de l'endommagement.

La valeur moyenne de la force  $\langle f \rangle$  est une fonction du chargement externe (et donc de la pression interne).

Considérons le problème de la rupture de contacts granulaires cimentés dans l'échantillon sous l'effet d'un chargement externe.

### 7.2.1 Critère d'endommagement $I$

#### Présentation et hypothèses

Nous considérons dans un premier temps le plus simple des critères d'endommagement : l'initiation de l'endommagement (voir figure 7.6). Pour cela, nous calculons la probabilité de rupture  $\mathcal{P}_I(n)$  d'au moins un contact dans l'échantillon contenant  $n$  contacts :

$$\mathcal{P}_I(n) = 1 - \mathcal{P}\{\xi_1 > \zeta_1; \dots; \xi_n > \zeta_n\} \approx 1 - \prod_{k=1}^n \mathcal{P}\{\xi_i > \zeta_i\}, \quad (7.3)$$

Cette probabilité correspond à la probabilité "unité" moins la probabilité de n'avoir aucun contact endommagé dans l'échantillon, c'est-à-dire que les résistances de tous les contacts  $\xi_k$  sont supérieures aux forces transmises  $\zeta_k$  au niveau de ces contacts.

L'égalité précédente (équation 7.3) serait exacte si les contacts étaient endommagés indépendamment les uns des autres, ce qui n'est en général pas vraisemblable, dû à la redistribution des contraintes dans un matériau granulaire lors de la rupture locale d'un contact. En effet, une partie de la force transmise au contact avant la rupture est alors redistribuée sur les surfaces de contact voisines, et la surface de contact endommagée, si elle subsiste, transmet toujours une partie de cette force. A priori donc, l'état de chaque contact par rapport à sa limite de rupture n'est pas une fonction univoque du chargement extérieur, mais est aussi fonction de son environnement local, c'est-à-dire des perturbations du réseau de transmission des forces dans son voisinage.



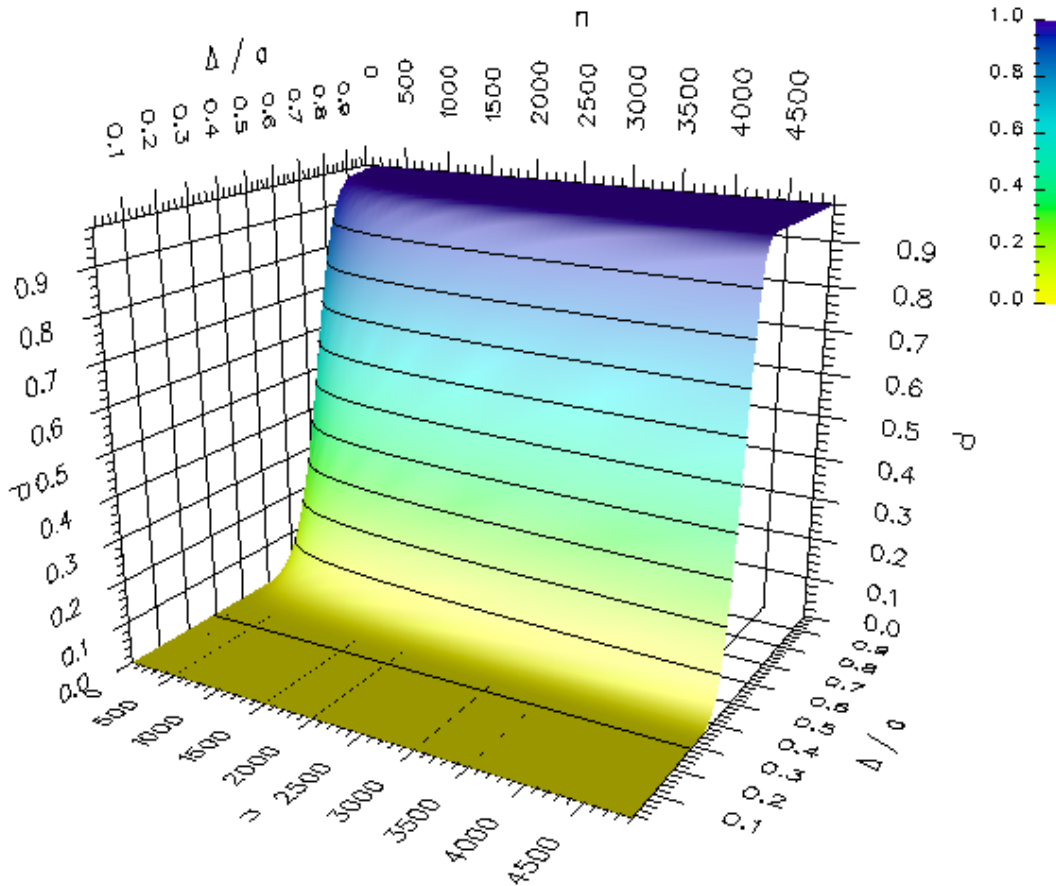


FIG. 7.7 – Probabilité de rupture d’au moins un contact ( $\alpha \geq 1/n$ )  $\mathcal{P}_f(n, \Delta/a)$ , comme fonction du nombre de contacts  $n$  et du rapport  $\Delta/a$ , (où  $\Delta$  est l’hétérogénéité de cimentation et  $a$  est la valeur moyenne des forces) selon l’équation 7.6. La “saturation” de la probabilité (i.e.  $\mathcal{P}_f(n, \Delta/a) \rightarrow 1$ ) dépend à la fois de la taille du système  $n$  (effet de taille finie), et de l’hétérogénéité des seuils de résistances  $\Delta$  (effet de l’hétérogénéité de cimentation), pour des conditions de chargement données, c’est-à-dire à valeur fixée pour la moyenne des intensités des forces  $a$ .

Pourtant, on pourra considérer cette hypothèse plutôt acceptable au stade initial de l’endommagement, quand la densité des contacts endommagés reste faible, et que leurs interactions élastiques peuvent être négligées. Nous montrerons par la suite que cette hypothèse est justifiée en menant des simulations numériques qui prennent en considération le phénomène de redistribution des contraintes ; nous montrerons alors qu’au cours de la déformation, avant que la rupture ne soit atteinte, les processus de redistribution des contraintes ne sont pas critiques.

### Calcul de la probabilité

Nous pouvons maintenant calculer la probabilité qu’un contact cimenté ne soit pas endommagé :

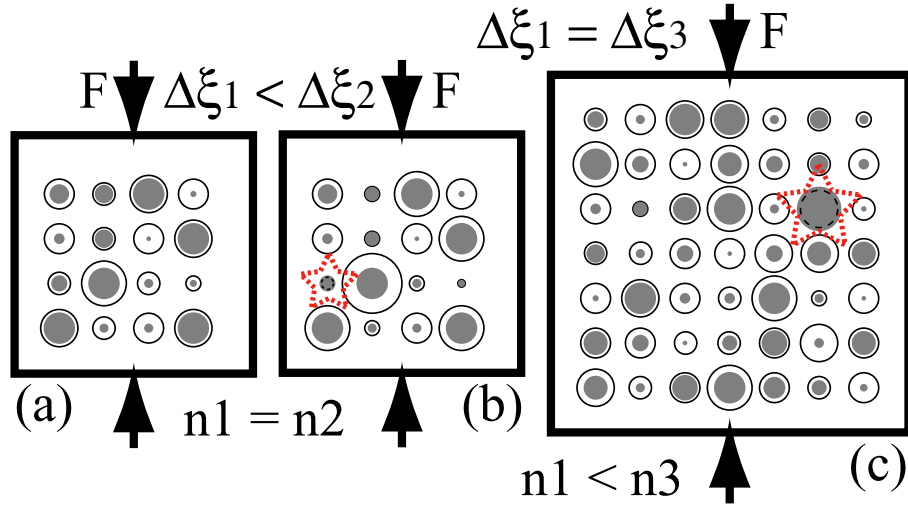


FIG. 7.8 – Effets des hétérogénéités de cimentation de contact (b) et de taille d'échantillon (c) ; les propriétés d'un matériau et les conditions de chargement étant données ( $F$ ), l'initiation de l'endommagement est plus probable lorsque la résistance des contacts inter-granulaires est plus hétérogène (le réseau de forces devient plus critique pour la distribution de résistance), et un grand échantillon a une probabilité plus forte de contenir des contacts endommagés (il échantillonne mieux la distribution exponentielle des forces).

$$\mathcal{P}\{\zeta_k < \xi_k\} = \frac{1}{2\Delta\xi} \int_{\langle\xi\rangle - \Delta\xi}^{\langle\xi\rangle + \Delta\xi} \mathcal{P}\{\zeta_i < y\} dy = \frac{1}{2\Delta\xi} \int_{\langle\xi\rangle - \Delta\xi}^{\langle\xi\rangle + \Delta\xi} \left[ 1 - e^{-\frac{y}{\langle f \rangle}} \right] dy = 1 - e^{-\frac{\langle\xi\rangle}{\langle f \rangle}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}}{\frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}} \right), \quad (7.4)$$

Dans l'expression précédente, l'exposant  $\langle\xi\rangle/\langle f \rangle$  est le rapport de la résistance moyenne des contacts  $\langle\xi\rangle$  à la force intergranulaire moyenne  $\langle f \rangle$ . Le terme  $\left(\frac{\sinh \frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}}{\frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}}\right)$  résulte de la variabilité de la résistance des contacts (par le terme d'hétérogénéité  $\Delta\xi$ ) ; ce terme est  $\geq 1$  et vaut 1 lorsque tous les contacts ont une résistance identique ( $\Delta\xi = 0$ ). Il s'ensuit directement de (7.3) et (7.4) que

$$\mathcal{P}_I(n|\Delta\xi > 0) > \mathcal{P}_I(n|\Delta\xi = 0) \quad (7.5)$$

ce qui signifie qu'introduire une hétérogénéité dans la résistance des contacts cimentés affaiblit en moyenne la résistance de l'échantillon tout entier.

En combinant (7.3) avec (7.4) nous obtenons la probabilité de rupture  $\mathcal{P}_I(n)$  d'au moins un contact dans l'échantillon contenant  $n$  contacts :

$$\mathcal{P}_I(n) = 1 - \left[ 1 - e^{-\frac{\langle\xi\rangle}{\langle f \rangle}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}}{\frac{\Delta\xi}{\langle f \rangle}} \right) \right]^n. \quad (7.6)$$

La probabilité de rupture d'au moins un contact  $\mathcal{P}_f(n)$ , comme fonction du nombre de contacts  $n$  et du rapport  $\Delta\xi/\langle\xi\rangle$ , en accord avec l'équation (7.6), est montrée en figure 7.7.

On peut voir que lorsque  $n \rightarrow \infty$  la probabilité de rupture  $\mathcal{P}_I$  tend asymptotiquement vers 1, ce qui signifie que, avec les hypothèses du présent modèle, les échantillons de grand volume

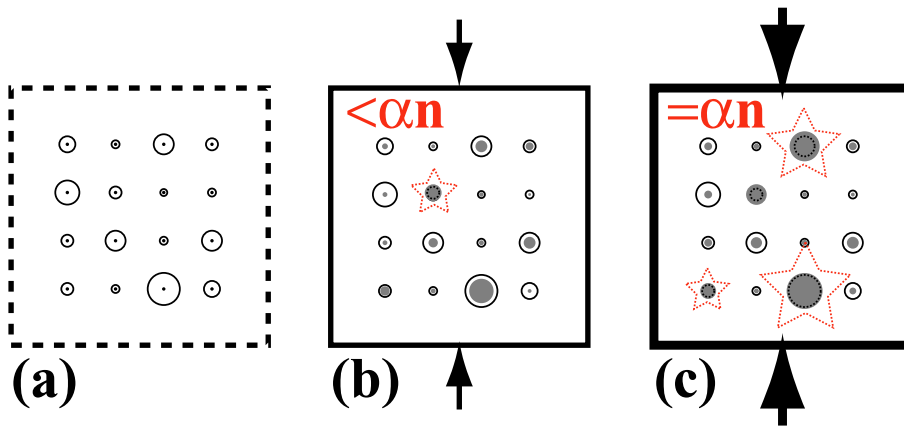


FIG. 7.9 – Représentation schématique du second critère d'endommagement, "une fraction  $\alpha n$  des contacts est endommagée" : (a) affectation des seuils de résistances à tous les contacts, (b) pour un chargement modéré, les contacts, en se déformant élastiquement, stockent de l'énergie et des contacts ont atteint leurs seuils de rupture pour une fraction  $\beta n < \alpha n$ , (c) en augmentant le chargement, de nouveaux contacts atteignent leurs seuils de rupture pour une proportion  $\alpha n$  ; l'endommagement qualifié de diffus, est réparti de façon homogène dans l'échantillon.

contiennent toujours un contact endommagé ; ceci est naturel du fait que nous avons supposé une distribution d'amplitude de force de contact de type exponentielle non tronquée.

Au sein des chaînes de forces se développant dans les échantillons réels, la distribution d'amplitude des forces de contact est bien entendu limitée, par un minimum et un maximum, c'est-à-dire que les amplitudes des forces suivent une distribution exponentielle tronquée, par la plus petite et la plus grande force du système  $f^{min}$  et  $f^{max}$ .

Un aspect intéressant du modèle, avec ce critère d'endommagement, est la dépendance de la probabilité de l'initiation de la rupture des contacts  $\mathcal{P}_I(n)$  comme une fonction de la taille de l'échantillon  $n$  et du paramètre d'hétérogénéité  $\Delta_\xi$ . Ceci montre, d'une part, que pour un échantillon de taille donnée, l'initiation de l'endommagement est plus probable lorsque la résistance des contacts inter-granulaires est plus hétérogène et, d'une autre part, que les propriétés d'un matériau et les conditions de chargement données, un grand échantillon a une probabilité plus forte de contenir des contacts endommagés (voir figure 7.8).

Le critère d'endommagement que nous venons de présenter est assez sévère : il est en effet basé sur la rupture d'un seul contact dans tout l'échantillon, et vraisemblablement, il n'est pas adapté à la description de l'endommagement macroscopique des roches granulaires. Néanmoins, l'équation 7.6 que nous avons obtenue, basée sur ce critère, est utile dans la mesure où elle nous renseigne sur l'origine de la dépendance d'échelle (du nombre de contacts  $n$ ) de l'endommagement dans un échantillon hétérogène. Cette équation va de plus nous servir dans le développement d'un modèle d'endommagement moins restrictif.

## 7.2.2 Critère d'endommagement II

### Critère et hypothèses

Par le passé et plus récemment, de nombreux travaux ont montré que la localisation de la déformation, par exemple, sous la forme de bandes de cisaillement [136] ou de bandes de compaction, [73] [18] est le mécanisme essentiel de l'endommagement macroscopique des roches granulaires. Cette localisation ne peut apparaître que lorsqu'une certaine concentration de contacts

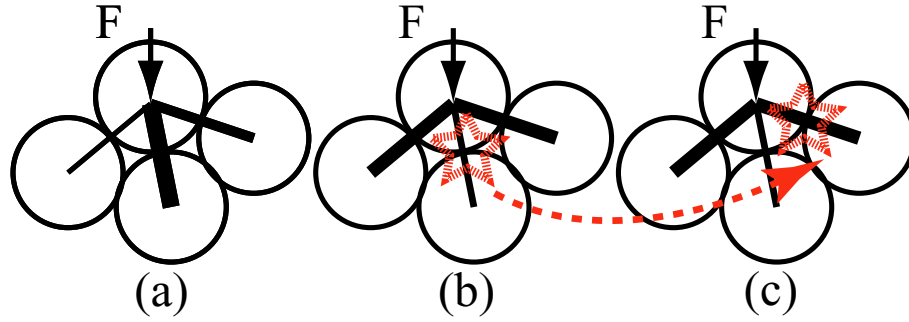


FIG. 7.10 – Redistributión des contraintes locales ; lorsqu'un contact cimenté subit la rupture (cas d'un ciment de faible résistance, où c'est le joint qui rompt), la force auparavant transmise par cette surface de contact est redistribuée sur les surfaces de contacts voisines.

granulaires ont rompu au premier stade de la déformation, de telle sorte, que la redistributión des contraintes au sein de l'échantillon introduise des interactions suffisantes entre les micro-cracks [83].

Dans la présente approche statistique, qui néglige les aspects géométriques du problème, nous ne pouvons pas prendre en compte les interactions entre les contacts ; lorsqu'un contact subit la rupture, la charge locale auparavant transmise par la surface de contact endommagée, va être redistribuée sur les contacts voisins sains, les amenant à leur tour plus près de leur seuil de résistance (voir figure 7.10) ; comme notre calcul de probabilité pour l'échantillon tout entier est basé sur l'indépendance des contacts endommagés individuels, notre modèle ne peut incorporer ces effets de redistributión locale de charge. Nous verrons par la suite, à l'aide de nos simulations numériques, que au cours de la déformation, à l'approche du pic de contrainte, ces effets sont relativement importants.

Notre objectif ici, est d'obtenir des estimations analytiques de la dépendance d'échelle de l'endommagement dans un matériau granulaire cimenté ; on ne peut les obtenir que sous l'hypothèse posée où les contacts sont endommagés de façon indépendante. Par suite, les conclusions des modèles statistiques présentés, ne sont valides qu'aux premiers stades d'endommagement de l'échantillon, lorsque celui-ci est à caractère diffus.

Nous considérons maintenant un critère d'endommagement, dans lequel, les contacts endommagés constitueraient une fraction donnée  $\alpha$  du nombre total de contact  $n$  dans l'échantillon ( $0 < \alpha < 1$ ) (voir figure 7.9). Comme auparavant, la fraction des contacts endommagés doit rester faible, de telle sorte que leurs interactions élastiques puissent être négligées. Ceci signifie que les estimations analytiques que nous développerons ne sont valides que pour  $\alpha \ll 1$ .

### Calcul de la probabilité

Dans le but de calculer la probabilité de rupture  $\mathcal{P}_{II}(\alpha n)$  pour le critère d'endommagement  $II$ , nous introduisons une variable aléatoire  $\varsigma_k$  ayant une distribution binomiale :

$$\varsigma_k = \begin{cases} 1, & \text{si le contact } k \text{ est endommagé} \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.7)$$

Par suite, selon la définition du critère  $II$ , l'échantillon sera endommagé lorsque (voir figure 7.9) :

$$\sum_{k=1}^n s_k \geq \alpha n. \quad (7.8)$$

La probabilité correspondante à l'inégalité 7.8 peut être facilement obtenue en utilisant une fonction de distribution binomiale :

$$\mathcal{P}_{II}(\alpha n) = \mathcal{P}\left\{\sum_{k=1}^n s_k \geq \alpha n\right\} = \sum_{k=\lceil \alpha n \rceil}^n C_n^k P_1^k (1 - P_1)^{n-k}, \quad (7.9)$$

où  $\lceil \alpha n \rceil$  dénote la partie entière de  $\alpha n$  et  $P_I$  est la probabilité de rupture d'un contact (voir l'équation 7.4) :

$$P_I = \mathcal{P}\{\xi_k < \zeta_k\} = e^{-\frac{\langle \xi \rangle}{\langle f \rangle}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta_\xi}{\langle f \rangle}}{\frac{\Delta_\xi}{\langle f \rangle}} \right). \quad (7.10)$$

finalement on peut réécrire :

$$\mathcal{P}_{II}(\alpha n) = \mathcal{P}\left\{\sum_{k=1}^n s_k \geq \alpha n\right\} = \sum_{k=\lceil \alpha n \rceil}^n C_n^k P_1^k \left( 1 - e^{-\frac{\langle \xi \rangle}{\langle f \rangle}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta_\xi}{\langle f \rangle}}{\frac{\Delta_\xi}{\langle f \rangle}} \right) \right)^{n-k}, \quad (7.11)$$

Qualitativement, la dépendance de l'équation 7.11 est similaire à celle obtenue pour le critère d'endommagement I de l'équation 7.6 ; la probabilité d'avoir une fraction donnée de contacts endommagés tend, de façon asymptotique, vers 1 quand le volume de l'échantillon augmente et quand l'hétérogénéité de cimentation croît.

## 7.3 Simulations numériques

Nous présentons maintenant, une série de simulations numériques 3D utilisant le programme de dynamique moléculaire développé au cours de cette thèse, et adapté pour la modélisation des roches granulaires vues comme des assemblages granulaires consolidés par une cimentation de contact. Nous testons les prédictions de notre modèle statistique, en particulier en ce qui concerne la dépendance d'échelle de l'endommagement, pour une distribution d'hétérogénéité donnée. Le modèle numérique prend en compte les interactions élastiques issues de la redistribution des contraintes dans l'échantillon, et de ce fait, il est exempt des hypothèses simplificatrices du modèle statistique.

### 7.3.1 Modèle numérique

Le modèle classique de dynamique moléculaire traite des assemblages de sphères élastiques non consolidés, [26] interagissant par des lois de contacts de type Hertz-Mindlin. Nous avons introduit, dans notre modèle numérique, une possibilité pour prendre en compte la cimentation inter-granulaire. La cimentation au niveau des contacts préexistants est opérée à la dernière étape de la préparation de l'échantillon numérique, par analogie avec les procédures expérimentales de création de roches granulaires synthétiques de Bernabé et coll. [6] et Dvorkin et coll. [166].

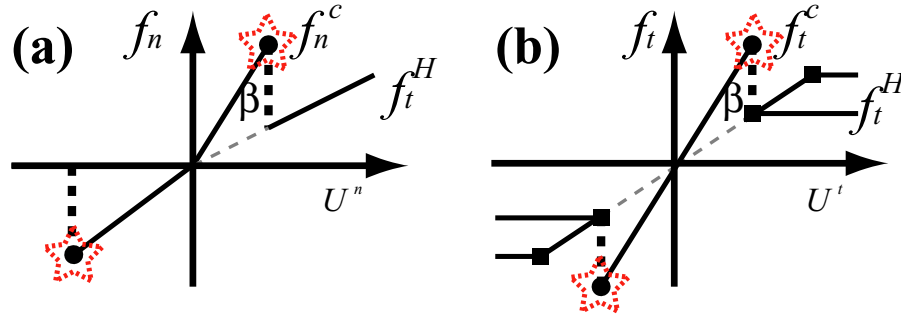


FIG. 7.11 – Lois de contact modifiées pour les forces normales  $f_n$  et tangentielles  $f_t$  en présence de ciment (avant rupture) et après rupture (contact de Hertz) ; les seuils de rupture ( $f_{n,t}^c \rightarrow f_{n,t}^H$ ) et de glissement ( $f_t^H = \mu_f f_n^H$ ) sont représentés respectivement par un cercle et un carré ; lorsque le contact cimenté subit la rupture, les grains peuvent à nouveau glisser si la force transversale de Hertz atteint le seuil de frottement, instantanément après la rupture ou plus tard à la faveur du chargement.

%

### Contact non cimenté

En l'absence de ciment, les grains interagissent les uns avec les autres, par des forces normales de type Hertz  $f_n^H$  qui dépendent de l'interpénétration, et par des forces transversales frictionnelles  $f_t^H$  qui dépendent à la fois des déplacements relatifs normaux et tangentiels entre les grains :

$$\begin{cases} f_n^H = \frac{2}{3} C_n R^{1/2} w^{3/2}, & ; \\ \Delta f_t^H = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s, & . \end{cases} \quad (7.12)$$

où  $R$  est le rayon des sphères (dans cette étude nous avons utilisé uniquement un échantillon granulaire monodisperse avec  $R = 0.1 \text{ mm}$ ). Deux grains  $i$  et  $j$  en contact dont les positions des centres sont  $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$  auront une interpénétration  $w_{ij} = 1/2(2R - |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$ .  $\Delta s_{ij}$  est le déplacement relatif transversal entre les deux grains. Les constantes  $C_n = 4\mu_g/(1 - \nu_g)$  et  $C_t = 4\mu_g/(2 - \nu_g)$  sont définies en terme du module de cisaillement  $\mu_g$  et du coefficient de Poisson  $\nu_g$  du matériau des grains. Dans nos simulations nous avons choisi  $\mu_g = 30 \text{ GPa}$  et  $\nu_g = 0.2$  (valeurs correspondantes à des billes de verre). On rappelle que l'interpénétration  $w$  et le rayon de surface circulaire de contact des grains  $a$  sont liés par  $a^2 = Rw$ .

### Contact cimenté

Lorsque le contact est cimenté et *sain*, les deux grains interagissent les uns avec les autres selon des relations similaires aux lois 7.12 (voir figure 7.11) :

$$\begin{cases} f_n^C = \frac{2}{3} C_n R^{1/2} w^{3/2} + S_n(w - w_0), & ; \\ \Delta f_t^C = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s + S_t \Delta s, & . \end{cases} \quad (7.13)$$

où  $S_n$  et  $S_t$  sont les raideurs normales et tangentielle caractérisant la rigidité du ciment [46] [47] ; elles dépendent des modules élastiques du matériau qui compose le ciment et de la surface de contact cimentée ;  $w_0$  est l'interpénétration au contact des grains au moment où ils ont été cimentés ; elle est liée à l'intensité de la précompaction, dans le cas de nos préparations

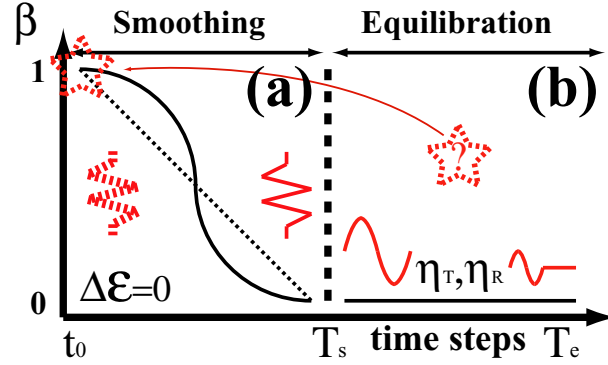


FIG. 7.12 – Fonctions utilisées : (a) pour lisser numériquement la rupture d'un contact cimenté  $\beta_{smooth}(t)$ , (b) pour rééquilibrer le système après rupture  $\beta_{equ}(t) = 1$ , sur un nombre de cycles donné  $N\delta t$ .

d'échantillons numériques en condition de compression isotrope, la distribution d'interpénétration de contact est liée à la pression moyenne  $p$ .

### Contact endommagé

Lorsqu'un contact cimenté subit la rupture, il est endommagé et les lois de contact précédentes sont modifiées selon :

$$\begin{cases} f_n = \frac{2}{3}C_n R^{1/2} w^{3/2} + \beta(t)S_n(w - w_0), & ; \\ f_t = C_t(Rw)^{1/2}\Delta s + \beta(t)S_t\Delta s, & . \end{cases} \quad (7.14)$$

où  $\beta$  est une fonction monotone décroissante de  $t$  qui prend la valeur 1 en  $t = t_0$  et la valeur 0 lorsque  $t > t_0 + T_\beta$  comme le montre la figure 7.12. Cette fonction permet de modéliser la perte de résistance graduelle du contact lors de la rupture, mais surtout permet de lisser les sauts dans les intensités de forces de contact ; avant la rupture, les intensités des forces de contact sont données par  $f_{n,t}^c$  et, une fois le contact endommagé, les intensités des forces de contact sont à nouveau dictées par les lois de contacts de Hertz-Mindlin  $f_{n,t}^H$ . Le recours à ce procédé de lissage permet (1) de supprimer les instabilités numériques (dues à la méthode d'intégration et à l'utilisation de pas d'intégration, pas suffisamment petit par rapport au pas de temps critique défini au chapitre 2) pour éviter qu'elles ne se propagent à tout l'échantillon, et (2) l'étape d'équilibration permet la redistribution des contraintes dans le régime quasi-statique, c'est-à-dire qu'elle permet aux particules de se réarranger localement pour être en équilibre avec le nouvel environnement local, avant le nouvel incrément de déformation. Le fait de ne pas utiliser ce protocole, entraîne lorsqu'un contact "fort" rompt, une *réaction en chaîne* qui déstabilise l'échantillon numérique.

### Préparation de l'échantillon

#### Compaction-Equilibration

Le protocole de préparation des échantillons numériques [99] est similaire à celui décrit dans les chapitres précédents ; il reproduit la procédure expérimentale de préparation des matériaux granulaires denses [6]. On rappelle, que la procédure consiste à compresser un gaz de particules disposées à l'état initial de façon aléatoire, dans un volume cubique ayant des frontières périodiques. Le système est compressé graduellement dans les trois directions vers un état plus dense

où la fraction volumique de la phase solide  $\phi_s$  atteint une valeur proche de 0.64 (Random Close Packing à 3D) ; A ce stade, la compression est stoppée et le système de particules peut relaxer vers une pression nulle  $p \rightarrow 0$   $\mathcal{Z} \rightarrow 0$ . Les cycles de compression-relaxation sont poursuivis en utilisant un mécanisme de servo-contrôle sur le taux de déformation, jusqu'à ce que la pression souhaitée  $p$  soit atteinte et qu'un état d'équilibre statique soit obtenu ; à l'état d'équilibre, la pression est non nulle, les grains sont comprimés (c'est-à-dire déformés par interpénétration) et par conséquent, la fraction solide est supérieure à la limite du Random Close Packing. Tous les échantillons numériques que nous avons préparés ont une pression moyenne de  $10\text{ MPa}$  à l'équilibre.

### Cimentation

Une fois l'échantillon granulaire compacté et équilibré, nous appliquons la procédure de cimentation qui utilise un générateur aléatoire pour sélectionner parmi l'ensemble des  $n$  contacts ceux qui seront cimentés, et d'attribuer des résistances à ces  $n_c$  contacts en terme d'énergie élastique, en accord avec les fonctions de distribution prescrites ; nous nous sommes inspirés des travaux expérimentaux de Bernabé et coll. [6] où la résistance des contacts cimentés (intégrée sur le volume de l'échantillon) dans des roches synthétiques est considérée en terme énergétique par comparaison des données mécaniques obtenues par des essais de compression triaxiale, sur des échantillons granulaires non cimentés et cimentés. L'énergie nécessaire à la déformation de l'échantillon s'exprime comme :

$$E = \int p d\epsilon_p + q d\epsilon_q \quad (7.15)$$

où  $p = (\sigma_3 + 2\sigma_1)/3$  est la pression moyenne,  $q = \sigma_3 - \sigma_1$  est le déviateur,  $\epsilon_p = \epsilon_3 + 2\epsilon_1$  est la déformation volumique et  $\epsilon_q = 2(\epsilon_3 - \epsilon_1)/3$ .

Dans les simulations présentées dans ce travail, nous avons cimenté tous les contacts intergranulaires présents dans les échantillons ( $n/n = 1$ ), avec une distribution uniforme de résistance de l'énergie élastique qui peut être supportée par le contact en accord avec l'équation (7.1) (voir la figure 7.13).

### 7.3.2 Evolution de la distribution d'énergie élastique et de l'endommagement

Nous présentons maintenant plusieurs simulations de tests de compression triaxiale avec des échantillons de différentes tailles ; les conditions de frontières périodiques sont supprimées dans la direction verticale, et maintenues dans les deux autres directions ; le déformation axiale  $\epsilon_{33}$  est augmentée et la pression de confinement est maintenue constante à  $p_c = 10\text{ MPa}$  sur les faces latérales de l'échantillon, en utilisant le mécanisme de servo-contrôle sur les taux de déformations  $\dot{\epsilon}_{11}$  et  $\dot{\epsilon}_{22}$ . Tous nos tests sont réalisés dans un régime quasi-statique, c'est-à-dire que notre taux de déformation est choisi suffisamment faible, et après chaque rupture de contact cimenté, la procédure d'équilibration permet au système de se relaxer vers un nouvel équilibre, avant que la déformation ne soit poursuivie.

La figure 7.14 présente les histogrammes de l'énergie élastique stockée dans les contacts cimentés (en niveaux de gris) à cinq stades du processus d'endommagement, dans un échantillon de 5000 grains ; l'historgramme des seuils de résistance des contacts (ligne pleine) uniformément distribué entre  $5 \cdot 10^{-6}$  et  $4.5 \cdot 10^{-5} J$  (soit  $\langle \xi \rangle = 2.5 \cdot 10^{-5}$  et  $\Delta_\xi = 2 \cdot 10^{-5}$ ) est également représenté. Le recouvrement des distributions d'énergie élastique et de l'historgramme des seuils de résistance, traduit une rupture possible des contacts cimentés ( $\zeta_k > \xi_k$ ). La rupture ne se produit que lorsque



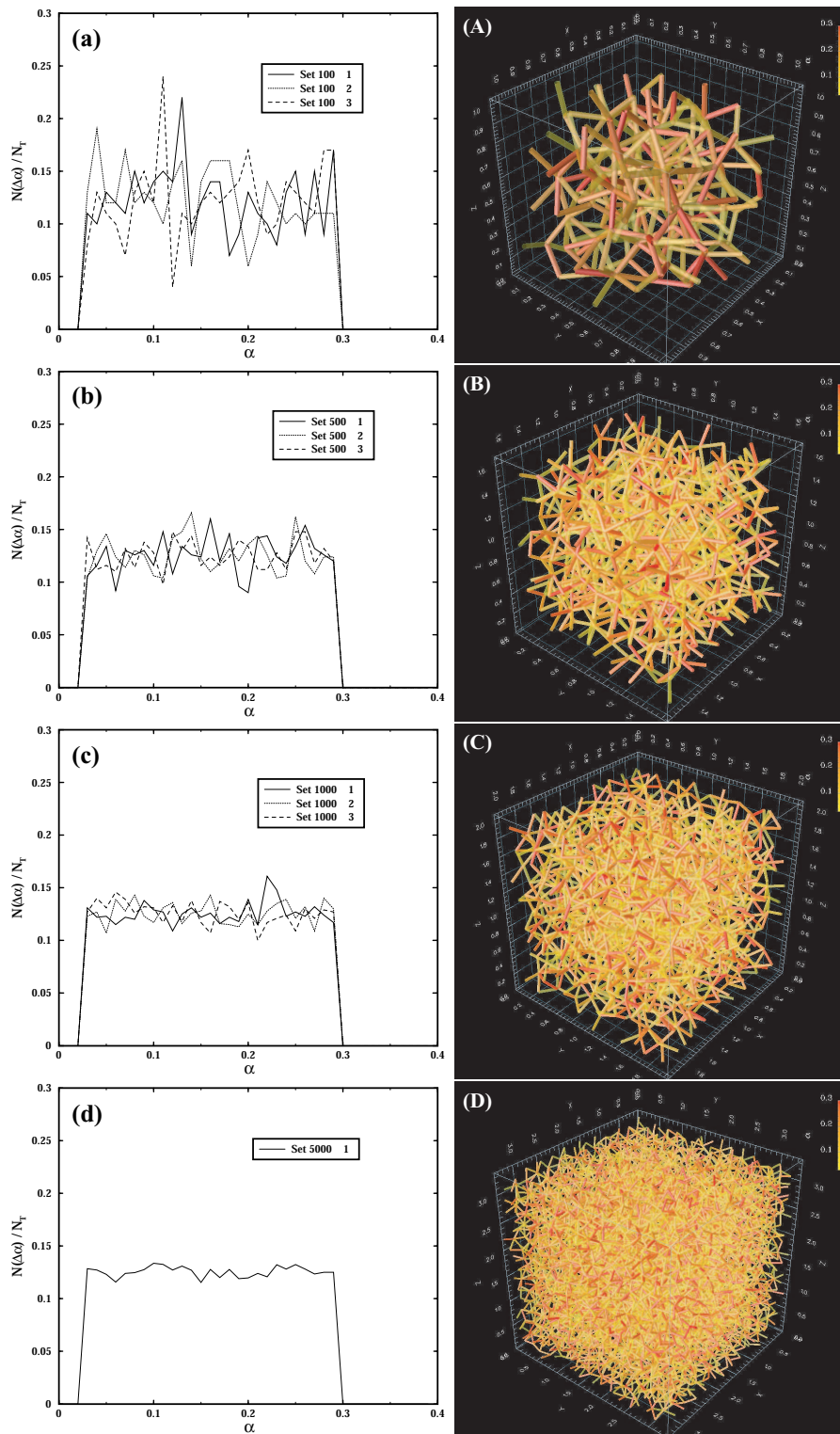


FIG. 7.13 – Hétérogénéité des seuils de résistances  $\mathcal{P}_\xi(x)$  pour des systèmes de  $N = 100$ ,  $N = 500$ ,  $N = 1000$  et  $N = 5000$  particules (soit  $n \approx 630$ ,  $n \approx 3150$ ,  $n \approx 6300$  et  $n \approx 31500$ ) : (à gauche) distribution uniforme des seuils pour trois réalisations différentes, (à droite) localisation spatiale des contacts pour une des trois réalisations : un contact est représenté par un segment tubulaire joignant les centres des particules et l'échelle des couleurs correspond à l'amplitude des seuils de résistance.

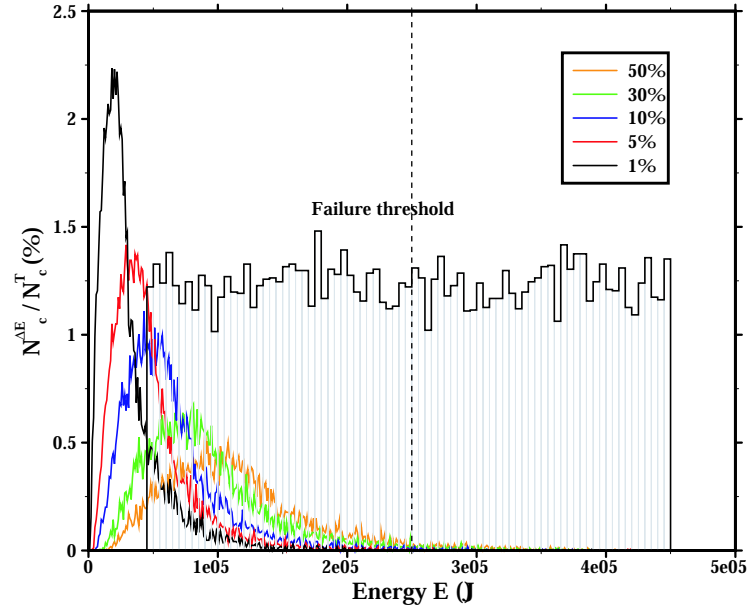


FIG. 7.14 – Histogrammes (courbes) de l’énergie élastique stockée dans les contacts cimentés déformés ( $n_c(\epsilon_{33})/n$ ), pour le système de  $N = 5000$  grains pour une déformation macroscopique croissante correspondant à des stades d’endommagement différents ( $\alpha = 0.01$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $\alpha = 0.1$ ,  $\alpha = 0.3$  et  $\alpha = 0.5$ ), et histogramme des seuils de résistance des contacts ( $\langle \xi \rangle = 2.5 \cdot 10^{-5} J$  et  $\Delta_\xi = 2 \cdot 10^{-5} J$ ).

l’énergie stockée atteint le seuil de rupture au niveau d’un seul et même contact. En d’autres termes, même si les chaînes de forces sont fortement chargées, des contacts “faibles” pourraient subsister dans le système. Les histogrammes de distribution d’énergie ont une forme de type exponentielle tronquée aux petites valeurs, et la valeur moyenne de ces distributions augmente avec la déformation durant le test de compression triaxiale. Les cinq histogrammes correspondent à des étapes consécutives du même test lorsque 1%, 5%, 10%, 30% et 50% des contacts cimentés ont rompu.

### 7.3.3 Endommagement et Pic de contrainte

La figure 7.15 montre les courbes de contrainte-déformation pour quatre échantillons composés de 100, 500, 1000 et 5000 grains. Nous observons que les courbes de contrainte-déformation obtenues par les simulations, sont assez semblables à celles que l’on peut observer dans des expériences de chargement triaxial sur des roches granulaires tendres, avec un faible adoucissement qui débute aux très faibles déformations. L’endommagement commence à apparaître (les premiers contacts à rompre) lorsque la déformation axiale  $\epsilon_{33}$  atteint approximativement la valeur de 1.5%. Les pics de contrainte sont atteints dans un intervalle de déformation allant de  $\epsilon_{33} \approx 3.5\%$  à  $\epsilon_{33} \approx 4.5\%$ . Au pic de contrainte, moins de 10% des contacts cimentés ont rompu dans tous les échantillons.

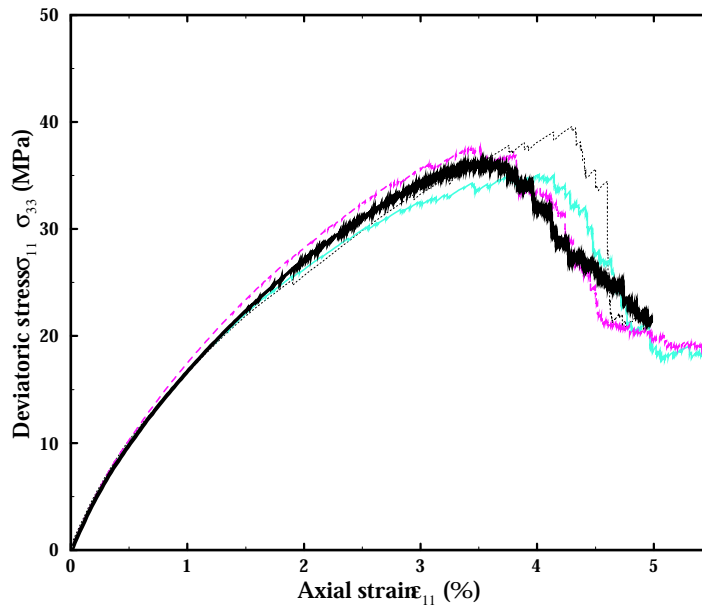


FIG. 7.15 – Courbes de contrainte-déformation pour des systèmes de taille croissante en terme de nombre de particules ( $N = 100$ ,  $N = 500$ ,  $N = 1000$  et  $N = 5000$  grains) dans des tests simulés de compression triaxiale sous une pression de confinement de  $p_c = 10 \text{ MPa}$ ; Les pics de contrainte sont atteints entre  $\epsilon_{33} = 3.5\%$  et  $\epsilon_{33} = 4.5\%$ ; à cet instant, moins de 10% des contacts cimentés sont endommagés dans tous les échantillons.

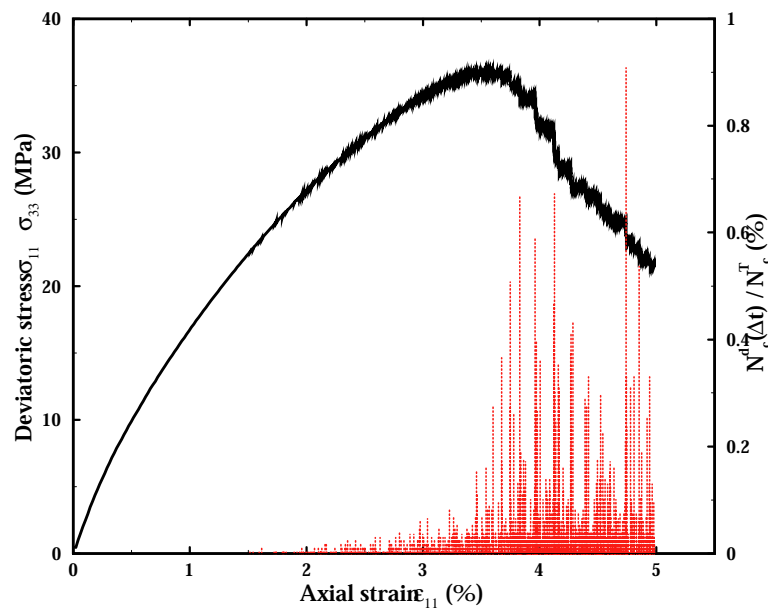


FIG. 7.16 – (a) Courbe de contrainte-déformation pour le système de  $N = 5000$  grains dans un test de compression triaxiale simulé et nombre de contacts rompus par incrément de déformation (impulsions  $n_c^d(\Delta\epsilon_{33})/n(t = t_c)$ ) qui est un analogue numérique simplifié dès l'intensité des émissions acoustiques dans les tests de compression réels.

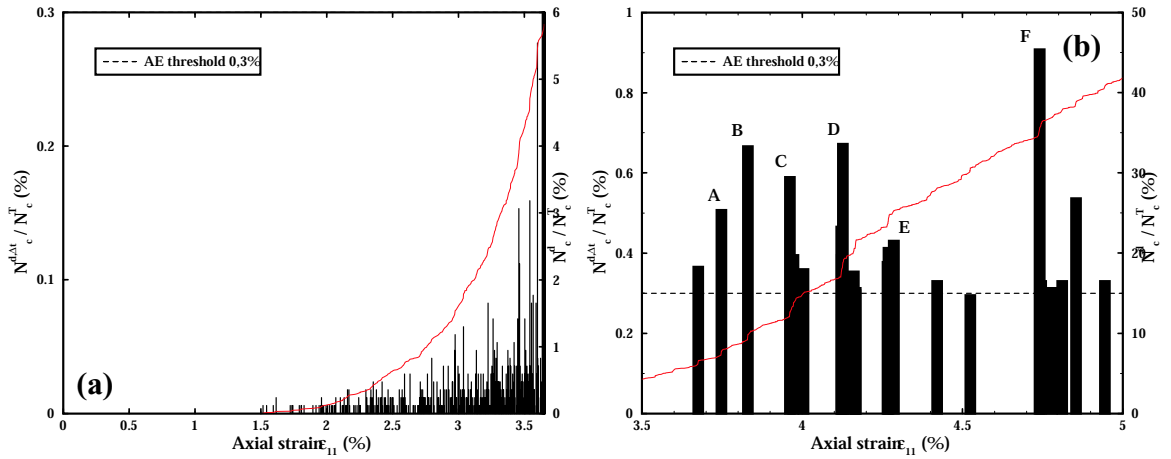


FIG. 7.17 – (a) (à gauche) "émissions acoustiques" (impulsions) dans le régime d'endommagement diffus sur l'intervalle de déformation  $\epsilon_{33} \in [0\%; 3\%]$  (les amplitudes  $n_c^d(\Delta\epsilon_{33})/n(t = t_c)$  y sont inférieures à 0,3% de contacts rompus); (b) (à droite) "émissions acoustiques" dans le régime d'endommagement localisé; sont représenté uniquement les amplitudes supérieures à 0,3% de contacts rompus pour ne pas représenter l'endommagement diffus coexistant; six groupes d'émissions majeures (pics A, B, C, D, E et F) ont été identifiées pour la visualisation graphique; sur ces graphiques, est également représenté, l'endommagement cumulé au cours de la déformation  $n_c^d(\epsilon_{33})/n(t = t_c)$

### 7.3.4 Localisation de l'endommagement

#### Energie acoustique

Dans nos simulations numériques, sous l'effet de la déformation macroscopique, les forces de contact s'intensifient et de l'énergie de déformation est stockée aux contacts. Elle peut éventuellement devenir suffisamment importante pour atteindre le seuil de rupture du contact. Dans le type de modèle numérique utilisé, seule une fraction de l'énergie de déformation stockée au contact est convertie en énergie cinétique lorsqu'il y a une rupture locale; l'amortissement numérique, la friction aux contacts et le transfert d'énergie aux particules voisines, entraînent une certaine perte d'énergie.

Nous avons enregistré l'endommagement à chaque incrément de déformation ainsi que l'endommagement cumulé au cours de la déformation (voir figure 7.16); et nous avons repéré les positions des contacts endommagés.

Sur les figures 7.16 et 7.17(a), on observe au cours de la première phase de déformation de l'échantillon numérique ( $N = 5000$  grains), une montée en charge: le déviateur  $\sigma_{33} - \sigma_{11}$  croît avec un léger adoucissement et nous n'observons pas d'endommagement; ce n'est que vers  $\epsilon_{33} \approx 1.5\%$  que les premiers contacts cimentés commencent à rompre; on poursuit la déformation, l'adoucissement se prononce et l'intensité des "émissions acoustiques" augmente; le pic de contrainte est atteint un peu après 3.5% de déformation, et c'est à partir de cet instant que les amplitudes des pics "d'émission acoustiques" deviennent très importantes. Globalement à l'approche du pic de contrainte, on était plutôt sous 0.1% de contacts endommagés par incrément de déformation et après le pic, on observe de nombreux pics d'amplitude supérieure à 0.3%.

Pour faciliter la visualisation au niveau du pic de contrainte et dans la phase de déformation postérieure, nous avons donc défini un seuil à 0.3% de contacts endommagés par incrément de déformation, afin de ne repérer que les pics d'endommagement les plus importants (voir

figure 7.17(b)). Sur l'ensemble de ces pics, nous avons sélectionné 6 groupes que nous référençons comme  $A, B, C, D, E,$  et  $F$  par ordre de déformation croissante.

Nous allons maintenant étudier les caractéristiques de l'endommagement (intensité et distribution spatiale) sur ces deux intervalles de déformation ; premièrement de 0% à 3.5%, à l'approche du pic, et deuxièmement de 3.5% à  $\approx 5\%$ . Nous allons constater que dans la première phase, l'endommagement est distribué spatialement de façon homogène, il a un caractère diffus et il est de faible intensité. Ensuite, nous observons un autre régime d'endommagement ; il devient localisé spatialement et s'organise selon des clusters ; nous parlerons alors d'endommagement groupé. La transition entre ces deux régimes d'endommagement intervient au niveau du pic et de la chute de contrainte consécutive, qui traduit habituellement la localisation de la déformation.

Pour ces deux phases de déformations et de régimes d'endommagement, nous présentons les courbes d'endommagement cumulé au cours de la déformation (figure 7.18 pour l'endommagement diffus et figure 7.20 pour l'endommagement groupé) ; nous visualisons également dans l'espace tri-dimensionnel du volume de l'échantillon, la position des contacts endommagés en suivant la courbe de l'endommagement cumulé (figure 7.19 pour l'endommagement diffus et figure 7.21 pour l'endommagement groupé). La phase de déformation où l'endommagement est diffus correspond à un endommagement cumulé allant de 0% à 6% ; au-delà, c'est le régime d'endommagement groupé, et nous nous intéresserons uniquement aux pics "d'émissions acoustiques" ; pour chaque groupe de pics, nous décomposons l'endommagement cumulé en différentes sections ce qui permet d'obtenir une visualisation plus efficace des *clusters* de contacts endommagés.

## Endommagement diffus

Sur la figure 7.18 représentant l'endommagement cumulé dans l'échantillon numérique au cours de la déformation jusqu'à l'approche du pic de contrainte, on constate que globalement les amplitudes des "émissions acoustiques" augmentent (c'est-à-dire que le taux d'endommagement croît avec la déformation), mais elles restent de faible intensité. En visualisant les positions des contacts qui ont subi la rupture pendant cette phase de déformation, voir figure 7.19, nous constatons que l'endommagement est réparti de façon homogène dans le volume de l'échantillon ; au cours d'un incrément de déformation, les contacts endommagés sont répartis spatialement loin les uns des autres, ce qui tend à confirmer l'hypothèse que l'on avait posée dans notre modèle statistique, selon laquelle, pendant la phase initiale de l'endommagement, les contacts peuvent être considérés indépendamment les uns des autres ; l'environnement (état de contrainte locale) de chaque contact cimenté n'est fonction que de la déformation macroscopique imposée ; les redistributions de contraintes lorsqu'elles ont lieu (rupture d'un contact), sont de faibles intensités et ne contribuent pas encore à l'endommagement des autres contacts.

L'hypothèse à la base de notre modèle est donc vérifiée, et nous constatons avec satisfaction que même pour un état de déformation avancé proche du pic de contrainte, les redistributions de contraintes ne semblent pas jouer un rôle très important (moins de 10% des contacts sont endommagés, 6% pour la simulation présentée), et que le régime d'endommagement est essentiellement guidé par la statistique des chaînes de forces et des caractéristiques de l'hétérogénéité de cimentation.

En revanche, lorsqu'on se trouve très proche du pic de contrainte, l'endommagement évolue très rapidement vers un autre régime, et le taux d'endommagement croît de façon très importante. A ce stade, la limite de notre modèle est atteinte.

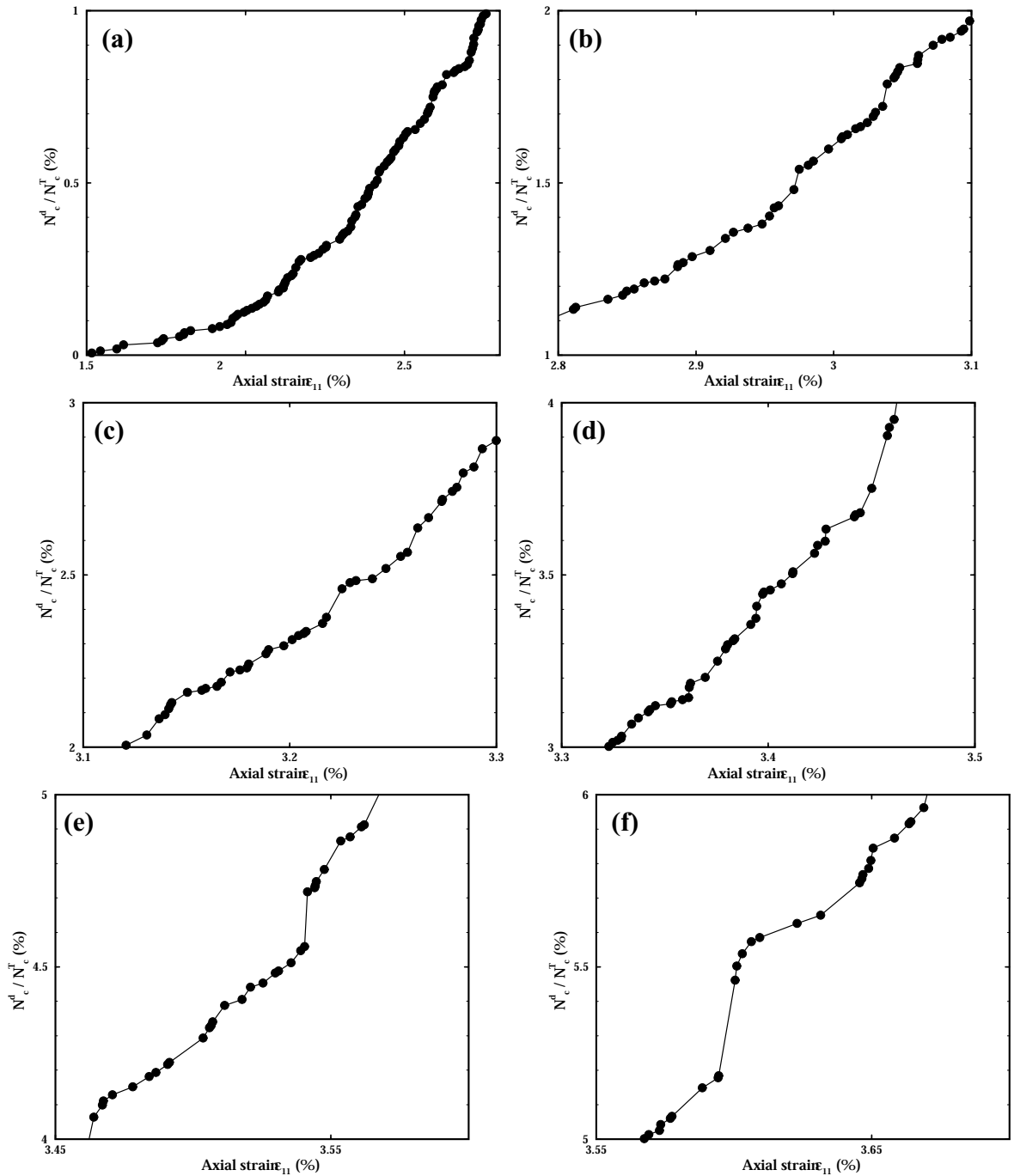


FIG. 7.18 – Endommagement cumulé (c'est-à-dire, pourcentage de contacts cimentés ayant rompus) dans l'échantillon de plus grande taille  $N = 5000$  grains en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{11}$  : (a) de 0% à 1%, (b) de 1% à 2%, (c) de 2% à 3%, (d) de 3% à 4%, (e) de 4% à 5%, (f) de 5% à 6% de contacts endommagés ; l'évolution de l'endommagement cumulé sur cet intervalle de déformation (de 0 à  $\approx 3.5\%$ ) est plutôt linéaire, traduisant l'absence de forte activité d'endommagement.

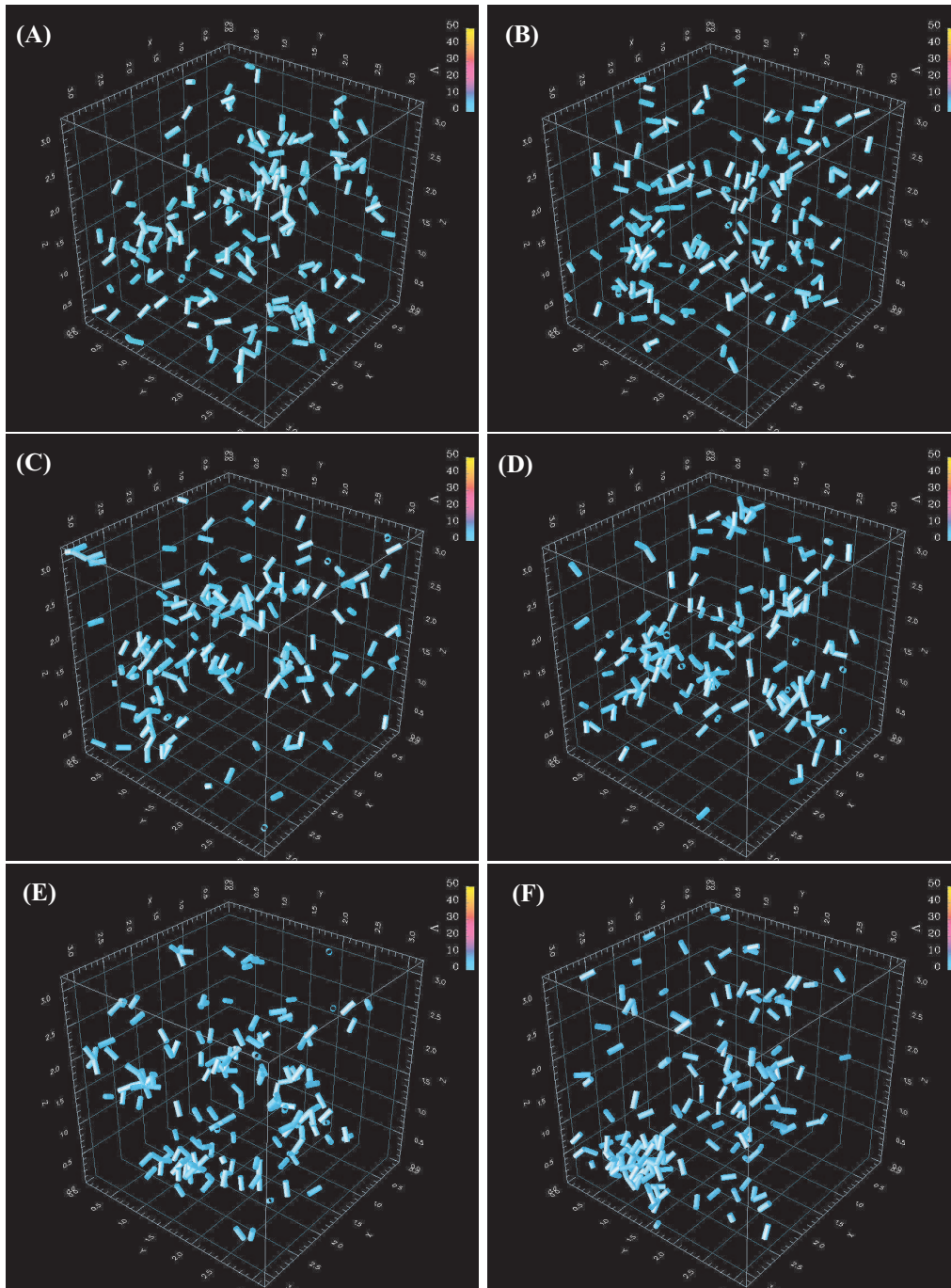


FIG. 7.19 – Localisation de l'endommagement dans l'échantillon de plus grande taille  $N = 5000$  grains : les contacts cimentés ayant rompus sont représentés par un segment tubulaire joignant les centres des deux grains concernés, et l'échelle de couleur représente la valeur de l'endommagement cumulé en pourcentage. On constate que de 0% à  $\approx 6\%$  d'endommagement cumulé (c'est-à-dire, de 0% à  $\approx 3.5\%$  de déformation axiale), l'endommagement est diffus, uniformément réparti dans l'échantillon.

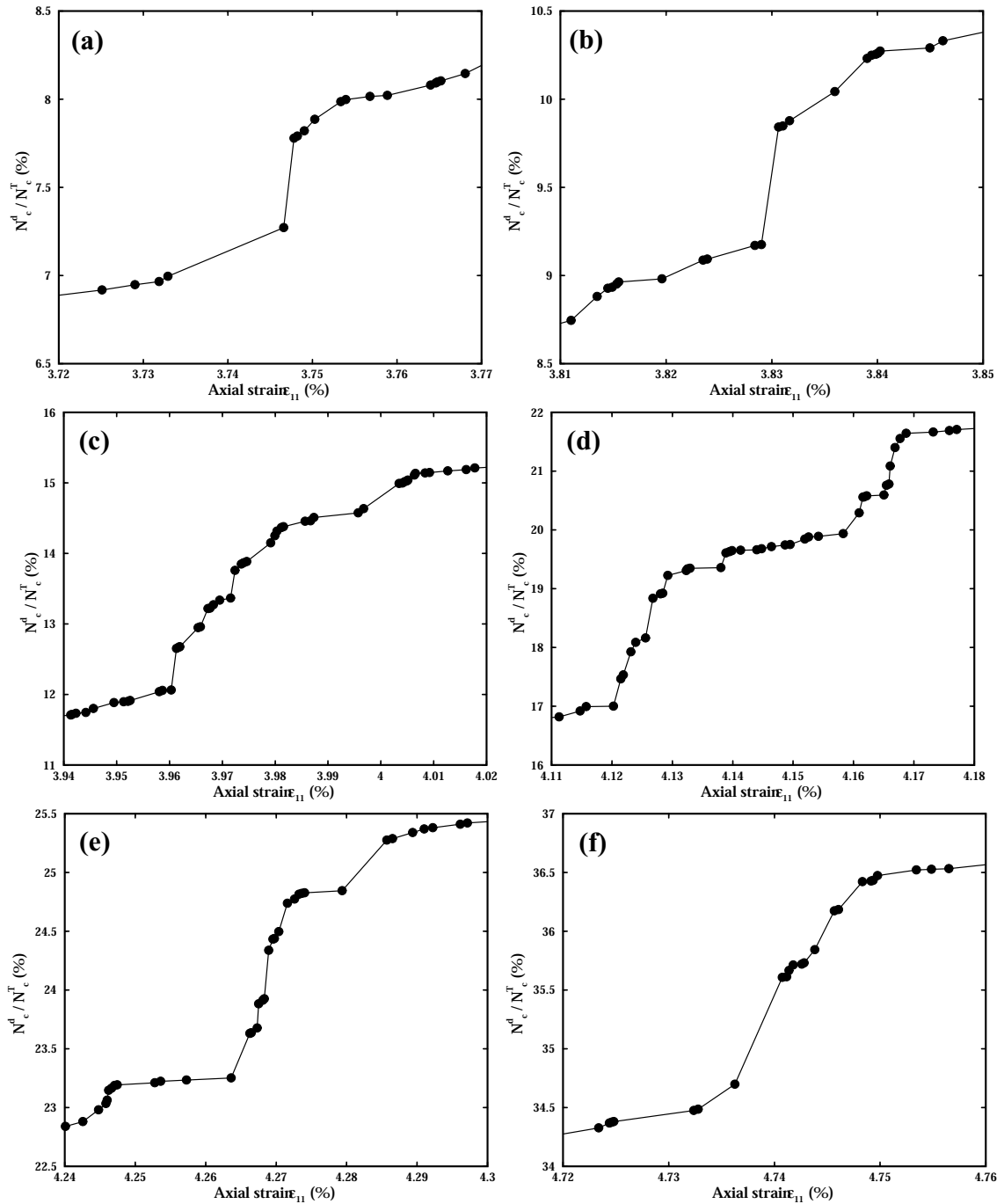


FIG. 7.20 – Endommagement cumulé (c'est-à-dire le pourcentage de contacts cimentés ayant rompus) dans l'échantillon de plus grande taille  $N = 5000$  grains en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{11}$  : pics d'endommagement identifiés (a) (A), (b) (B), (c) (c), (d) (D), (e) (E), et (f) (F) ; l'évolution de l'endommagement cumulé sur cet intervalle de déformation (de  $\approx 3\%$  à  $\approx 5\%$ ) se caractérise par des sauts de 1% à 3% d'endommagement cumulé.



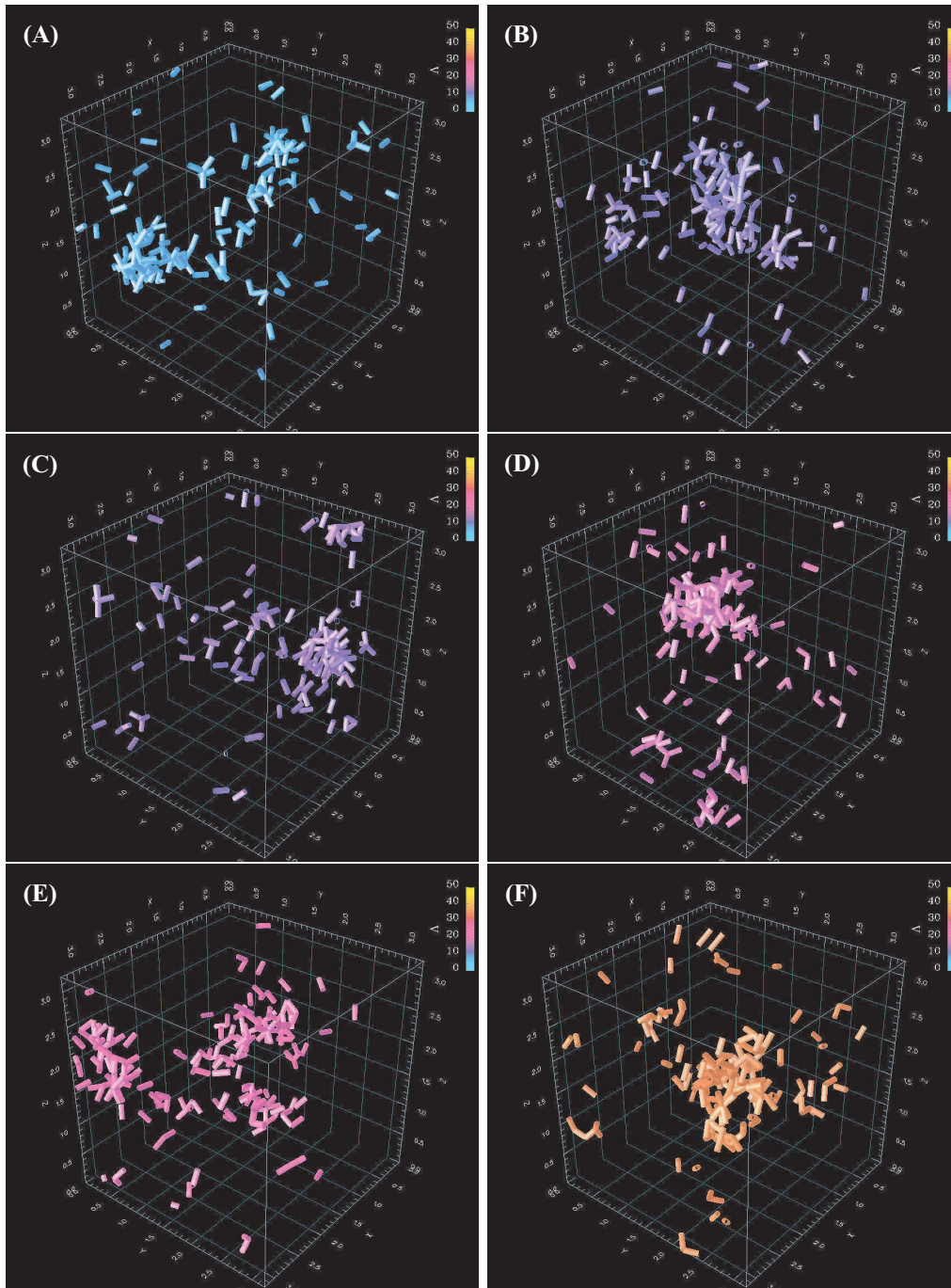


FIG. 7.21 – Localisation de l'endommagement dans l'échantillon de plus grande taille  $N = 5000$  grains. On constate que de  $\approx 3.5\%$  à  $\approx 5\%$  de déformation axiale, l'endommagement se localise pour certains incréments de déformation; Les figures représentent les contacts ayant rompus au cours des pics "d'émission acoustique" (a) *A*, (b) *B*, (c) *C*, (d) *D*, (e) *E* et (f) *F* (voir figure 7.17); ces contacts sont regroupés en amas répartis dans l'échantillon, et une composante d'endommagement diffus est toujours présente.

## Endommagement groupé

On a vu que le pic de contrainte est atteint un peu après 3.5% de déformation ; les amplitudes des pics "d'émission acoustiques" deviennent importantes, et on a identifié six pics d'émissions majeurs (sur le critère d'amplitude supérieure à 0.3%) référencés de *A* à *F*.

Sur la figure 7.20 représentant l'évolution de l'endommagement cumulé dans l'échantillon numérique au cours de la déformation au niveau des six pics "d'émissions acoustiques" majeures, on constate qu'il progresse par saut important (entre 1% et 3% du nombre total de contacts)

En visualisant les positions des contacts qui ont subi la rupture pendant chaque pic "d'émissions acoustique", (voir figure 7.21), nous constatons, que à présent, l'endommagement est réparti de façon très hétérogène dans le volume de l'échantillon ; les contacts endommagés sont regroupés spatialement selon des amas ; en réalité nous ne montrons pas tous les contacts endommagés au cours d'un pic d'émissions, mais seulement une partie (entre un tiers et une moitié) pour avoir une visualisation plus nette du caractère localisé de l'endommagement. Le caractère diffus de l'endommagement ne semble pas avoir complètement disparu, et une partie des contacts semble toujours répartie de façon homogène dans le volume.

Plus la déformation devient importante, plus les intensités des forces de contact augmentent, et plus les contacts de fortes résistances sont susceptibles de rompre ; une fraction importante de l'énergie stockée à ces contacts est alors transférée aux contacts voisins qui, à leur tour s'approchent de leur seuil de résistance. Cette redistribution locale des contraintes dans le matériau est probablement à l'origine de ces amas de rupture. Plus la déformation est importante, plus l'énergie stockée aux contacts est importante, et plus forte sera la redistribution des contraintes lors de la rupture. Les contacts, en grande majorité, ne peuvent plus être considérés comme indépendants les uns des autres. Chaque contact voit son environnement local modifié de façon importante par l'évolution des autres contacts dans son voisinage. Il est évident que dans ce régime d'endommagement, notre modèle statistique n'est plus valide, puisque l'hypothèse sur laquelle il repose, n'est plus vérifiée.

## Localisation macroscopique

A l'aide de ces visualisations tri-dimensionnelles, nous avons mis clairement en évidence une transition du régime d'endommagement au cours de la déformation ; on a un mode d'endommagement diffus, depuis les faibles déformations (initiation de l'endommagement à  $\epsilon_{33} \approx 1.5\%$ ) jusque très proche du pic de contrainte ( $\epsilon_{33} \approx 3.5\%$ ), où les contacts endommagés sont distribués de façon relativement homogène au sein de l'échantillon ; on passe ensuite très rapidement à un mode d'endommagement groupé, au niveau du pic de contrainte, où les contacts endommagés sont regroupés spatialement en amas.

Il serait intéressant d'étudier l'organisation dans l'espace de ces clusters de contacts, pour savoir s'il existe des corrélations spatiales, et surtout si il est possible de les aligner dans l'espace, selon un ou plusieurs plans. D'une part, il y a la difficulté de visualisation imposée par la géométrie *3D* (même avec l'aide de cette représentation il est difficile de trouver un alignement des amas) et, d'autre part, cette géométrie impose des tailles de systèmes réduites ; en effet, la capacité de puissance de calcul à notre disposition lors de ce travail, était insuffisante pour modéliser des échantillons de taille plus importante que 5000 grains, et les dimensions du système sont donc de l'ordre de 17 grains de côté. Il est donc possible que cette taille réduite de système soit insuffisante pour observer un phénomène de localisation ; si dans le chapitre précédent, on avait bien obtenu une localisation dans une géométrie *2D*, la taille de système était de l'ordre de 100 grains de côté pour une bande de localisation d'épaisseur de 3 – 5 tailles de grains ; par ailleurs, l'emploi

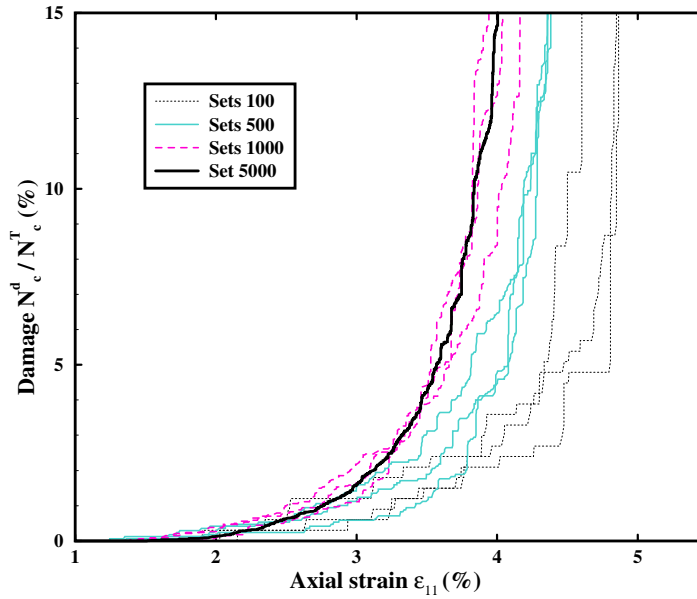


FIG. 7.22 – Evolution de l'endommagement (fraction des contacts ayant rompu) en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{33}$  pour des systèmes de différentes tailles :  $N = 100$ ,  $N = 500$ ,  $N = 1000$  et  $N = 5000$  grains (soit un facteur trois de taille entre le plus petit et le plus grand) ; pour chacune des tailles, on montre les résultats des simulations pour trois échantillons préparés indépendamment (à l'exception de la taille  $N = 5000$  grains, pour laquelle un seul échantillon a été testé) sont présentés ; on observe un *shift* des courbes vers la gauche, c'est-à-dire vers les plus petites déformations, lorsque la taille de système augmente.

dans cette étude de conditions de frontières périodiques pourrait également poser problème sur un échantillon de petite taille.

### 7.3.5 Effet d'échelle de l'endommagement

La dépendance de l'intensité de l'endommagement, en fonction de la taille des échantillons testés est analysée en relation avec les prédictions de notre modèle statistique, décrit au début de ce chapitre. Nous rappelons que ce modèle repose sur l'hypothèse d'indépendance entre les contacts et par conséquent, si nous voulons comparer les résultats de nos simulations avec les prédictions du modèle statistique, nous devons considérer l'endommagement précoce de l'échantillon, c'est-à-dire dans le premier stade de déformations, lorsque la concentration des contacts ayant rompu est encore faible (quelques pour-cent).

Une des prédictions importantes du modèle avec le critère d'endommagement  $I$ , est la dépendance de la probabilité d'initiation de l'endommagement, en fonction de la taille de l'échantillon (nombre de contacts  $n$ ) mais également, de l'hétérogénéité de la cimentation  $\Delta_\epsilon$  : l'initiation de l'endommagement dans un échantillon de grande taille est plus probable que dans un échantillon de petite taille pour des propriétés de matériau donné et les conditions de chargement identique. Nous avons également montré que les prédictions du modèle avec le critère d'endommagement  $II$ , basé sur la rupture d'une fraction de contacts  $\alpha n$ , étaient qualitativement similaires.

Nous représentons dans la figure 7.22 le pourcentage de contacts cimentés endommagés, comme une fonction de la déformation uniaxiale  $\epsilon_{33}$ , pour quatre échantillons de tailles différentes. Les résultats des simulations, pour trois échantillons de chaque taille préparés indépendamment,

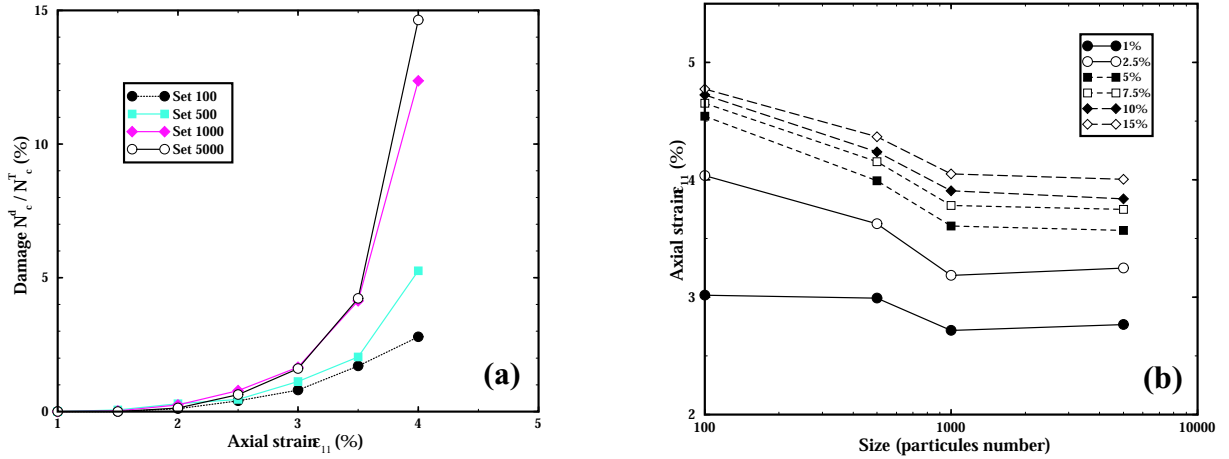


FIG. 7.23 – Mise en évidence de l’effet d’échelle de : (a) pourcentage de contacts endommagés à un état de déformation axiale  $\epsilon_{33}$  donné (de  $\approx 0\%$  à  $4\%$ ), comme fonction de la taille de système ; (b) déformation axiale  $\epsilon_{33}$  pour laquelle un pourcentage donné de contacts endommagés est atteint (de  $1\%$  à  $\approx 15\%$ ), comme fonction de la taille de système  $N$  (nombre de grains) ; pour une taille suffisamment grande, l’effet d’échelle ”sature” ; dans nos simulations, la saturation intervient pour  $N = 1000$  grains.

(excepté pour la taille de système correspondante à 5000 grains, pour lequel nous n’avons étudié qu’un échantillon) sont montrés dans la figure en utilisant le même style de ligne.

Tous les échantillons ont été préparés en utilisant les mêmes valeurs de constantes élastiques pour le matériau des grains et du ciment, et la même distribution des seuils de résistance des contacts. De cette façon, la seule différence entre les échantillons de même taille vient des séquences indépendantes, issues des générateurs de nombres aléatoires, utilisées pour affecter les positions initiales des particules (avant la compaction) et pour les procédures de cimentation. On peut observer, que les échantillons les plus petits atteignent un degré d’endommagement en moyenne plus tard dans le processus de déformation que les grands échantillons, ce qui est consistant avec les prédictions de notre modèle d’endommagement statistique. On peut formuler ceci également de la façon suivante : pour une déformation donnée, les échantillons plus petits ont en moyenne une plus faible concentration de contacts endommagés.

Ces observations sont illustrées dans les figures 7.23 (a) et (b), où on montre la valeur de la déformation  $\epsilon_{33}$  pour laquelle un pourcentage fixe de contacts endommagés est atteint (de  $1\%$  à  $15\%$ ) comme une fonction de la taille d’échantillon  $N$ .

On peut noter que pour ce choix particulier de valeurs des paramètres du modèle, la dépendance d’échelle de l’endommagement observée sature au-delà de  $N = 1000$  grains. On peut considérer dans ces conditions, que les simulations de systèmes contenant au moins ce nombre de particules sont représentatives du point de vue des propriétés des matériaux granulaires cimentés et ne sont pas biaisés par un effet de taille d’échantillon.

Remarquons que la taille critique de système au-delà de laquelle l’effet d’échelle sature (environ 1000 grains dans notre exemple), est une fonction des paramètres du modèle ; elle dépend en particulier des paramètres d’hétérogénéité de cimentation (valeur moyenne  $\langle \xi \rangle$  et largeur  $\Delta \xi$  des seuils de résistances).

En général, les matériaux fortement hétérogènes nécessiteront des échantillons de taille plus importante, pour rendre les tests simulés représentatifs.

Nous avons délibérément choisi les paramètres des simulations de telle façon que la taille

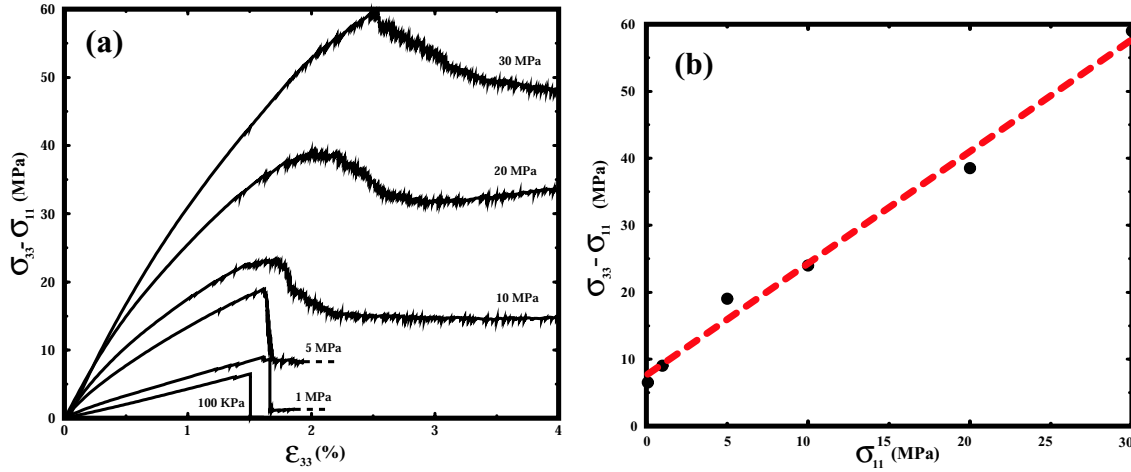


FIG. 7.24 – (a) Courbes de contrainte-déformation : déviateur  $\sigma_{33} - \sigma_{11}$  en fonction de la déformation axiale  $\epsilon_{33}$  pour un système de  $N = 5000$  grains, dans un test de compression triaxiale simulé et pour différentes pressions de confinement  $p_c$  allant de 100 KPa à 30 MPa; chaque système a été préparé à la pression d'équilibre correspondant à la pression de confinement utilisée lors du test de compression triaxiale; (b) évolution linéaire de l'amplitude du pic de contrainte  $(\sigma_{33} - \sigma_{11})^{max}$  avec la pression de confinement  $\sigma_{11} = p_c$ .

critique du système pour laquelle la dépendance d'échelle sature, correspond à un nombre de grains relativement petit. Nous pouvons donc simuler les échantillons dont les volumes diffèrent par un facteur de  $\approx 50$ , et en même temps éviter des simulations de larges systèmes, coûteuses en terme de temps de calcul.

Nous voudrions faire remarquer que, de façon étonnante, si l'on regarde la figure 7.22, on constate que l'effet d'échelle prédit par le modèle statistique, semble toujours fonctionner au-delà de 3.5% de déformation axiale et de 6% de contacts endommagés; au-delà, comme nous l'avons vu, le régime d'endommagement a un caractère groupé relativement fort, et nous pensons que les prédictions de notre modèle seraient alors mises à défaut; il est possible que la composante d'endommagement diffus subsistant à ce stade de la déformation permette de reproduire la prédiction du modèle; en réalité très rapidement après 4% de déformation (cela n'est pas montré sur les figures), les simulations ne rendent plus compte des prédictions du modèle comme l'on pouvait s'y attendre; le modèle proposé semble donc être en mesure de prédire, encore correctement, les propriétés d'endommagement un peu après que le pic de contrainte soit atteint, ce qui n'était pas du tout évident de part l'hypothèse forte posée sur la non interaction des contacts aux cours de l'endommagement.

### 7.3.6 Effet de la Pression de Confinement

Nous avons par la suite conduit des simulations en faisant varier la pression de confinement sur des systèmes de taille identique ( $N = 5000$  grains); la plus faible pression de confinement que nous avons utilisée est  $p_c = 100$  KPa et la plus forte est  $p_c = 30$  MPa. Préalablement, nous avons donc préparé chaque système à l'équilibre statique à une pression  $p_0$  correspondante à la pression de confinement, que nous souhaitons utiliser pour l'expérience de compression triaxiale numérique. Chaque système a ensuite été cimenté de la même façon, c'est-à-dire en utilisant la même distribution de seuils de rupture ( $\langle \xi \rangle$ ,  $\Delta_\xi$ ). Nous avons ensuite chargé axialement ces systèmes en utilisant le même taux de déformation  $\dot{\epsilon}_{33}$ .

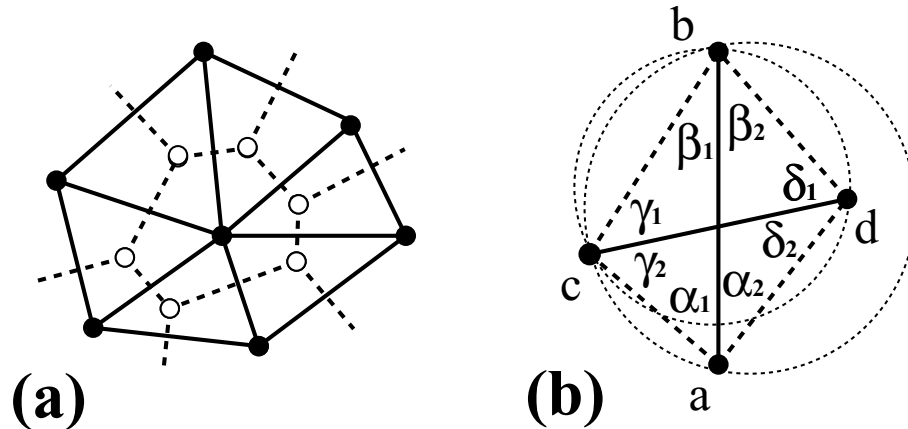


FIG. 7.25 – Méthode de triangulation : diagrammes complémentaires de Voronoï (trait pointillé) et de Delaunay (trait plein) à gauche, et à droite construction par la méthode de 'Flipping Edge' qui maximise l'angle minimal des couples de triangles  $bca - adb$  où  $bcd - cda$ .

Sur la figure 7.24(a), nous observons que le comportement du matériau granulaire est différent en fonction de la pression de confinement employée. Les échantillons sous pression de confinement faible atteignent le pic de contrainte plus tôt au cours de la déformation, que les échantillons chargés sous forte pression de confinement. D'autre part, la valeur maximale atteinte par la contrainte déviatorique est plus importante lorsque la pression de confinement est plus forte comme on pouvait s'y attendre ; la résistance augmente avec la pression de confinement. Enfin, le comportement à la "rupture" est également très différent ; aux faibles pressions de confinement, la chute de contrainte est brutale alors qu'aux pressions de confinement plus importantes, on observe un adoucissement de la courbe à l'approche du pic de contrainte, puis une chute répartie de façon plus homogène au cours de la déformation après le pic .

### 7.3.7 Modèle statistique et pression

Nous avons vu dans le chapitre 4, que la pression de la préparation initiale pouvait avoir une influence non négligeable sur la forme de la distribution des intensités des forces de contact dans un matériau granulaire ; il est probable qu'à plus forte pression, la distribution des forces tende à s'homogénéiser (transition d'une distribution exponentielle vers une distribution gaussienne) ; on pourrait donc imaginer, de calculer notre modèle statistique, sur la base d'une distribution de forces gaussienne.

### 7.3.8 Membrane flexible aux frontières

Nous avons développé un algorithme de membrane flexible 3D (voir figure 7.26) en géométrie cylindrique, sur le même modèle que celui présenté dans le chapitre 6 en géométrie 2D. La géométrie 3D pose des difficultés non triviales : la membrane flexible doit être à présent modélisée comme une surface déformable et un algorithme de triangulation efficace doit être utilisé.

Etant donné un nombre fini de points dans un plan (les centres des particules les plus extérieures), l'idée est d'assigner à chaque point une région d'influence de telle façon que ces régions décomposent le plan ; ces régions de Voronoï avec leurs arêtes et leurs sommets forment un diagramme de Voronoï.



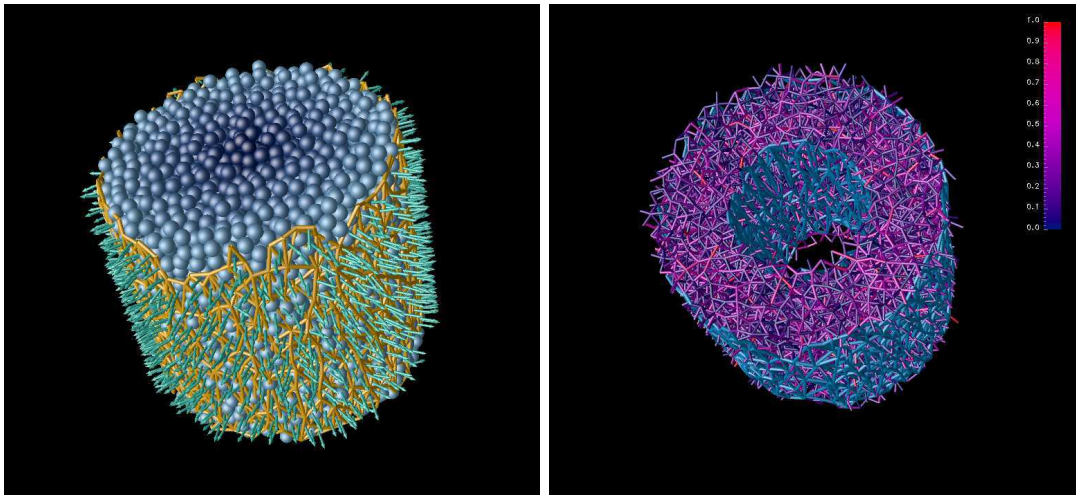


FIG. 7.26 – Membranes flexibles en géométrie cylindrique : (a) membrane externe de confinement d'un échantillon granulaire, où les vecteurs unités normaux des éléments de surfaces triangulaires la constituant sont représentés (ils donnent les directions locales d'application des forces) ; (b) membranes internes et externes, et réseau de forces de contact dans un échantillon granulaire confiné.

La triangulation de Delaunay (voir figure 7.25 (a)) est obtenue en construisant le diagramme complémentaire, en traçant une arête de Delaunay connectant les points à l'origine de deux régions de Voronoï partageant une arête de Voronoï commune. On obtient alors des régions triangulaires de Delaunay, dont les sommets sont les points à l'origine des régions de Voronoï.

L'algorithme utilisé pour construire la triangulation de Delaunay à partir du jeu de points prédéterminé est le plus classique, la méthode de 'Flipping Edge' (voir figure 7.25 (b)) qui repose sur le fait que, parmi toutes les triangulations possibles d'un jeu de points, la triangulation de Delaunay maximise l'angle le plus petit.

Cette surface triangulée doit être mise à jour régulièrement sur la base d'un critère simple, par exemple un nombre défini de cycles de calcul, ou bien plus évolué.

Une fois la surface triangulée, il est possible de calculer sur chaque noeud (i.e., une particule) une force dont la valeur est fonction à la fois : de la pression de confinement  $p_c$ , et des aires des triangles associés à cette particule ; la direction de cette force, sera la somme vectorielle des vecteurs normaux unités de chaque triangle vers l'intérieur du système.

Nous pensons utiliser à l'avenir cet algorithme de membrane 3D dans des simulations numériques de compression triaxiale, afin de reproduire les processus de localisation de la déformation observés dans le chapitre 6 en géométrie 2D.

## 7.4 Conclusions

Nous avons proposé un modèle statistique d'endommagement de roches granulaires qui prend en compte une distribution de ciment inégale, et une distribution de force fortement hétérogène dans l'échantillon sous l'action du chargement extérieur. Combiné avec un simple critère d'endommagement applicable aux premiers stades de l'endommagement, le modèle prédit une dépendance explicite des probabilités d'endommagement, sur la taille de l'échantillon, et sur l'hétérogénéité de cimentation. Ainsi, sous des conditions similaires de chargement, la probabilité de rupture d'une fraction donnée de contacts cimentés est plus faible pour des petits échantillons. Ceci signifie

que les tests réalisés sur des petits échantillons sous-estimeraient le degré d'endommagement qui pourrait avoir lieu sous des conditions similaires dans des échantillons plus grands d'un matériau identique.

Nous avons développé un modèle numérique de roches granulaires (les contacts inter-granulaires sont cimentés) basé sur l'approche de la dynamique moléculaire, conçue initialement pour l'étude des milieux granulaires non consolidés.

Nous avons vu, que les distributions de l'énergie élastique stockée dans les contacts cimentés mesurées dans les simulations numériques, au cours des expériences de chargement, sont qualitativement assez similaires aux distributions des amplitudes de forces observées dans les matériaux granulaires sous compression ; cette distribution des forces de contact est connue pour suivre une loi décroissante exponentielle tronquée.

Les prédictions de notre modèle statistique concernant l'effet d'échelle de l'endommagement sont confirmés par nos simulations numériques. L'effet d'échelle est observé pour la déformation nécessaire, pour produire un certain degré d'endommagement dans l'échantillon, ainsi que pour le nombre de contacts endommagés pour un état de déformation donné.

Nous n'avons pas observé de dépendance d'échelle significative du pic de contrainte dans nos simulations ; en effet, la différence entre le pic de contrainte du plus petit système 100-grains et du plus grand système 5000-grains est approximativement de 10%, comme on peut le voir sur la figure 7.15. Il est vrai que nous n'avons à notre disposition qu'une faible moyenne statistique, ne disposant que de trois réalisations sur les plus petits systèmes, et une seule réalisation sur le plus gros système.

Une explication possible serait que la résistance de l'échantillon proche du pic de contrainte, est essentiellement dominée par la localisation de la déformation et de l'endommagement, dans des structures de type bandes de cisailantes ou compactantes s'exprimant sur l'ensemble de l'échantillon. A ce stade de la déformation, les mécanismes de l'endommagement sont très différents de celui décrit dans notre modèle (voir le chapitre 6).

L'effet d'échelle décrit, mis en évidence à la fois par les modèles statistiques et par les simulations numériques, devrait être pris en compte dans l'interprétation des simulations numériques des matériaux granulaires, comme dans les tentatives d'extrapolation des propriétés mécaniques, et des propriétés de transport des roches granulaires, depuis le laboratoire vers les grandes échelles.





## E

*Modeling of Scale Effects of Damage  
in Cemented Granular Rocks*, *Physic  
and Chemistry of the Earth (A)*, 26, 83,  
2001



Pergamon

*Phys. Chem. Earth (A)*, Vol. 26, No. 1–2, pp. 83–88, 2001  
 © 2001 Elsevier Science Ltd  
 All rights reserved  
 1464-1895/01/\$ - see front matter

PII: S1464-1895(01)00027-8

## Modeling of Scale Effects of Damage in Cemented Granular Rocks

D. Pisarenko and N. Gland

Ecole Normale Supérieure, Laboratoire de géologie, Paris, France

Received 30 June 2000; accepted 6 November 2000

**Abstract.** We propose a probabilistic model of cemented granular material consisting of elastic grains and of weak brittle cement which may be present in contacts between grains. The central assumption of the model is that the damage of such a material under the effect of external mechanical loading is principally controlled by the two following factors: 1) heterogeneous distribution of cement in the sample; and 2) heterogeneous (typically exponential) distribution of inter-granular forces and the associated elastic energy produced by the macroscopic strain. These assumptions, which can be justified by direct observations in granular rock (Menéndez et al., 1996) and by experimental and numerical studies of force distributions in granular media (Mueth et al., 1998; Makse et al., 2000), combined with a simple fracture criterion for a single cemented contact, lead to a percolation-type damage behavior. An important feature of the proposed model is an explicit scale dependence of certain macroscopic damage parameters for a material with fixed microscopic properties and given distributions of heterogeneities. This scale dependence may be important for interpretation of numerical simulations of granular materials using a moderate number of grains, as well as in attempts to extrapolate damage criteria in rock from laboratory to larger scales. The predictions of the probabilistic damage model are qualitatively confirmed by 3D numerical simulations using a Discrete Element Model of cemented granular material.

© 2001 Elsevier Science Ltd. All rights reserved.

### Introduction

Most of laboratory studies of mechanical properties of rock are done with quite small rock samples. Due to experimental constraints, typical linear dimensions of the sample are of the order of centimeters, or at most few tens of centimeters. At the same time, heterogeneities and discontinuities of different nature in rocks are known to spread over a broad range of scales (Main, 1996), which gives rise to the question whether

Correspondence to: D. Pisarenko

the mechanical properties measured on a small sample can be representative of a bigger rock mass. Such scale dependence of mechanical properties of rocks was observed experimentally and a number of statistical and mechanical models were suggested in order to explain it (see Paterson (1978) and references therein). Another aspect of the same problem is related to the numerical simulations of rocks using a particle-based approach (Cundall and Strack, 1979). Computational limitations on the number of particles may lead in such simulations to biased results due to finite-size effects.

In the present paper we address the problem of the scale dependence of certain characteristics of damage in cemented granular rock. We study it with the help of a simple probabilistic model, and then verify the predictions of our model using 3D numerical simulations of a cemented granular material.

### The model

Let us consider a model of cemented granular rock which consists of a set of elastic spheres confined within a given volume  $V$  so that there exist  $n$  contacts between the spheres. Each contact is assumed to have a certain strength with respect to normal and tangential loading which depends on the elastic constants of the material and on the presence of cement in the contact. We consider a triaxial compression of the sample submitted to a constant confining pressure, which leads to a heterogeneous distribution of forces within the volume of the sample since the initial packing of spheres is irregular.

Under these assumptions, a contact with number  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) will be characterized in the model by two random numbers:

$\xi_i$  - strength of the contact (failure threshold);

$\eta_i$  - force applied to the contact.

For the sake of simplicity, we consider at present only the normal component of the force acting on the contact between two grains, but the model can easily be generalized to account for both normal and tangential components of the force. We fur-

then assume that the strength of contacts  $\xi$  is a random variable uniformly distributed between two values  $a - \Delta$  and  $a + \Delta$ :

$$p_\xi = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta}, & |x - a| \leq \Delta; \\ 0, & |x - a| > \Delta. \end{cases} \quad (1)$$

A number of experimental and numerical studies of granular media (Mueth et al., 1998; Makse et al., 2000) indicate that even under a uniform hydrostatic compression the forces between grains are distributed in the sample in a heterogeneous manner (often forming the so-called force chains) and that the amplitudes of forces are well described by the exponential distribution. Therefore we assume in our model that the force acting on a contact between two grains is a random variable  $\eta$  having the distribution

$$p_\eta(x) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{x}{\theta}}, & x \geq 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (2)$$

The average value of force is therefore  $\theta$  and it can be related to the external load (pressure). Let us now consider the problem of failure of cemented contacts in the sample under the effect of the external loading.

#### Damage criterion I

We first consider a simple criterion of the onset of damage of cemented contacts. We calculate the probability of failure  $\mathcal{P}_f(n)$  of at least one contact in the sample containing  $n$  contacts:

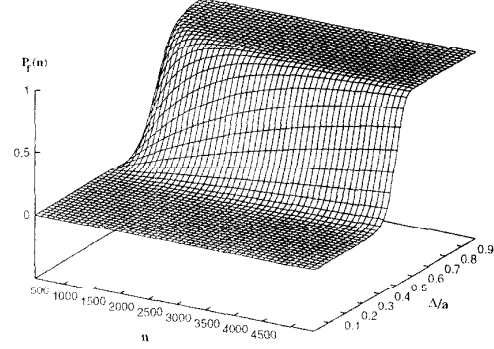
$$\mathcal{P}_f(n) = 1 - \mathcal{P}\{\xi_1 > \eta_1; \dots; \xi_n > \eta_n\} \approx 1 - \prod_{i=1}^n \mathcal{P}\{\xi_i > \eta_i\}. \quad (3)$$

The latter equality would be exact if contacts were damaged independently, which is generally not true due to stress redistribution. However, this assumption is quite acceptable at the initial stage of damage, when the density of failed contacts is low and their elastic interactions can be neglected. We can now calculate the probability that a single cemented contact does not fail:

$$\mathcal{P}\{\eta_i < \xi_i\} = \frac{1}{2\Delta} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \mathcal{P}\{\eta_i < y\} dy = \frac{1}{2\Delta} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} [1 - e^{-\frac{y}{\theta}}] dy = 1 - e^{-\frac{a}{\theta}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta}{\theta}}{\frac{\Delta}{\theta}} \right). \quad (4)$$

In the last expression the exponent  $a/\theta$  is the ratio of the mean contact strength to the mean inter-granular force. The term  $\frac{\sinh \frac{\Delta}{\theta}}{\frac{\Delta}{\theta}} \geq 1$  results from the scatter of the strength of contacts and equals unity when all the contacts have identical strength ( $\Delta = 0$ ). It follows directly from (3) and (4) that

$$\mathcal{P}_f(n|_{\Delta>0}) > \mathcal{P}_f(n|_{\Delta=0}),$$



**Fig. 1.** Probability of failure of at least one contact  $\mathcal{P}_f(n)$  as a function of number of contacts  $n$  and of ratio  $\Delta/a$ , according to equation (5). ‘‘Saturation’’ of the scale effect ( $\mathcal{P}_f(n) \rightarrow 1$ ) depends both on the sample size and on heterogeneity of strength thresholds  $\Delta/a$ .

which means that introducing a heterogeneity into the strength of cemented contacts weakens *on the average* the strength of the whole sample. Combining (3) with (4) we obtain the probability of failure of at least one contact in the sample containing  $n$  contacts:

$$\mathcal{P}_f(n) = 1 - \left[ 1 - e^{-\frac{a}{\theta}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta}{\theta}}{\frac{\Delta}{\theta}} \right) \right]^n. \quad (5)$$

Several curves of  $\mathcal{P}_f(n)$  as a function of number of contacts for fixed values of  $a$  and  $\theta$  and several values of threshold heterogeneity  $\Delta$  are shown in Fig. 1. One can see that asymptotically when  $n \rightarrow \infty$  the probability of failure rapidly tends to one, which means that, within the assumptions of the present model, big samples always contain a broken contact. This is quite natural since we have assumed an unbounded exponential distribution of force amplitudes. In real force chains the amplitude distribution is of course limited by some value, i.e. the forces follow a truncated exponential distribution. An interesting feature of the model with this damage criterion is the dependence of the probability of the onset of contact failure  $\mathcal{P}_f(n)$  as a function of sample size  $n$  and of the heterogeneity parameter  $\Delta$ . It shows, on one hand, that for a sample of a given size, the onset of damage is more probable when the strength of inter-granular contacts is more heterogeneous and, on the other hand, that for given material properties and loading conditions a bigger sample has greater chances to contain damaged contacts.

The present damage criterion I is quite severe: it is based on the failure of only one contact in the whole sample and is obviously not suitable to describe the macroscopic damage of granular cemented rock. Nevertheless equation (5) based on this criterion is useful since it allows us to understand the origin of the scale dependence (dependence on the number of contacts  $n$ ) of failure of contacts in a heterogeneous sample

We will further use it in order to construct a less restrictive damage model.

#### Damage criterion II

It is well known that localization of strain, for instance in the form of shear bands (Rudnicki and Rice, 1975) or compaction bands (Issen and Rudnicki, 2000; Besuelle, 2000), is the essential mechanism of the macroscopic damage of granular rocks. Localization can occur only when a certain concentration of failed cemented bonds or micro-cracks is attained at the first stage of the deformation, so that the stress redistribution within the sample introduces a significant interaction between the cracks (Kuksenko, 1995).

In the present probabilistic approach, which neglects the geometric aspects of the problem, we cannot take into account the interaction between broken cemented bonds, since our calculation of the probability for the whole sample is based on the independence of the individual damaged contacts. Our goal here is to obtain the analytical estimations of the scale dependence of damage in a cemented granular material, which can only be achieved under the assumption that contacts fail independently. Consequently the conclusions of the present probabilistic model are valid only at the first stage of "diffuse" damage in the sample.

Let us now consider a damage criterion in which broken contacts may constitute a given fraction  $\alpha$  of the total number of contacts  $n$  in the sample ( $0 < \alpha < 1$ ). As in the previous case, the concentration of damaged contacts should remain low, so that their elastic interactions can be neglected. This means that the following analytical estimations are valid for  $\alpha \ll 1$ .

In order to calculate the probability of failure  $\mathcal{P}_f(\alpha n)$  for the damage criterion II, we introduce a random variable  $\zeta_k$  having a binomial distribution:

$$\zeta_k = \begin{cases} 1, & \text{if the contact } k \text{ is damaged} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Thus, according to this criterion, the sample is damaged when

$$\sum_{k=1}^n \zeta_k \geq \alpha n. \quad (6)$$

The probability corresponding to inequality (6) can be easily obtained using the binomial distribution function:

$$\mathcal{P}_f(\alpha n) = \mathcal{P}\left\{\sum_{k=1}^n \zeta_k \geq \alpha n\right\} = \sum_{j=[\alpha n]}^n C_n^j P_1^j (1-P_1)^{n-j}, \quad (7)$$

where  $[\cdot]$  denotes the integer part and  $P_1$  is the probability of failure of one contact (see equation (4)):

$$P_1 = \mathcal{P}\{\xi_k < \eta_k\} = e^{-\frac{\Delta}{\theta}} \left( \frac{\sinh \frac{\Delta}{\theta}}{\frac{\Delta}{\theta}} \right). \quad (8)$$

Qualitatively the dependence (7) is similar to the one obtained for damage criterion I; that is, the probability of having a given fraction of failed contacts asymptotically tends to one when the size of the sample increases.

#### Numerical simulations

We now present a series of numerical simulations with a 3D granular dynamics type code, in which we test the predictions of our probabilistic model, in particular in what concerns the scale dependence of damage. The numerical model fully accounts for the elastic interactions through stress redistribution in the sample, and thus it is free of the simplifying assumptions of the above probabilistic model.

#### Numerical model

We use the numerical code based on the Discrete Element Method (DEM) developed by Cundall and Strack (1979). The classical Cundall's model deals with an unconsolidated assembly of elastic spheres interacting via the Hertz-Mindlin contact laws. We introduced into our numerical model a possibility to account for inter-granular cementation. Whether cement is present in a particular contact is decided at the last stage of preparation of the numerical sample.

In the absence of cement, the grains interact with one another via non-linear Hertz normal forces  $f_n$  which depend on the overlap between two spheres, and frictional transverse forces  $f_t$  which depend both on the shear and normal displacements between the grains:

$$f_n = \frac{2}{3} C_n R^{1/2} w^{3/2}, \quad (9)$$

$$f_t = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s, \quad (10)$$

where  $R$  is the radius of spheres (in this study we used only mono-disperse granular samples with  $R = 0.1 \text{ mm}$ ). The normal overlap is  $w_{ij} = 1/2(2R - |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$ ,  $\mathbf{x}_i$ ,  $\mathbf{x}_j$  are the positions of centers of grains  $i$  and  $j$ , and  $\Delta s_{ij}$  is the relative shear displacement between two grain centers. The constants  $C_n = 4\mu/(1-\nu)$  and  $C_t = 4\mu/(2-\nu)$  are defined in terms of the shear modulus  $\mu$  and the Poisson's ratio  $\nu$  of the material of the grains. In our simulations we set  $\mu = 30 \text{ GPa}$  and  $\nu = 0.2$ .

When the contact is cemented, the two grains interact with one each other according to relations similar to (9) and (10):

$$f_n = \frac{2}{3} C_n R^{1/2} w^{3/2} + S_n (w - w_0), \quad (11)$$

$$f_t = C_t (Rw)^{1/2} \Delta s + S_t \Delta s, \quad (12)$$

where  $S_n$  and  $S_t$  are the normal and tangential stiffnesses of the cement, which depend on the elastic moduli of the cement and on the radius of the cemented area as defined in Dvorkin et al (1994), and  $w_0$  is the normal overlap of the grains at the moment when they are cemented.

#### Sample preparation

The protocol of preparation of numerical samples is similar to the one described in Makse et al. (1999) and mimics the experimental procedure of preparation of densely packed granular materials (Bernabé et al., 1992). The procedure begins

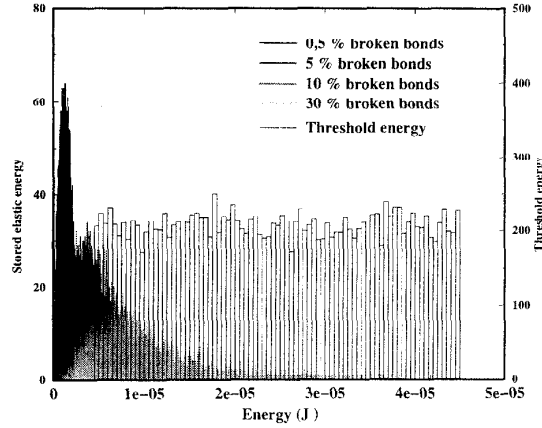


Fig. 2. Histograms of the elastic energy stored in cemented contacts in a 5000 grain sample at different stages of damage (in grey levels), and histogram of strength thresholds of contacts (solid line) for the same sample.

with a gas of a given number of spherical particles located at random in a cubic cell, having periodic boundary conditions. During the compaction phase the transverse forces are switched off ( $C_t = 0$ ). The system is then compressed slowly along the three axes until a specified value of the solid phase volume fraction  $\phi_s$  is reached. The compression is then stopped and the system relaxes in the presence of numerical viscous damping. The compression-relaxation cycles are continued until the desired volume fraction  $\phi_s$  is attained (which is chosen above the value corresponding to random close packing  $\phi_s \approx 0.64$ ).

Once the cubic granular sample is compacted and equilibrated, we apply the cementation procedure which uses random number generators to draw the locations of contacts and the elastic energy thresholds (which mimic the amount of cement in the contact) according to prescribed probability density functions. In all the simulations presented below, we cemented all inter-granular contacts with a uniform distribution of thresholds of the elastic energy that can be supported by the contact, according to equation (1).

#### Evolution of the elastic energy distribution and of damage

We now present several simulations of uniaxial compression tests with samples of different size, in which we increase the strain  $\epsilon_{11}$  along the vertical axis and maintain the constant confining pressure  $P_c = 10 \text{ MPa}$  on the lateral boundaries of the sample. Since the boundary conditions on the sample are periodic, the compression is achieved in the simulations by reducing the distance between virtual planes delimiting the sample. All our tests are performed in a quasi-static regime, since the strain rate is kept very low, and after each contact breaking the system is allowed to relax to an equilibrium before further strain is added.

Figure 2 shows histograms of the elastic energy stored in the cemented contacts (in grey levels) at four different stages

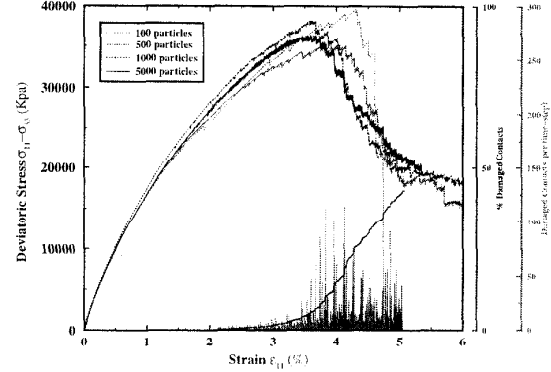


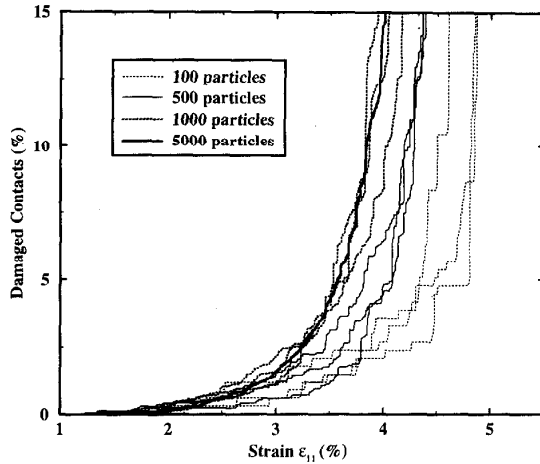
Fig. 3. Stress-strain curves for 100, 500, 1000 and 5000-grain samples in a simulated triaxial compression test, cumulative number of broken cemented contacts (bold dotted line), and number of broken contacts per time unit (impulses) which is analogous to the intensity of acoustic emission in real compression tests.

of damage in the sample of 5000 grains, as well as the histogram of strength thresholds of contacts (solid line) uniformly distributed between  $5 \cdot 10^{-6}$  and  $4.5 \cdot 10^{-5} \text{ J}$ . The overlap between the elastic energy and the threshold histograms indicates a possible failure of cemented contacts, since such failure occurs only when the stored energy exceeds the strength threshold in the same contact. In other words, even in the presence of strongly loaded force chains, “weak” contacts may survive at other locations. The energy distribution histograms have an exponential-like shape (truncated at small values) with the mean value increasing as the strain increases during the uniaxial compression test. The four histograms correspond to consecutive stages of the same test when 0.5%, 5%, 10% and 30% of the cemented contacts were broken.

Figure 3 shows the stress-strain curves for this sample and for three other samples consisting of 100, 500 and 1000 grains. For the sample of 5000 grains, we also show the cumulative number of broken contacts (bold dotted line) and the number of broken contacts per time unit (impulses), which can be compared to the intensity of acoustic emission during real compression tests. We observe that the stress-strain curves are quite typical for soft granular rock with a weak softening which begins at very low values of strain. Cemented contacts start to break when the axial strain  $\epsilon_{11}$  is approximately 1.5%. The peak stress is attained at  $\epsilon_{11} \approx 3.6\%$  for the 5000 grain sample, and at  $\epsilon_{11} \approx 4.3\%$  for the smallest (100 grains) sample. At the peak stress, less than 10% of cemented contacts are broken in all the samples.

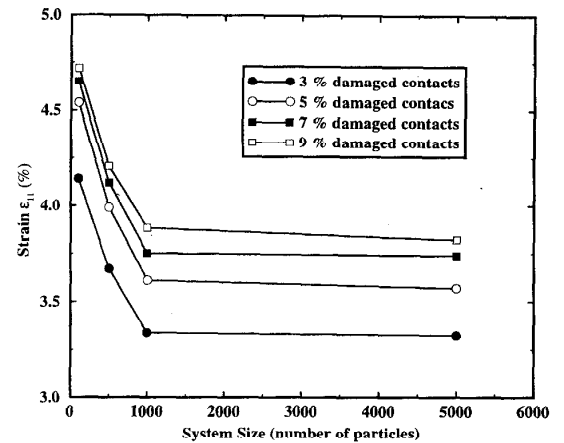
#### Scale dependence of damage

We now focus our attention on the dependence of damage on the size of the sample, in relation with the predictions of the probabilistic model described above. In order to compare the simulations with our probabilistic model, we need to consider the damage of samples at its initial stage, when the concentration of broken contacts is relatively low. In Fig. 4 we show



**Fig. 4.** Percentage of damaged cemented contacts as a function of the axial strain  $\epsilon_{11}$  for samples of different size: 100, 500, 1000 and 5000 grains. The results of simulations for three independently prepared samples of each size (except for 5000 grains, for which only one sample was tested) are shown in the figure using the same line style.

the percentage of damaged cemented contacts as a function of the axial strain  $\epsilon_{11}$  for the four samples of different size. The results of simulations for three independently prepared samples of each size (except for 5000 grains, for which we studied only one sample) are shown in the figure using the same line style. All the samples were prepared using the same values of the elastic constants for the material of grains and for the cement, and the same distribution of contact strength thresholds. Thus the only difference between the samples of the same size comes from independent sequences of random number generators used in the initialization and cementation procedures. One can observe that smaller samples attain a given degree of damage on average *later* in the deformation process than the bigger ones, which is consistent with the predictions of our probabilistic damage model (see Fig. 1). The same can be formulated in a different way: for a given strain value, smaller samples have on average lower concentration of damaged contacts. This observation is illustrated in Fig. 5, where we show the value of strain  $\epsilon_{11}$  for which a fixed percentage of damaged contacts is attained (3%, 5%, 7% and 9%) as a function of the sample size. One can note that *for this particular choice of values of the model parameters* the observed scale dependence of damage saturates above 1000 grains, and that the simulations with systems containing at least this number of particles are representative from the point of view of properties of the cemented granular material and are not biased by the sample size effect. It is important to note here that the critical size of the system above which the observed scale effect saturates (about 1000 grains in our example) is a function of the parameters of the model. It depends in particular on the parameters of the heterogeneity of cementation (mean value  $a$  and the spread  $\Delta$  of the energy thresholds), and, in general, strongly heterogeneous materi-



**Fig. 5.** Axial strain  $\epsilon_{11}$  at which a given percentage of damaged contacts is attained (3%, 5%, 7% and 9%), as a function of the sample size.

als require bigger sample sizes in order to make the simulated tests representative. We deliberately chose the parameters of the simulations in such a way that the critical system size for which the scale dependence saturates corresponded to a relatively small number of grains in the sample. We could thus simulate the samples whose volumes differ by a factor of 50, and at the same time avoid costly simulations with very large systems.

## Conclusions

We proposed a probabilistic model of damage of cemented granular rock which takes into account uneven distribution of cement and strongly heterogeneous force distribution throughout the sample under the action of external loading. Combined with simple damage criteria, which are applicable at the onset and at early stages of damage, the model predicts an explicit dependence of probabilities of damage on the size of the sample. Under similar conditions, the probability of breaking a given fraction of cemented contacts is lower for smaller samples. This means that the tests performed on small samples may underestimate the degree of damage which can occur under similar conditions in bigger samples made of the same material.

We constructed a numerical model of cemented granular rock based on DEM approach. The distributions of the elastic energy in the cemented contacts measured in numerical simulations are quite similar to the distributions of force amplitudes observed in unconsolidated granular materials under compression. Numerical investigations of the scale effect of damage qualitatively confirm the predictions of our probabilistic model. The scale effect is clearly observed for the strain needed to produce a certain degree of damage in the sample. At the same time, we observed no significant scale dependence of the peak stress in our simulations (the difference between the peak stress of the 100-grain and 5000-grain sam-

ples is approximately 10%, as can be seen in Fig. 3). A possible explanation of this fact is that the strength of the sample close to its peak stress is essentially determined by the localization of damage into structures, such as shear bands or compaction bands, extending over the whole sample. Thus at this stage of deformation, the mechanism of damage is principally different from the one described by our model.

The described scale effect should be taken into account in the interpretations of numerical simulations of granular materials, as well as in attempts to extrapolate mechanical and transport properties of granular rock from laboratory to larger scales.

### References

- Main, I., Statistical physics, seismogenesis, and seismic hazard, *Reviews of Geophysics*, 34, 433–462, 1996.
- Paterson, M.S., *Experimental rock deformation: The brittle field*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 33–39, 1978.
- Cundall, P.A., Strack, O.D.L., A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, 29, 47–65, 1979.
- Menéndez, B., W. Zhu and T.-f. Wong, Micromechanics of brittle faulting and cataclastic flow in Berea sandstone, *J. Struct. Geol.*, 18, 1–16, 1996.
- Mueth, D.M., Jaeger, H.M., Nagel, S.R., Force distribution in a granular medium, *Phys. Rev. E*, 57, 3164–3169, 1998.
- Makse, H.A., Johnson, D.L., Schwartz, L., Force fluctuations in undrained granular materials under uniaxial compression, *Phys. Rev. Lett.*, 84, 4160–4163, 2000.
- Rudnicki, J.W., Rice, J.R., Conditions for the localization of deformation in pressure-sensitive dilatant materials, *J. Mech. Phys. Solids*, 23, 371–394, 1975.
- Issen, K.A., Rudnicki, J.W., Conditions for compaction bands in porous rock, *J. Geophys. Res.*, 105, 21529–21536, 2000.
- Besuelle, P., Compacting and dilating shear bands in porous rock: theoretical and experimental conditions, *J. Geophys. Res.*, submitted.
- Makse, H.A., Gland, N., Johnson, D.L., Schwartz, L., Why effective medium theory fails in granular materials, *Phys. Rev. Lett.*, 83, 5070–5073, 1999.
- Bernabé, Y., Fryer, D.T., and Hayes, J.A., The effect of cement on the strength of granular rocks, *Geophys. Res. Lett.*, 19, 1511–1514, 1992.
- Dvorkin, J., Nur, A., Yin, H., Effective properties of cemented granular materials, *Mech. Materials*, 18, 351–366, 1994.
- Kuksenko, V.S., Model for the transition from micro- to macrofracture, *Mechanics of Jointed and Faulted Rocks*, Bakema, Rotterdam, 977–1000, 1995.





# Conclusion générale

## 1 Rappels du contexte d'étude

Durant les dernières années d'important progrès ont été réalisés par l'étude des propriétés physiques des roches en relation avec l'exploration sismique ; les ondes sismiques rapportent des informations sur les propriétés des roches et sur les fluides qu'elles contiennent (en terme de temps de trajet, d'amplitude de réflexion, de variations de phases) ; l'interprétation des données sismiques collectées par exemple sur les structures géologiques piégeant les hydrocarbures (les réservoirs pétroliers) permet ainsi de faire le lien avec la lithologie de la roche, la porosité, la pression de fluides, la saturation ... ; de part la complexité naturelle des roches rencontrées, une théorie universelle pour l'ensemble des types de roches n'est pas accessible.

Les matériaux granulaires (sables consolidés ou non, sols, bétons, céramiques, matériaux endommagés en général) sont présents en quantité abondantes sur terre ; ce sont des exemples de matériaux élastiques inhabituels ; ils montrent une large gamme de propriétés intéressantes (non-linéarité, hystérésis, mémoire de chargement) ; ils sont par certains aspects similaires à des solides et par d'autres à des liquides ; ces propriétés qui les différencient des autres matériaux élastiques sont à la base d'une aire de recherche active ; Il est nécessaire de développer des théories propres à ces matériaux.

Quelle est la réponse élastique dynamique de ces matériaux et comment les ondes sonores s'y propagent-elles ? en réalité, la propagation du son dans les matériaux granulaires est une question encore ouverte. Comment se matérialise l'endommagement dans ces matériaux selon les conditions de chargement externes ? Ici encore, on ne possède pas de compréhension globale et de nombreuses études sont en cours.

Des problèmes géophysiques fondamentaux sont directement liés à ces questions :

- En Géotechnique, on étudie le déplacement des sols associés aux tremblements de terre ; le couplage avec des modes résonnant des constructions peut entraîner leur rupture ; pour limiter ces destructions, il faut pouvoir modéliser correctement les propriétés acoustiques des matériaux granulaires (sols) afin de caractériser la réponse du site par une étude sismique et la découpler de celle des constructions.
- En sismique pétrolière, l'interprétation correcte des *logs* acoustiques est très importante pour pouvoir déterminer correctement les paramètres des réservoirs et optimiser la production.
- En gestion des réservoirs pétroliers, pouvoir décrire et prévoir la rupture (pour l'empêcher ou bien pour l'influencer selon les besoins) de ces matériaux est tout à fait cruciale.

## 2 Principaux résultats

Le travail qui a été réalisé au cours de cette thèse est articulé autour de deux thématiques centrées sur les matériaux granulaires, qui ont fait l'objet des deux dernières parties de ce manuscrit :

- (1) Les propriétés géométriques (texture) et mécaniques (modules élastiques, fonction réponse) des assemblages granulaires denses.
- (2) Les processus de déformation dans les matériaux granulaires non cohésifs et les mécanismes d'endommagement des roches granulaires.

La méthode des Eléments Discrets a été utilisée pour modéliser les comportements de ces matériaux. C'est une approche discontinue qui est tout à fait adaptée à la nature et à l'étude de ces matériaux.

Dans le cadre de cette thèse, le premier objectif était de développer un programme de modélisation des matériaux granulaires, qu'ils soient non cohésifs et consolidés sous contraintes, ou bien cohésifs, c'est-à-dire consolidés par cimentation des contacts intergranulaires. Le programme a été développé sur la base de la Méthode des Eléments Discrets (issue de la Dynamique Moléculaire) ; c'est la méthode la plus adaptée pour les études que nous souhaitons entreprendre puisqu'elle permet de modéliser à la fois le comportement quasi-statique des matériaux granulaires mais également les processus dynamiques comme la propagation des ondes.

L'implémentation utilise les méthodes de programmation récentes et nous avons porté beaucoup d'attention à sa modularité de façon à pouvoir adapter très facilement le programme à l'étude de différents problèmes exigeant des géométries spécifiques ( $1D, 2D, 3D$ ) et des conditions de frontières particulières (frontières périodiques, rigides, flexibles et adaptatives), mais aussi afin de pouvoir utiliser le programme aussi bien sur un simple ordinateur que sur des clusters de calculs (lorsque ceux-ci fonctionnent !); ces derniers permettent (1) de lancer simultanément plusieurs simulations afin d'échantillonner un espace de paramètres, ou bien afin de multiplier les réalisations pour un même jeu de paramètres avec des configurations de particules différentes, (2) de modéliser des systèmes granulaires de grande taille nécessitant une grosse capacité de calcul (processeurs et mémoires) en utilisant une méthode de décomposition de domaines. Au moment où cette thèse se termine, la version purement parallèle est partiellement développée et nous comptons finaliser son implémentation au Levich Institute du City College of New York.

Une fois la méthode numérique développée, pour étudier un matériau granulaire, il faut tout d'abord le *construire*; c'est-à-dire qu'il faut recréer un échantillon granulaire numérique consolidé à partir de particules élémentaires. Et même si celles-ci sont les plus simples qui soit, des sphères non frottantes, il existe un certain nombre de paramètres comme la polydispersité et la concentration qui vont influencer selon la préparation sur l'arrangement final des particules dans l'agrégat et sur les propriétés effectives de ce dernier.

Nous avons donc mené une étude préliminaire présentée au chapitre 3 sur les effets des paramètres de mélanges bidisperses (hétérogénéités de taille des particules, concentrations des espèces) sur les propriétés géométriques et mécaniques des assemblages granulaires denses bidimensionnels, qui s'est révélée importante pour les études ultérieures; nous avons utilisé un mélange de deux espèces de particules (mélange binaire) ayant les mêmes propriétés élastiques mais dont les rayons diffèrent par rapport au rayon moyen d'un pourcentage allant : (1) (faibles hétérogénéités) de 1/100% à 10%, (2) (fortes hétérogénéités) de 10% à 70%, et dont les concentrations des deux populations peuvent également varier entre un mélange complètement monodisperse à un mélange à concentrations égales.

Nous avons montré, que les paramètres d'hétérogénéités de taille et de concentration étaient sources d'effets importants sur la texture des assemblages granulaires préparés à friction nulle

à l'équilibre statique à l'aide d'un protocole de *compaction-densification* : (1) aux faibles hétérogénéités de taille, quelles que soient les concentrations relatives des deux espèces, la texture de l'assemblage granulaire est très hétérogène montrant localement des régions (*clusters*) où les particules sont organisées selon un arrangement *Hexagonal Compact* et séparées les unes des autres par des *joints* désordonnés, (2) aux fortes hétérogénéités une faible concentration relative d'une espèce par rapport à l'autre, de l'ordre de 10%, suffit à empêcher l'apparition de la composante *Hexagonale Compacte* dans l'arrangement, et la texture de l'assemblage se présente sous une forme amorphe. En conséquence de l'arrangement localement ordonné des particules, la coordinence moyenne ainsi que la compacité de l'assemblage sont fortement corrélées aux valeurs des paramètres de mélanges.

Nous avons ensuite quantifié l'évolution du degré d'ordre dans ces assemblages granulaires avec les paramètres de mélanges en utilisant des paramètres d'ordre et des fonctions de corrélation ; on met ainsi en évidence la transition depuis des arrangements organisés partiellement selon un réseau *Hexagonal Compact* aux faibles hétérogénéités de taille, en passant par des arrangements amorphes aux hétérogénéités modérées, vers des arrangements *cubiques* et à nouveau *Hexagonaux Compacts* aux fortes hétérogénéités (au niveau du rapport de taille critique). Si, le paramètre d'ordre d'orientation de contact qui quantifie la cohérence des orientations de contacts par rapport au réseau *Hexagonal Compact* est bien corrélé avec le degré d'ordre dans sa version locale, la décohérence des orientations des clusters entre eux rend inadaptée la version globale ; néanmoins ceci nous permet de calculer une taille moyenne des régions *Hexagonales Compactes* de l'ordre de 7 – 8 tailles de particules de rayon.

L'étude des propriétés mécaniques des assemblages granulaires nous a montré que les assemblages ordonnés ont des modules élastiques plus importants que les assemblages désordonnés, d'un ordre de 15% pour des conditions de pressions comparables ; cet écart s'explique premièrement par des coordinences moyennes et des compacités plus importantes et deuxièmement par l'étude des réseaux de forces de contact dans les assemblages ; les distributions des amplitudes des forces de contact sont beaucoup plus hétérogènes dans les assemblages partiellement ordonnés (distribution exponentielle) alors que l'homogénéité de la texture tend à homogénéiser les forces de contact (distribution gaussienne). Dans le cas où les forces de contact sont hétérogènes, les forces de plus faibles amplitudes sont concentrées dans les clusters et les forces de très fortes d'amplitudes sont concentrées aux joints de clusters, où quelques contacts assurent la transmission des forces et font la jonction mécanique entre ces régions ordonnées ; les chaînes de forces ont des extensions plus importantes dans ce type d'assemblage et contribuent à cette transmission sur des distances importantes.

Cette étude préliminaire, nous aura permis de définir les paramètres de mélanges en terme de concentrations et de polydispersité à utiliser pour obtenir des assemblages granulaires à texture homogène, ce qui a permis par la suite d'étudier les propriétés mécaniques de ces assemblages granulaires sur une base bien définie.

Dans le travail qui a suivi, présenté au chapitre 4, nous nous sommes intéressés à l'élasticité non-linéaire des assemblages granulaires denses (bidimensionnels et tridimensionnels), rendant compte en partie de leurs propriétés acoustiques ; nous nous sommes également attachés à montrer dans cette étude, que la dynamique de relaxation collective des particules jouent un rôle très important dans la réponse mécanique de ces systèmes. Cette étude combine à la fois un travail numérique réalisé en partie à partir des échantillons granulaires obtenus dans l'étude précédente et un travail expérimental réalisé sur des agrégats de billes de verre.

En formulant des lois de contact microscopiques (de type *force-déplacement*, Hertz-Mindlin dans cette étude) et en utilisant la Théorie de Milieu Effectif, les relations de *contraintes-déformations* macroscopiques peuvent être dérivées, ce qui permet d'obtenir une prédiction sur

la dépendance des modules élastiques d'assemblages granulaires avec la pression. Dans cette théorie élastique de milieu effectif, l'approximation de déformation affine est utilisée ; elle décrit une déformation homogène, sans rotation, ni torsion, ni aucun déplacement supplémentaire ; les rigidités (et par conséquent les forces) sont moyennées sur toutes les orientations de contacts possibles (équiprobables) pour obtenir les relations macroscopiques ; si l'état de contrainte de référence dépend de l'histoire du chargement, les modules élastiques, eux, ne sont dépendants que de l'état actuel de la déformation.

Les expériences numériques de compression isotrope et les mesures expérimentales de vitesses de propagation d'ondes sur des assemblages granulaires denses réalisées dans cette étude, montrent des modules élastiques (à savoir le module d'incompressibilité et le module de cisaillement) en bon accord, mais dont la dépendance avec la pression augmente plus rapidement que la prédiction de la Théorie Élastique de Milieu Effectif basée sur le contact de Hertz. De plus, les rapports des modules élastiques obtenus numériquement et expérimentalement, constants avec la pression, sont plus grands que la valeur constante fournie par la théorie.

Nous montrons que la formulation élastique décrit partiellement la réponse mécanique d'un assemblage granulaire sous compression isotrope ; en effet, pour que cette description devienne correcte, il faut inclure dans la théorie les dépendances de la coordinence moyenne et de la compacité avec la pression déterminées à partir des simulations numériques. C'est la deuxième source de non-linéarité après le contact de Hertz qui manquait à cette théorie élastique pour décrire de façon satisfaisante l'évolution du module d'incompressibilité. Nous montrons également que la théorie est incapable de prédire correctement la réponse d'un système granulaire soumis à un cisaillement ; en corrigeant la théorie avec la deuxième source de non-linéarité, on améliore la tendance pour l'évolution du module de cisaillement avec la pression, cependant la théorie surestime toujours fortement cette réponse, et ceci de façon plus marquée lorsque la friction de contact est diminuée. Finalement, nous montrons que l'origine de ce désaccord tient dans l'hypothèse posée à la base du développement de la théorie qui voudrait que le champ de déformation dans le milieu granulaire soit homogène à toutes les échelles, c'est-à-dire que la déformation microscopique à l'échelle du grain corresponde à la déformation macroscopique de l'assemblage. En réalité, cette hypothèse est incompatible avec l'équilibre des forces et des moments sur les grains pour un assemblage désordonné soumis à une déformation cisailante, mais elle l'est en revanche pour une déformation de compression isotrope. La relaxation collective des grains est donc une composante essentielle du module de cisaillement et elle n'est pas prise en considération dans la Théorie de Milieu Effectif.

Pour terminer, une petite étude sur les assemblages granulaires tridimensionnels complémentaire à celle effectuée dans le chapitre précédent sur les assemblages bidimensionnels nous donne les résultats suivants : (1) les distributions des intensités de forces de contact dans les assemblages granulaires tridimensionnels ont montré une transition depuis des distributions exponentielles aux faibles pressions vers des distributions gaussiennes aux fortes pressions traduisant l'homogénéisation des réseaux de forces, (2) les hétérogénéités de taille (modérées) sont peu décisives dans un arrangement tridimensionnel, car le degré de liberté de mouvement supplémentaire semble contribuer, de lui-même, à empêcher la formation de régions ordonnées comme cela avait été montré dans les arrangements bidimensionnels.

Nous avons mis en évidence l'impossibilité de définir un champ de déformation dans un assemblage granulaire puisque cette déformation est inhomogène à l'échelle des grains ; l'approche élastique qui présuppose un champ de déformation uniforme à toutes les échelles semble donc mal appropriée pour décrire le comportement des assemblages granulaires. Nous avons vu qu'il a été proposé d'autres théories pour décrire les milieux granulaires dont les théories de transmissions des contraintes ; elles décrivent les contraintes sans recourir aux déformations en utilisant

des nouvelles relations de *clôture* pour résoudre l'indétermination des systèmes granulaires ; l'assemblage y serait dans un état *fragile* dit aussi de *rigidité marginale*. Le choix à faire entre une relation de clôture élastique et une relation de clôture *fragile* est un débat toujours ouvert ; la mesure de la fonction réponse (ou fonction de Green) d'un milieu granulaire devrait apporter la réponse, car chaque théorie fournit une prédiction différente ; pour le moment, il a été montré expérimentalement que l'approche élastique semblerait être correcte aux larges échelles.

L'étude réalisée dans ce chapitre a donc consisté à mesurer numériquement la fonction réponse d'un assemblage granulaire bidimensionnel dense, sous contraintes isotropes, aux petites comme aux *larges* échelles ; cette expérience numérique consiste à appliquer une force quasi-ponctuelle dans le matériau et à mesurer le champ de contraintes qu'elle génère. Numériquement, il est possible d'appliquer cette force au coeur du système et pas seulement en surface comme c'est le cas expérimentalement ; ceci permet d'obtenir les réponses en compression et en dilatation dans le milieu, et nous avons montré que ces deux réponses sont symétriques de part et d'autre du point d'application de la perturbation. Il est aussi possible de mesurer l'ensemble des composantes de la réponse, longitudinale, axiale et cisailante, ce qui est difficile à obtenir expérimentalement.

Quelle que soit la profondeur dans l'empilement numérique, la composante axiale de la fonction réponse granulaire que nous avons mesurée (et moyennée sur un jeu de 10 réalisations) présente un pic centré à la verticale du point d'application de la force, et la largeur à mi-hauteur de ces profils de contraintes évolue proportionnellement avec la profondeur ; ce résultat est en accord avec les prédictions de la théorie élastique mais pas avec les prédictions : (1) des modèles propagatifs (de transmission des contraintes) qui prédisent un double pic de part et d'autre du point d'application de la perturbation, (2) des modèles hyperboliques (modèles probabilistiques de diffusion des forces) qui prédisent comme la théorie élastique un pic central mais dont la largeur évolue avec la racine carrée de la profondeur.

Néanmoins, selon nos simulations, la théorie élastique ne décrit pas non plus correctement la réponse du milieu granulaire ; en effet, si la réponse *instantanée* du milieu (correspondant au pic de propagation de la perturbation) correspond bien à la prédiction élastique, la réponse évolue au cours de la relaxation ; finalement les amplitudes des profils de réponse à l'état statique sont plus petits que ceux issus de la prédiction élastique. Ceci semble être en accord avec les résultats obtenus dans l'étude présentée au chapitre 4, où nous avons montré que les réarrangements granulaires consécutifs à l'application d'une perturbation entraînent la relaxation des contraintes dans le milieu. Pour terminer, nous avons réalisé une étude de la dépendance de la fonction réponse du milieu granulaire en fonction de la pression de confinement ; nous n'avons pas mis en évidence de dépendance significative pour des pressions allant de  $100 \text{ KPa}$  à  $10 \text{ MPa}$ .

Dans les études précédentes, nous avons étudié soit les propriétés texturales d'assemblages granulaires à l'équilibre statique, soit leurs propriétés mécaniques lorsqu'ils sont soumis à de très faibles déformations, c'est-à-dire dans le régime linéaire. Dans ce nouveau travail en géométrie bidimensionnelle, nous nous sommes intéressé aux grandes déformations des milieux granulaires, lorsqu'ils sont soumis à un chargement axial sous une pression de confinement latérale contrôlée. Pour modéliser des expériences de compression biaxiale, nous avons dû dans un premier temps reproduire numériquement les conditions aux limites expérimentales : (1) un piston rigide de chargement, modélisé par des parois granulaires rigides, (2) des membranes flexibles imperméables, modélisées par des membranes granulaires qui peuvent se contracter ou s'étirer localement pour s'adapter à la déformation locale de l'échantillon et à la pression latérale appliquée.

Les données mécaniques lors des compressions biaxiales nous montrent que les échantillons granulaires subissent, dans un premier temps, une phase de compaction (le volume et la porosité diminuent) puis, avant d'atteindre le pic de contrainte, entrent dans une phase de dilatance qui dure aussi longtemps que le chargement est appliqué. Le pic de contrainte coïncide avec la

localisation de la déformation que l'on peut mettre en évidence en regardant le champ de vitesse des particules dans l'échantillon ; on observe de très forts gradients de part et d'autre d'une ou plusieurs bandes (qui s'intersectent) ; par contre au sein de ces bandes, les vitesses sont très faibles, ce qui permet d'estimer leurs épaisseurs de l'ordre de 3 – 5 grains.

Nous avons réalisé ces compressions biaxiales pour plusieurs pressions de confinement, de 100 *KPa* à 80 *MPa*. Aux faibles pressions, les bandes de localisation concentrent les particules ayant les taux de rotation les plus élevés (horaires ou anti-horaires) en accord avec le jeu de la bande de localisation considérée ; il y a donc de forts gradients de cisaillement dans ces bandes. Néanmoins, les rotations des particules ne correspondent pas exclusivement au jeu de la bande considérée et on observe localement des systèmes de rotations complémentaires qui permettent vraisemblablement de réduire la résistance au cisaillement et d'accommoder de façon efficace la déformation macroscopique ; lorsque des bandes *conjuguées* apparaissent, c'est au niveau de leur intersection que les rotations complémentaires se concentrent pour permettre aux deux bandes de s'exprimer lors du chargement. Du fait de l'importance de ces mouvements de rotations complémentaires, on observe peu de mobilisation du frottement à faible pression. Aux fortes pressions, les rotations semblent être moins importantes et le glissement aux contacts intergranulaires se concentre exclusivement dans les bandes de cisaillement.

Dans nos tests numériques de compressions biaxiales, après le premier pic de contrainte et la localisation correspondante de la déformation, nous observons plusieurs remises en charge et déstabilisations successives de plus faible ampleur, qui traduisent les limites d'accommodation de la déformation des bandes par rapport au chargement appliqué.

Enfin, nous avons étudié les mécanismes à l'origine de l'apparition de la dilatance lors du chargement ; en observant les réseaux des forces de contact, nous avons mis en évidence l'apparition de chaînes de forces orientées dans la direction du chargement et correspondant à des colonnes verticales de particules en contact. Le flambage de ces colonnes lors du chargement et avant l'apparition de la localisation crée de la porosité (à la façon d'une ouverture de fissure orientée verticalement). Lorsque la localisation est apparue, on observe très nettement l'apparition d'une nouvelle porosité dans la bande de cisaillement qui semble correspondre à la déformation par inflexion des chaînes de forces (et colonnes de particules associées) par le jeu de la bande.

La dernière étude que nous avons entreprise au cours de cette thèse, concerne l'endommagement des roches granulaires ; nous avons tout d'abord proposé un modèle probabilistique d'endommagement d'un assemblage granulaire consolidé par un ciment intergranulaire fragile ; ensuite nous avons adapté la Méthode des Eléments Discrets et notamment les modèles de forces de contact afin de pouvoir modéliser l'endommagement de ce milieu granulaire cohésif.

Dans le modèle d'endommagement proposé, les intensités des forces de contact suivent une distribution strictement exponentielle et la valeur moyenne des forces est donnée ; le caractère bimodal de la distribution des forces qui a été mis en évidence dans les milieux granulaires (sous-réseau faible suivant une loi puissance et sous-réseau fort exponentiel) n'est pas considéré ; la résistance du ciment aux contacts suit une distribution homogène dont on fixe la moyenne et la largeur. Ces distributions données, on peut calculer différentes probabilités qui correspondent aux critères d'endommagement posés ; le premier critère examiné correspond à une probabilité très large, à savoir la probabilité d'avoir au moins un contact endommagé dans l'échantillon. Cette probabilité est fonction des paramètres des distributions en entrées du modèle (hétérogénéité de la cimentation, état de chargement) mais également de la taille du système (c'est-à-dire le nombre de contact total dans l'assemblage granulaire). Le deuxième critère d'endommagement examiné, plus restrictif, considère la probabilité d'avoir une fraction de contacts endommagés.

Nous avons tiré de ce modèle une dépendance explicite des probabilités d'endommagement examinées en fonction de l'hétérogénéité de la cimentation intergranulaire et de la taille de sys-

tème : premièrement un échantillon très hétérogène du point de vue de sa cimentation aura une probabilité d'endommagement plus importante qu'un échantillon homogène, et d'autre part deux échantillons de taille différentes caractérisés par la même cimentation auront des probabilités d'endommagement différentes, le plus grand échantillon ayant la probabilité d'endommagement maximum. Nous avons donc mis en évidence un effet d'échelle sur l'endommagement.

Il est important de remarquer que dans ce modèle les contacts sont considérés parfaitement indépendamment les uns des autres ; ainsi, dans le modèle si un contact cède, cette rupture n'influence pas la probabilité de rupture des autres contacts ; ceci reviendrait à ne pas considérer la redistribution locale des contraintes après la rupture d'un contact dans une roche granulaire ; si cela ne semble pas très réaliste, dans la phase initiale d'endommagement à caractère diffus on peut considérer que les interactions sont négligeables.

Nous avons donc par la suite réalisé des simulations numériques de compression triaxiale pour modéliser le processus d'endommagement des roches granulaires afin : (1) de valider l'hypothèse d'indépendance des contacts à la base du modèle d'endommagement (2) de confirmer les prédictions du modèle en terme d'effet d'échelle sur l'endommagement ; nous avons donc dû adapter la Méthode des Eléments Discrets afin de prendre en compte la présence du ciment inter-granulaire fragile, en modifiant les lois de contacts intergranulaires et en affectant à chaque contact un seuil de rupture en terme d'énergie de déformation.

Dans un premier temps, la visualisation de la rupture des contacts, nous a permis de confirmer la nature diffuse de l'endommagement dans la phase initiale de déformation (en réalité pratiquement jusqu'au pic de contrainte), ce qui tend à valider l'hypothèse faite dans notre modèle. Dans un deuxième temps, pendant la *rupture*, nous avons vu que l'endommagement tendait à se localiser spatialement ce qui montre que la redistribution élastique des contraintes devient importante dans cette phase. Enfin nous avons vérifié les prédictions de notre modèle en ce qui concerne l'effet d'échelle de l'endommagement avec la taille des échantillons : les simulations numériques de compressions triaxiales réalisées sur des échantillons de tailles différentes (de quelques centaines à plusieurs milliers de grains) en utilisant les mêmes paramètres de cimentation confirment le fait que l'endommagement est plus prononcé dans les grands échantillons que dans les petits pour un même état de chargement.

Dans ces simulations, contrairement à l'étude précédente, nous n'avons pas été capables de mettre clairement en évidence la formation de bandes de cisaillement ; plusieurs raisons peuvent être avancées : (1) le mode de déformation homogène utilisé pour le confinement, (2) les conditions de frontières périodiques latérales, (3) la taille réduite des échantillons numériques en 3D et enfin (4) la difficulté d'isoler un plan de localisation dans un objet tridimensionnel.

### 3 Perspectives

Les développements possibles des travaux présentés s'orientent dans différentes directions :

- Premièrement, il s'agit de mieux comprendre les mécanismes de compaction des matériaux granulaires au cours de la *préparation* ; cette compaction mécanique (glissements, rotations, ...) détermine la texture du matériau, qui joue un rôle fondamentale dans la réponse mécanique macroscopique ; on peut supposer également que la prise en considération d'une polydispersité plus générale (que le mélange bidisperse) pourrait influencer fortement sur la texture et la réponse mécanique associée.
- Si l'introduction d'une cohésion intergranulaire a été réalisé dans la dernière étude présentée, une meilleure description de la solution du problème du contact de deux grains cimentés et une modélisation plus fine du processus rupture du ciment (différents modes :



- compression, tension, cisaillement) devrait permettre de mieux décrire l'endommagement des roches granulaires ; ceci permettrait d'étudier proprement les problèmes de localisation de la déformation (bandes de cisaillement, bandes de compaction) et les problèmes de dégradation (problèmes de *sanding* intervenant dans la déstabilisation des puits pétroliers).
- Bien que les fluides aient une influence profonde sur les propriétés mécaniques des géomatériaux (par exemple dans les roches réservoirs) et leur évolutions, cette phase est absente dans nos travaux ; le système *sec* est à lui seul très complexe et il est nécessaire dans un premier temps de bien comprendre l'ensemble des micromécanismes avant d'envisager incorporer la phase fluide ; le rôle mécanique des fluides tend à affaiblir et fragiliser la roche dans certaines conditions ; son activité chimique par modification des propriétés de contact (géométriques, mécaniques) peut elle l'affaiblir par dissolution au contact (perte de cohésion, dégradation) ou la renforcer par précipitation (cohésion plus importante). Le passage à l'étude d'un système granulaire "mouillé" (c'est à dire, saturé en fluides) est fondamentale pour une majorité des applications aux Sciences de la Terre.
  - Pour terminer, la mécanique des roches est avant tout à la base une science expérimentale ; Les mesures collectées lors de tests expérimentaux sont au coeur de la description du comportement mécanique des géomatériaux ; cependant, certaines mesures, comme nous l'avons vu, ne sont pas accessible par cette approche d'où le recours à l'approche numérique qui offre une excellente complémentarité ; il serait nécessaire de comparer les les résultats issus des simulations avec des résultats obtenus sur des échantillons réels afin de les valider et ceci permettrait de mieux caler les constantes numériques ; dans cette perspective, il faudrait travailler avec la même géométrie, c'est à dire réaliser des simulations 3D comme dans la dernière étude (du chapitre 7), et également augmenter la taille des échantillons numériques (pour les rendre comparables aux échantillons réels), ce qui ne sera possible que par la finalisation de la version parallèle du code DEM développé et l'utilisation de ressources informatiques plus puissantes.

L'étude des matériaux granulaires reste confrontée à un important challenge ; si les matériaux granulaires *secs* non cohésifs ont été largement étudiés ces dernières années, il faut maintenant pousser l'étude de leur comportement aux différents contextes pratiques dans lesquels on peut les trouver (cohésion intergranulaire, saturation en fluides) et identifier les traits essentiels nécessaires à leur description macroscopique.

# Bibliographie

- [1] Alexander, S., *Amorphous Solids : Their Structure, Lattice Dynamics and Elasticity*, Phys. Rep., **296**, 65, 1998.
- [2] Allen, M.P. and Tildesley, D.J., *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, 1987.
- [3] Antony, S.J., *Evolution of Force Distribution in Three-Dimensional Granular Media*, Phys. Rev. E, **63**, 1, 2000.
- [4] Astrom, J.A., *Granular Packings and Fault Zones*, Phys. Rev. Lett., **84**, 638, 2000.
- [5] Baryshev, I., *Computer Simulation of Two-Dimensional Granular Flow past a Circular Obstacle*, PhD Thesis, Benjamin Levich Institute, City College of CUNY, 2003.
- [6] Bernabé, et al., *The Effect of Cement on the Strength of Granular Rocks*, Geophys. Res. Lett., **19**, 1511, 1992.
- [7] Berryman, J.G., *Random Close Packing of Hard Spheres and Disks*, Phys. Rev. A, **27**, 1053, 1983.
- [8] Bésuelle, P., *Compacting and Dilating Shear Bands in Porous Rock : Theoretical and Experimental Conditions*, J. Geophys. Res., **106**, 13435, 2001.
- [9] Bésuelle, P., *Experimental Characterisation of the Localisation Phenomenon inside a Vosges Sandstone in a Triaxial Cell*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **37**, 1223, 2000.
- [10] Bésuelle, P., *Evolution of Strain Localisation with Stress in a Sandstone : Brittle and Semi-Brittle Regimes*, Phys. Chem. Earth (A), **26**, 101, 2001.
- [11] Bideau, D. and Hansen, A., *Disorder and Granular Media*, North-Holland, 1993.
- [12] Bideau, D. et al., *Geometrical Properties of Disordered Packings of Hard Disks*, J. Physique, **47**, 1697, 1986.
- [13] Blair, D.L. et al., *Force Distributions in Three Dimensionnal Granular Assemblies : Effects of Packing Order and Interparticle Friction*, Phys. Rev. E, **63**, 41304, 2001.
- [14] Bouchaud, J.P. et al., *Stress Distribution in Granular Media and Non Linear Wave Equation*, J. Physique I, **5**, 639, 1995.
- [15] Bourbie, T. et al., *Acoustique des Milieux Poreux*, Publication de l'I.F.P., Technip, 1986.
- [16] Breton, L. et al., *Stress Response Fonction of a Two-Dimensionnal Ordered Packing of Frictionnal Beads*, Europhys. Lett., arXiv :cond-mat/0205089, 2002.
- [17] Brilliantov, N.V. et al., *Model of Collisions in Granular Gases*, Phys. Rev. E, **53**, 5382, 1996.
- [18] Brilliantov, N.V. and Poschel, T., *Self-Diffusion in Gases*, Phys. Rev. E, **61**, 1716, 2000.
- [19] Brilliantov, N.V. and Poschel, T., *Rolling as a "Continuing Collision"*, Europ. Phys. J. B, **12**, 299, 1999.

- [20] Camborde, F. et al., *Numerical Study of Rock and Concrete Behaviour by Discrete Element Modelling*, Computers and Geotechnics, **27**, 225, 2000.
- [21] Cambou, B. et al., *CISM Courses 385 - Behaviour of Granular Materials*, Springer, 1998.
- [22] Cates, M.E. et al, *Jamming, Force Chains, and Fragile Matter.*, Phys. Rev. Lett., **81**, 1841, 1998.
- [23] Claudin, P. et al., *Model of Stress Fluctuations in Granular Media*, Phys. Rev. E, **57**, 4441, 1998.
- [24] Clough, G.W. et al., *Cemented Sands under Static Loading*, J. Geotech. Eng. Division ASCE, **107**, 799, 1981.
- [25] Coppersmith, S.N. et al., *Model for Force Fluctuations in Bead Packs*, Phys. Rev. E., **53**, 4673, 1996.
- [26] Cundall, P.A. and Strack, O.D.L., *A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies*, Géotechnique, **29**, 47, 1979.
- [27] Cundall, P.A. et al., *Numerical Experiments on Granular Assemblies ; Measurements and Observations*, IUTAM Conference on Deformation and Failure of Granular Materials, 355, 1982.
- [28] Cundall, P.A. and Strack, O.D.L., *Modeling of Microscopic Mechanisms in Granular Material*, Mech. of Granular Materials, Elsevier Science Publishers, 137, 1983.
- [29] Cundall, P.A. et al., *Evolution of Elastic Moduli in a Deforming Granular Assembly*, Powders and Grains 89, Balkema, 319, 1989.
- [30] Da Silva, M. and Rajchenbach, J., *Stress Transmission through a Model System of Cohesionless Elastic Grains*, Nature, **406**, 708, 2000.
- [31] Dass, R.N. et al., *Tensile Stress-Strain Behaviour of Lightly cemented Sand*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **30**, 711, 1993.
- [32] David, C. et al., *The Mechanical Behaviour of Synthetic Sandstone with Varying Brittle cement*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **35**, 759, 1998.
- [33] Davis, R.O. and Selvadurai, A.P.S., *Elasticity and Geomechanics*, Cambridge University Press, 1996.
- [34] DeGennes, P.G., *Static Compression of a Granular Medium : The Soft Shell Model*, Europhys. Lett., **35**, 145, 1996.
- [35] DeGennes, P.G., *Granular Matter : A Tentative view*, Rev. Mod. Phys., **406**, 374, 1999.
- [36] Digby, P.J., *The Effective Elastic Moduli of Porous Granular Rocks*, J. Appl. Mech., **48**, 803, 1981.
- [37] Dodds, J.A., *Simplest Statistical Geometric Model of the Simplest Version of the Multicomponent Random Packing Problem*, Nature, **256**, 187, 1975.
- [38] Dodds, J.A., *Computer Simulation and Statistical Geometric Model for Contacts in Binary Random Two-Dimensional Disk Packings*, Nature, **266**, 614, 1977.
- [39] Domenico, S.N., *Effect of Brine-Gas Mixture on Velocity in an Unconsolidated reservoir*, Geophysics **41**, 882, 1976.
- [40] Domenico, S.N., *Elastic Properties of Unconsolidated Porous Sand Reservoirs*, Geophysics, **42**, 1339, 1977.
- [41] Donzé, F.V., *A Discrete Numerical Model for Brittle Rock Deformation*, Thèse de Doctorat, Institut de Physique du Globe de Paris, 1994.

- 
- [42] Du Bernard Rochy, X., *Les modes de localisations et de propagation de la rupture dans les zones de failles affectant les grès, et les facteurs qui les contrôlent*, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble I, 1992.
- [43] Duffy, J. and Mindlin, D.R., *Stress-Strain Relations and Vibrations of a Granular Medium*, J. Appl. Mech. (ASME), **24**, 585, 1957.
- [44] Dullien, F.A.L. *Porous Media*, Academic Press, 1992.
- [45] Duran, J., *Sables, Poudres et Grains*, Eyrolles Sciences, 1997.
- [46] Dvorkin, J. et al., *The Effect of Cementation on the Elastic Properties of Granular Material*, Mech. Materials, **12**, 207, 1991.
- [47] Dvorkin, J. et al., *Effective Properties of Cemented Granular Materials*, Mech. Materials, **18**, 351, 1994.
- [48] Dvorkin, J. and Yin, H., *Contact Laws for Cemented Grains : Implications for Grain and Cement Failure*, Int. J. Solids Structures, **32**, 2497, 1995.
- [49] Dvorkin, J. and Nur, A., *Elasticity of High-Porosity Sandstones : Theory for Two North Sea Data Sets*, Geophysics, **61**, 1363, 1996.
- [50] Edelsbrunner, H., *Geometry and Topology for Mesh Generation*, Cambridge University Press, 2001.
- [51] Edwards, S.F. and Grinev, D.V., *Statistical Mechanics of Stress Transmission In Disorder Granular Arrays*, Phys. Rev. Lett., **82**, 5397, 1999.
- [52] Edwards, S.F. and Mounfield, C.C., *A Theoretical Model for the Stress Distribution in Granular Matter. Forces in Sandpiles*, Physica A, **226**, 25, 1996.
- [53] Evans, D.J., *On the Representation of Orientation Space*, Mol. Phys., **34**, 317, 1977.
- [54] Finney, J.L., *Random Packings and the Structure of Simple Liquids : 1. The Geometry of Random Close Packing*, Proc. Roy. Soc. London A, **379**, 479, 1970.
- [55] Foerster, S.F. et al., *Measurements of the Collision Properties of Small Spheres*, Phys. Fluids, **6**, 1108, 1994.
- [56] Fortin, J., *Déformation et Perméabilité des Roches Poreuses : Etude d'un Grès de Fontainebleau et d'un Grès de Diemelstadt - Applications aux Bandes de Compaction*, Rapport DEA/ENGREF, 2002.
- [57] Geng, J. et al., *Footprints in Sand : The Response of a Granular Material to Local Perturbations*, Phys. Rev. Lett., **87**, 35506, 2001.
- [58] Geng, J. et al., *Green's Function Measurements in 2D Granular Materials*, Physica D, **87**, 274, 2003.
- [59] Gland, N., *Nonlinear Elasticity of Unconsolidated and Weakly Consolidated Granular Media*, Rapport de Magistère, Schlumberger - ENS, 1999.
- [60] Goddard, J.D., *Non Linear Elasticity and Pressure Dependant Wave Speeds in Granular Media*, Proc. Roy. Soc. Lond. A, **430**, 105, 1990.
- [61] Gropp, W. et al., *MPI - The Complete Reference, Volume 2, The MPI Extensions*, The MIT Press, 1999.
- [62] Gueguen, Y. et Palciauskas, V., *Introduction à la Physique des Roches*, Hermann, 1992.
- [63] Guyer, R.A. and Johnson, P.A., *Nonlinear Mesoscopic Elasticity : Evidence for a New Class of Materials*, Phys. Today, **Avril**, 30, 1999.

- [64] Hareland, G., *Normalized Rock Failure Envelope as a Fonction of Rock Grain Size*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **30**, 715, 1993.
- [65] Hazzard, J.F. and Young, R.P., *Simulating Acoustic Emissions in Bonded-Particle Models of Rock*, North-Holland, Int. J. Rock Mech. Min. Sciences, **7**, 867, 2000.
- [66] Head, D.A. et al., *Robust Propagation Direction of Stresses in a Minimal Granular Packing*, Eur. Phys. J. E., **6**, 99, 2001.
- [67] Hearst, J.R. et al., *Well Logging for Physical Properties*, John Wiley and Sons, 2000.
- [68] Hermann, H.J. and Roux, S., *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*, North-Holland, Elsevier Science Publisher, 1990.
- [69] Holt, R.M., *Particle vs. Laboratory Modelling of In Situ Compaction*, Phys. Chem. Earth (A), **26**, 89, 2001.
- [70] Howell, D. and Behringer, R.P., *Stress Fluctuations in 2D Granular Couette Experiment : A Continuous Transition*, Phys. Rev. Lett, **82**, 5241, 1998.
- [71] IDRIS, *Fortran 95, cours de l'IDRIS*, IDRIS, 2000.
- [72] IDRIS, *MPI - 1 et 2, cours de l'IDRIS*, IDRIS, 2000.
- [73] Issen, K.A., Rudnicki, J.W., *Conditions for Compaction Bands in Porous Rock*, J. Geophys. Res., **105**, 21529, 2000.
- [74] ITASCA Consuling group, *PFC<sup>2D</sup> - Theory and Background*, ITASCA, 1999.
- [75] Jaeger, H.M. and Nagel, S.R., *Physics of the Granular State*, Science, **255**, 1523, 1992.
- [76] Jean, M., *The Non-Smooth Contact Dynamics Method*, Géotechnique, **29**, 47, 1979.
- [77] Jia, X. et al., *Ultrasound Propagation in Externally Stressed Granular Media*, Phys. Rev. Lett., **82**, 1863, 1999.
- [78] Johnson, D.L. and Norris A.N., *Rough Elastic Spheres in Contact : Memory Effects and the Transverse Force*, J. Mech. Phys. Solids, **45**, 1025, 1997.
- [79] Johnson, K.L., *Contact Mechanics*, Cambridge University Press, 1985.
- [80] Kachanov, M., *Elastic Solids with Many Cracks and Related Problems*, Academic Press, 1993.
- [81] Kade, A., *PostScript par l'exemple*, InterEditions, 1987.
- [82] Kansal, A.R. et al., *Non equilibrium Hard-Disk Packings with Controlled Orientational Order*, J. Chem. Phys., **113**, 4844, 2000.
- [83] Kuksenko, V.S., *Model for the Transition from Micro-to Macro-Fracture*, Mechanics of Jointed and Faulted Rocks, Bakema, Rotterdam, 977, 1995.
- [84] Kuwabara, G. and Kono, K., *Restitution Coefficient in a Collision Between Two Spheres*, Japanese J. Appl. Phys., **26**, 1230, 1987.
- [85] Lawn, B., *Fracture of Brittle Solids*, Cambridge University Press, 1993.
- [86] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M., *Theory of Elasticity*, Pergamon, 1970.
- [87] Leurer, K.C. and Dvorkin, J., *Intergranular Squirt Flow in Sand : Grains with Viscous Cement*, Int. J. Sol. Struc., **37** 1133, 2000.
- [88] Li, L. and Holt, R.M., *Particle Scale Reservoir Mechanics*, Oil and Gas Sciences Tech., **77**, 525, 2002.
- [89] Lian, G. et al., *TRUBAL - A Computer Program for Modeling Particle Assemblie*, Report, Department of Civil Engineering of Aston University, 1994.

- 
- [90] Liu, C.H. and Nagel, S.R., *Sound in Sand*, Phys. Rev. Lett., **68**, 2301, 1992.
- [91] Liu, C.H. and Nagel, S.R., *Sound in a Granular Material : Disorder and Non Linearity*, Phys. Rev. B, **48**, 15646, 1993.
- [92] Liu, C.H. et al., *Force Fluctuations in Bead Packs*, Science, **269**, 513, 1995.
- [93] Liu, Z. et al., *Micromechanics of Granular Materials - Numerical Simulation of the Effects of Heterogeneities*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci. and Geomech., **30**, 1281–1284, 1993.
- [94] Lockner, D., *The Role of Acoustic Emission in the Study of rock fracture*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **30**, 883, 1993.
- [95] Lubachevsky, B.D. and Stillinger F.H., *Geometric Properties of Random Disk Packings*, J. Stat. Phys., **60**, 561, 1990.
- [96] Lubachevsky, B.D., *How to simulate Billiards and Similar Systems*, J. Comp. Phys., **94**, 255, 1991.
- [97] Lovoll, G. et al., *Force Measurements on Static Granular Materials*, Phys. Rev. E, **60**, 5872, 1999.
- [98] Main, I., *Statistical Physics, Seismogenesis, and Seismic Hazard*, Reviews of Geophysics, **34**, 433, 1996.
- [99] Makse, H.A. et al. *Why Effective Medium Theory Fails in Granular Materials*, Phys. Rev. Lett., **83**, 5070, 1999.
- [100] Makse, H.A. et al., *Force Fluctuations in Unconsolidated Granular Materials under Uniaxial Compression*, Phys. Rev. Lett, **84**, 4160, 2000.
- [101] Mavko, G. et al., *The Rock Physics Handbook*, Cambridge University Press, 1998.
- [102] Menéndez, B. et al., *Micromechanics of brittle faulting and cataclastic flow in Berea sandstone*, J. Struct. Geol., **18**, 1, 1996.
- [103] Menéndez et al., *Confocal Scanning Laser Microscopy Applied to the Study of Pore and Crack Networks in Rock*, Comp. Geosciences, **27**, 1101, 2001.
- [104] Metcalf, M. and Reid, J., *Fortran 90/95 Explained*, Oxford University Press, 1999.
- [105] Mindlin, R.D., *Compliance of Elastic Bodies in Contact*, Trans. ASME, **71**, 259, 1949.
- [106] Mindlin, R.D. and Deresiewicz, H., *Elastic Spheres in Contact under Varying Oblique Forces*, J. Appl. Mech., **75**, 327, 1953.
- [107] Mindlin, R.D., *Mechanics of Granular Media*, Lecture U.S. Nat. Congress Appl. Mech, **13**, 1954.
- [108] Mueggenburg, N.W., *Stress Transmission through Three-Dimensional Ordered Granular Arrays*, Phys. Rev. E, **66**, 31304, 2002.
- [109] Mueth, D.M. et al., *Force Distribution in a Granular Medium*, Phys. Rev. E, **57**, 3164, 1998.
- [110] Muller, D., *Techniques Informatiques Efficaces pour la Simulation des Milieux Granulaires par des Méthodes d'Eléments Distincts*, Thèse de Doctorat, Ecole polytechnique Fédérale de Lausanne, 1996.
- [111] Muller, J., *Formulaire Technique de Mécanique Générale*, F.Paillart, 1977.
- [112] Nataf H.C. et al., *La Physique de la Terre*, Belin, CNRS Editions, 2000.
- [113] Norris, A.N. and Johnson, D.L., *Nonlinear Elasticity of Granular media*, J. Appl. Mech., **64**, 39, 1997.

- [114] Oda, M. and Iwashita, K., *Mechanics of Granular Materials*, A.A. Balkema, 1999.
- [115] Ovarlez, G. et al., *Statique et Rhéologie d'un Milieu Granulaire Confiné*, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 2002.
- [116] Ovarlez, G. et al., *A Crucial Test for Granular Mechanics*, Phys. Rev. E, **67**, 2003.
- [117] Pacheco, P.S., *Parallel Programming with MPI*, Morgan Kaufman Publishers, 1997.
- [118] Paterson, M.S., *Experimental Rock Deformation ; The Brittle Field*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1978.
- [119] Plona, T.J. and Cook, J.M., *Effects of Stress Cycles on Static and Dynamic Young's Moduli in Castlegate Sandstone*, J. Rock Mech., **155**, 1995.
- [120] Poschel, T. and Brilliantov, N.V., *Extremal Collision Sequences of Particles on a Line : Optimal Transmission of Kinetic Energy*, Phys. Rev. E, **63**, 2001.
- [121] Press, W.H. et al., *Numerical Recipes in Fortran 77*, Cambridge University Press, 1992.
- [122] Press, W.H. et al., *Numerical Recipes in Fortran 90*, Cambridge University Press, 1996.
- [123] Press, W.H. et al., *Numerical Recipes in C++*, Cambridge University Press, 2002.
- [124] Radjai, F. et al., *Force Distributions in Dense Two-Dimensional Granular Systems*, Phys. Rev. Lett., **77**, 274, 1996.
- [125] Radjai, F., *Bimodal Character of Stress Transmission in Granular Packings*, Phys. Rev. Lett., **80**, 61, 1998.
- [126] Rahman, A., *Correlations in the Motions of Atoms in Liquid Argon*, Phys. Rev. A, **136**, 405, 1964.
- [127] Rappaport, D.C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, 1995.
- [128] Ramirez, R. et al., *Coefficient of Restitution of Colliding Viscoelastic Spheres*, Phys. rev. E, **60**, 4465, 1999.
- [129] Reydellet, G. and Clement, E., *Green's Fonction Probe of a Static Granular Piling*, Phys. Rev. Lett., **86**, 3308, 2001.
- [130] Reydellet, G., *Mesures Expérimentales de la Fonction Réponse d'un matériau Granulaire*, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 2002.
- [131] Richard, P. et al., *Tessellation of Binary Assemblies of Spheres*, Physica A, **259**, 205, 1998.
- [132] Richard, P. et al., *Geometrical Characterization of Hard-Sphere Systems*, Phys. Rev. E, **60**, 4551, 1999.
- [133] Richard, P. et al., *A Model of Binary Assemblies of Spheres*, Eur. Phys. J. E, **6**, 295, 2001.
- [134] Rintoul, M.D. and Torquato, S., *Hard-Sphere Statistics along the Metastable Amorphous Branch*, Phys. Rev. E, **58**, 532, 1998.
- [135] Rose, J.L., *Ultrasonic Waves in Solid Media*, Cambridge University Press, 1999.
- [136] Rudnicki, J.W., Rice, J.R., *Conditions for the Localization of Deformation in Pressure-Sensitive Dilatant Materials*, J. Mech. Phys. Solids, **23**, 371, 1975.
- [137] Samarskii, A.A., *MPI - The Theory of Difference Schemes*, Marcel Dekker, 2001.
- [138] Savage, S.B., *Modeling and Granular Material Boundary Value Problems*, Physics of Dry Granular Media, Kluwer Academic Publishers, 25, 1998.
- [139] Schafer, J. et al., *Force Schemes in Simulations of Granular Materials*, J. Phys. I France, **6**,5, 1996.

- 
- [140] Schubnel, A., *Mécanique de la Dilatance et de la Compaction des Roches*, Thèse de Doctorat, Institut de Physique du Globe de Paris, 2002.
- [141] Schwager, T. and Poschel, T. al., *Coefficient of Normal Restitution of Viscous Particles and Cooling Rate of Granular Gases*, Phys. Rev. E, **57**, 650, 1998.
- [142] Scott, D.R., *Seismicity and Stress Rotation in a Granular Model of the Brittle Crust*, Nature, **381**, 592, 1996.
- [143] Serero, D. et al., *Stress Response Fonction of a Granular layer : Quantitative Comparison between Experiments and Isotropic Elasticity*, arXiv :cond-mat/0310564, 2001.
- [144] Shah, K.R. and Wong, T.F., *Fracturing at Contact Surfaces Subjected to Normal and Tangential Loads*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **34**, 727, 1997.
- [145] Snir, M. et al., *MPI - The Complete Reference, Volume 1, The MPI Core*, The MIT Press, 1999.
- [146] Staron, L., *Etude Numérique des Mécanismes de Désatbilisation des Pentes Granulaires*, Thèse de Doctorat, Institut de Physique du Globe de Paris, 2002.
- [147] Steinhart, P.J., *Bond-Orientational Order in Liquids and Glasses*, Phys. Rev. B, **28**, 784, 1983.
- [148] Thornton, C. et al. *Fracture of particulate solids*, Powder and Grains 97, Balkema, 131, 1997.
- [149] Timoshenko, S.P. and Goodier, J.N., *Theory of Elasticity*, McGraw-Hill International Editions, 1970.
- [150] Tkachenko, T.A. and Witten, T.A., *Stress Propagation Through Frictionless Granular Material*, Phys. Rev. E, **60**, 687, 1999.
- [151] Torquato, S. et al., *Is Random Close Packing of Spheres Well Defined*, Phys. Rev. Lett., **84**, 2064, 2000.
- [152] Torquato, S., *Random Heterogeneous Materials*, Springer, 2002.
- [153] Troadec, J.P. et al, *A Model of Binary Assemblies of Discs and its Application to Segregation Study*, J. Phys. I France, **4**,1121, 1994.
- [154] Vanel, L., *Etude Expérimentale de l'Equilibre Mécanique d'un Milieu Granulaire : Exemples du Silo et du Tas de Sable*, J. Geophys. Research, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 1999.
- [155] Vanel, L. et al., *Memories in Sand : Experimental Tests of Construction History on Stress Distributions under Sandpiles*, Phys. Rev. E, **60**, 5040, 1999.
- [156] Velicky, B. and Caroli, C., *Pressure Dependence of the Sound Velocity in a Two-Dimensional Lattice of Hertz-Mindlin Balls : Mean-Field Description*, Phys. Rev. E, **65**, 1, 2002.
- [157] Verlet, L., *Computer Experiments on Classical Fluids I. thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*, Phys. Rev., **159**, 98, 1967.
- [158] Walton, K., *The Oblique Compression of Two Elastic Spheres*, J. Mech. Phys. Solids, **26**, 139, 1978.
- [159] Walton, K., *The Effective Moduli of a Random Packing of Spheres*, J. Mech. Phys. Solids, **35**, 213, 1987.
- [160] Winkler, K.W., *Contact Stiffness in Granular Porous Materials : Comparison between Theory and Experiment*, Geophys. Research Lett., **10**, 1073, 1983.



- [161] Wong, T.F. and Wu, L.C., *Tensile Stress Concentration and Compressive Failure in Cemented Granular Material*, Geophys. Research Lett., **22**, 1649, 1995.
- [162] Wong, T.F., et al., *The Transition from Brittle Faulting to Cataclastic Flow in Porous Sandstones : Mechanical Deformation*, J. Geophys. Research, **102**, 3009, 1997.
- [163] Wong, T.F. et al., *Mechanical Deformation in porous sandstones*, J. Geophys. Research, **102**, 3009, 1997.
- [164] Wu, X.Y. et al., *Micromechanics of Compressive Failure and Spatial Evolution of Anisotropic Damage in Darley Dale Sandstone*, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., **37**, 143, 2000.
- [165] Yin, H., *Acoustic Velocity and Attenuation of Rocks : Isotropy, Intrinsic Anisotropy and Stress-induced Anisotropy* , PhD thesis, Stanford University, 1993.
- [166] Yin, H. and Dvorkin, J., *Strength of Cemented Grains*, Geophys. Research Lett., **21**, 903, 1994.
- [167] Zhang, J., et al., *Micromechanics of Pressure-Induced Grain Crushing in Porous Rocks*, J. Geophys. Research, **95**, 341, 1990.
- [168] Zhu, W., and Wong, T.F, *The Transition from Brittle Faulting to Cataclastic Flow : Permeability Evolution*, J. Geophys. Research, **102**, 3027, 1997.

## **”Etude numérique des propriétés mécaniques et des processus de déformation et d’endommagement des matériaux granulaires”**

### **Résumé**

La compréhension des propriétés structurales et mécaniques des assemblages granulaires reste un problème ouvert. La modélisation numérique de ces milieux par Dynamique Moléculaire permet de répondre à certaines interrogations. Tout d’abord, nous étudions les effets des paramètres de mélange sur le degré d’ordre et la distribution des contraintes dans ces arrangements de grains. Ensuite, nous nous intéressons aux propriétés acoustiques de ces milieux, très nonlinéaires comparées aux solides élastiques continus ; nos simulations servent à clarifier les déficiences de la Théorie de Milieu Effectif, qui rend partiellement compte de la dépendance en pression des modules élastiques, et elles montrent que la relaxation des grains après une déformation infinitésimale est une composante essentielle du module de cisaillement. Il y a donc un besoin pour une formulation alternative et l’approche traditionnelle élasto-plastique a été remise en cause par des nouveaux modèles. Si l’expérience numérique menée de mesure de la fonction réponse (champ de contrainte généré par une force ponctuelle) montre une remise à l’échelle élastique, elle rend également compte de phénomènes importants de relaxation. Les mécanismes de déformation des matériaux granulaires ont aussi été étudiés en simulant des essais biaxiaux ; ils reproduisent qualitativement les données mécaniques classiques (pic de contrainte, transition compaction/dilatance) et aussi la localisation de la déformation ; à faible pression, les rotations de grains accommodent la déformation tandis qu’à forte pression, la mobilisation du frottement est plus marquée. Enfin, nous proposons un modèle probabilistique d’endommagement de roches granulaires qui prédit une dépendance de l’endommagement avec à la fois l’hétérogénéité de cimentation et la taille d’échantillon. Ces prédictions sont confirmées par des simulations qui permettent également de mettre en évidence deux régimes d’endommagement successifs, diffus puis concentré en amas.

**Mots-clés:** Matériau Granulaire, Eléments Discrets, Mélange Bidisperse, Désordre, Milieu Effectif, Relaxation, Fonction Réponse, Elasticité, Déformation, Localisation, Cimentation, Endommagement

## **”Numerical study of mechanical properties and of deformation and damage process of granular materials”**

### **Abstract**

The understanding of structural and mechanical properties of granular assemblies remains an open issue. The numerical modeling of granular media, using the Molecular Dynamic approach, brings some answers to critical problems. At first, we are studying the effects of mixture parameters on the degree of order and on the stress distribution in these arrangements of grains. Next, we are interested in the acoustic properties of these media, which are very nonlinear in comparison to continuous elastic solids ; ours simulations serve to clarify the deficiencies of Effective Medium Theory, which only partially account for the dependency of elastic moduli with pressure. We show that relaxation of grains, following an infinitesimal deformation is an essential component of the shear modulus. There is clearly a need for an alternative formulation and the traditional elasto-plastic approach is faced with new theories. If the numerical simulations led in this study, which measure the response function of granular media (stress field generated by a point force), show an elastic scaling, it also accounts for important relaxation process. The deformation mechanisms of granular materials were also study by simulating bixial compression tests, which reproduce qualitatively well the classical mechanicals data (stress peak, compaction/dilatancy transition), and also localization of the deformation ; while at low pressure, grains rotations accommodate the deformation, at high pressure, the mobilization of friction is more pronounced. Finally, we propose a probabilistic model of damage of granular rocks, which predicts a dependency of damage both with the cementation heterogeneity and with the sample size. These predictions are confirmed by simulations, which also highlight two successive damage behaviors, diffuse at first and then concentrated in clusters.

**Keywords:** Granular Material, Discret Elements, Binary Mixture, Disorder, Effective Medium, Relaxation, Response Fonction, Elasticity, Deformation, Localization, Cementation, Damage

